

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Болотовой Ирины Баторовны**  
«Некоторые особенности методов исследования спектров высокого разрешения молекул  
типа сферического, симметричного и асимметричного волчка»  
по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

Корректная трактовка колебательно-вращательных спектров молекул в значительной степени опирается на теоретические расчеты. Поэтому разработка новых и усовершенствование уже существующих теоретических методов исследования спектров высокого разрешения молекул является **актуальной** задачей.

Диссертационная работа И. Б. Болотовой условно разбита на три части, посвященные рассмотрению тех или иных трудностей в описании спектров молекул в соответствии со степенью их симметрии и их преодолению. Так, для молекул типа сферического волчка **впервые** получены в аналитической форме выражения для колебательных волновых функций и матричных элементов операторов гамильтониана, ответственных за характерные для сферических волчков «тетраэдрические» расщепления в спектре. На основе полученных результатов разработан оригинальный пакет программ, позволяющий рассчитывать спектры сферических волчков. Любопытным результатом, полученным при рассмотрении молекул  $XYZ_3$  и  $XY_3$  симметрии  $C_{3v}$ , являются выражения, связывающие различные спектроскопические параметры молекулы. Их эффективность продемонстрирована на примере молекулы фторметана, для которой также была получена предсказательная информация для экспериментов. На основе предложенного алгоритма были **впервые** исследованы некоторые «горячие» и комбинационные полосы молекулы  $SO_2$ .

Актуальность темы, научная новизна и ценность полученных результатов, их достоверность не вызывают сомнений. Результаты работы широко представлены в печати, прошли апробацию на российских и международных конференциях.

Считаю, что диссертационная работа И. Б. Болотовой по содержанию и объему проведенных исследований удовлетворяет требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а её автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика.

Профессор кафедры высшей математики ФТАОУ ВО НИ ТПУ  
д. ф.-м. н., доцент

**Килин Виктор Андреевич**

Подлинность подписи Килина В.А. подтверждаю:  
Ученый секретарь Ученого совета НИ ТПУ

10.11.2015

Шифр специальности: 01.04.02 – теоретическая физика

e-mail: [tpu@tpu.ru](mailto:tpu@tpu.ru)

Тел.: +7 (3822) 606333

Почтовый адрес:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
«Национальный исследовательский Томский политехнический университет», Россия, 634050, г.  
Томск, проспект Ленина, дом 30.

