

ОТЗЫВ

об автореферате диссертации Болотовой Ирины Баторовны «Некоторые особенности исследования спектров высокого разрешения молекул типа сферического, симметричного и асимметричного волчка», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

Теоретическое исследование колебательно-вращательных спектров высокого разрешения многоатомных молекул важно не только для понимания динамических процессов внутри- и межмолекулярного характера, но и для решения практических задач высокочувствительного анализа газовых смесей при интерпретации слабых линий поглощения примесных молекул.

В работе Болотовой И. Б. рассмотрены проблемы в описании спектров молекул типа сферического, симметричного и асимметричного волчка и найдены подходы к их решению. Так, для молекул типа сферического волчка впервые в аналитическом виде получены колебательные волновые функции симметрии E , что позволило рассчитать матричные элементы операторов, ответственных за «тетраэдрические» расщепления в спектрах такого типа молекул. На основе полученных результатов разработан программный пакет для исследования структуры спектров молекул типа сферического волчка, отличающийся простотой и универсальностью.

Развитый применительно к молекулам типа асимметричного волчка метод определения структуры колебательно-вращательных полос, реализованный в виде вариационной процедуры, позволяет проводить анализ сверхслабых спектров высокого разрешения молекул семейства XY_2 . Это убедительно продемонстрировано на примере спектра молекулы SO_2 в области составных и обертоновых переходов.

Следует отметить, что за период с 2011 по 2015 год Болотова И.Б. опубликовала в соавторстве 10 печатных работ в высокорейтинговых журналах и доложила результаты на 7 международных конференциях. При этом её вклад в решение поставленных задач является определяющим. Это еще раз свидетельствует о новизне полученных результатов и о высокой научной квалификации автора.

На основании вышесказанного можно сделать вывод, что диссертация Болотовой И. Б. удовлетворяет требованиям ВАК России, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор, Ирина Баторовна Болотова, заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

Зав.лабораторией Института химии высокочистых
веществ РАН им.Г.Г.Девярых
доктор химических наук


П.Г.Сенников
(Сенников Петр Геннадьевич)

603950, г. Нижний Новгород, ул.Тропина, 49

e-mail: sen@ihps.nnov.ru

тел.: +7 (831)4627162

18.11.2015
лаборатория химических методов получения высокочистых веществ

Подпись руки Сенникова П.Г. заверяю

Ученый секретарь ИХВВ РАН д.х.н.



Лазукина О.П.