



О Т З Ы В

ведущей организации о диссертации Болотовой Ирины Баторовны «Некоторые особенности методов исследования спектров высокого разрешения молекул типа сферического, симметричного и асимметричного волчка», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика

Колебательно- вращательные спектры молекулярных газов представляют уникальный источник информации о структуре молекул, внутримолекулярных силах, вероятностях переходов и процессах, происходящих при столкновениях. Развитие и расширение методов теоретического анализа спектров, методов вычисления энергетических уровней и волновых функций, вероятностей дипольных переходов, представляет актуальную задачу теоретической физики.

Структура диссертации. Диссертация Болотовой И. Б. состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы, списков рисунков и таблиц, трех приложений. Диссертация содержит 180 страниц текста, 15 рисунков, 25 таблиц, список цитированной литературы содержит 145 пунктов.

В первой главе приводится необходимый литературный обзор работ по теории колебательно – вращательных спектров молекул и отдельный параграф, в котором изложены основные сведения об экспериментальных основах колебательно – вращательной спектроскопии. Обзор достаточно полный и правильно отражает основные результаты и имеющиеся проблемы в теории колебательно – вращательных спектров молекул.

Во второй главе вопросы, связанные с определением симметризованных колебательных волновых функций молекул симметрии T_d , а также вычисление матричных элементов эффективного гамильтониана. В этой же главе описан разработанный автором программный пакет SPHETOM, направленный на вычисление спектров молекул типа сферического волчка. Проведено тестирование пакета на примере молекулы GeH_4 .

Третья глава диссертации посвящена анализу спектров молекул типа симметричного волчка. Здесь автором, на основе анализа свойств симметрии, приведены новые результаты, проведено вычисление спектроскопических постоянных: колебательно – вращательных, центробежных и резонансных для молекул типа XY_3Z , XY_3 . Существенно, что автор обнаружила связи между главными вкладами этих постоянных, которые определяют корреляцию между спектроскопическими параметрами. Впервые проведен анализ спектра молекулы CH_3F в диапазоне $2400-2800\text{ см}^{-1}$, впервые получены энергетические уровни, параметры эффективного гамильтониана, описывающего спектр на уровне точности измерений.

В заключительной четвертой главе приводятся результаты анализа спектра поглощения молекулы SO_2 в двух диапазонах: $1500-2300$ и $2600-2900\text{ см}^{-1}$. Автор предложила метод анализа спектра, основанный на вариации вращательных и центробежных постоянных при поиске наиболее правдоподобной модели эффективного гамильтониана. В результате получены новые данные об энергетическом спектре молекулы, предложены теоретические модели, описывающие спектр на уровне, близком к точности измерений.

В заключении формулируются основные результаты и выводы диссертационной работы. В приложениях приведены соотношения,

выражающие матричные элементы гамильтониана, ответственные за тетраэдрическое расщепление в молекулах типа XY_4 , центры линий молекулы CH_3F и уровни энергии молекулы SO_2 .

Автореферат диссертации полностью соответствует ее содержанию.

Оценивая в целом диссертационную работу, необходимо отметить следующее.

Актуальность темы диссертации обусловлена в первую очередь тем, что детальное знание колебательно – вращательной структуры спектров молекул необходимо для решения широкого круга научных и практических задач, таких как атмосферная оптика, спектроскопия планет солнечной системы и экзопланет, производство сверхчистых веществ, экологический контроль окружающей среды, лазерная техника, физика пламени и низкотемпературной молекулярной плазмы, разделение изотопов и ряда других.

Научная ценность и практическая значимость работы. В работе, на основе анализа симметричных свойств молекул типа XY_4 , XY_3Z и XY_3 получен целый ряд новых соотношений, имеющих ясную ценность и практическую значимость. Основной результат – полученные автором явные выражения для волновых функций, спектроскопических постоянных молекул типа XY_4 , XY_3Z и XY_3 . Это позволяет значительно упростить расчеты уровней энергии и волновых функций, учесть корреляцию в значениях параметров при решении обратных задач. Не менее ценной является новая информация об энергетическом спектре молекул CH_3F и SO_2 . Автором предложены также и некоторые новые методы и приемы анализа слабых спектров в случаях, когда традиционные методы, основанные на методе комбинационных разностей,

оказываются неработоспособными. В целом результаты работы представляют решение актуальной научной задачи.

Достоверность результатов работы обеспечивается использованием уже разработанных и апробированных теоретических методов и совпадением результатов расчета и измерений.

Новизна полученных результатов несомненна, впервые получены соотношения для вращательных, колебательно – вращательных, центробежных и резонансных постоянных для молекул, рассмотренного в работе типа.

Публикации. Результаты работы опубликованы в 27 статьях (из них 10 в журналах, рекомендованных ВАК) и докладывались на Всероссийских и Международных конференциях.

К недостаткам работы следует отнести следующее.

1. В диссертации используется теория возмущений для вывода эффективного гамильтониана, но отсутствует обсуждение возможной расходимости рядов в эффективном гамильтониане. Резонансы в явном виде не учитываются при выводе формул для спектроскопических постоянных.
2. Заключительная, четвертая глава диссертации внутренне не связана с остальным содержанием работы. Создается впечатление, что она включена в диссертацию «для количества».
3. Непонятно предназначение пятого параграфа первой главы. В ней в действительности, нет обсуждения экспериментальных основ колебательно – вращательной спектроскопии, а приводятся отрывочные сведения о некоторых особенностях Фурье - спектроскопии.
4. Имеются не исправленные опечатки, ошибки в формулах.

Однако указанные недостатки не препятствуют общей положительной оценке работы. Считаем, что диссертационная работа Болотовой Ирины Баторовны «Некоторые особенности методов исследования спектров высокого разрешения молекул типа сферического, симметричного и асимметричного волчка» удовлетворяет всем требованиям ВАК России, предъявляемым к кандидатским диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а диссертанта – заслуживающим присуждения этого звания.

Результаты работы целесообразно использовать в ИОА СО РАН, ИФА РАН, ИПФ РАН, Томском госуниверситете, Московском университете.

Диссертационная работа была заслушана 7 октября 2015 г. на заседании семинара отделения спектроскопии атмосферы Института оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, протокол №18.

Председатель семинара отделения спектроскопии атмосферы,
зам директора ИОА СОРАН по направлению «спектроскопия атмосферы»,
д.ф.-м.н., профессор



Пономарев Юрий Николаевич

Отзыв составил гл.н.с. лаб. молекулярной спектроскопии ИОА СО РАН,
д.ф.-м.н., профессор



Быков Александр Дмитриевич

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук

634055, г. Томск, площадь Академика Зуева, 1; <http://www.iao.ru/>;
mgg@iao.ru; +7 (3822) 492738