

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

научного сотрудника отделения нелинейной динамики и оптики, отдел 380 ФГБНУ «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук», кандидата физико-математических наук Овсянникова Романа Ильича о 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.

Колебательно-вращательная спектроскопия высокого разрешения является одним из основных источников информации о структуре и свойствах молекул. Теоретическое исследование уровней энергии, волновых функций и вероятностей дипольных переходов, а также их последующее сравнение с экспериментальными данными, позволяет не только проводить идентификацию экспериментальных спектров, но и получать информацию о структуре и состояниях молекул, что находит широкое применение во многих областях науки.

Актуальность исследования обусловлена неработоспособностью «классического» подхода эффективных гамильтонианов в спектроскопических задачах, связанных с молекулами высокой симметрии; а также общей необходимостью в исследовании спектров молекул как для понимания их физических состояний этих молекул, так и для множества приложений. Автором модифицирован «классический» подход эффективных гамильтонианов, сделан применимым для анализа спектров молекул с высокой степенью симметрии. Модификация включает в себя учёт так называемых «тетраэдрических» расщеплений, возникающих в (тетраэдрических) молекулах типа сферического волчка; учёт корреляции параметров гамильтониана при решении обратной спектроскопической задачи для молекул типа симметричного волчка. В диссертации были получены **новые результаты**, а именно:

- Автором в аналитическом виде получены выражения для колебательных волновых функций (неприводимого представления E) молекул типа сферического волчка. Полученные результаты положены в основу программного пакета, разработанного для анализа спектров таких молекул, работоспособность которого показана на примере анализа спектра молекулы герман, GeH_4 .

- Разработан метод количественной оценки резонансных параметров молекул типа симметричного волчка, установлены ранее неизвестные соотношения между спектроскопическими параметрами молекул такого типа.

- Проведен анализ тонкой структуры спектров молекулы SO_2 , в том числе некоторых очень слабых полос. Получена новая, ранее неизвестная информация о структуре спектров молекулы.

Достоверность полученных в диссертационной работе результатов не вызывает сомнений, поскольку исследования основаны на общих принципах теоретической колебательно-вращательной спектроскопии с использованием широко известных эффективных методов операторной теории возмущений и теории неприводимых тензорных операторов. Стоит также отметить, что полученные автором результаты совпадают с доступными результатами других авторов при условии наличия таковых.

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, трех приложений, списка литературы, состоящего из 145 наименований. По объему и структуре работа соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

Во **введении** обоснована актуальность выбранной темы, определены цели и задачи работы, а также сформулирована научная новизна проводимых исследований, их научная и практическая значимость.

Первая глава содержит теоретические сведения, на которых базируется работа. В частности, объясняется физический смысл и приводится математическая оценка точности

использования приближения Борна-Оппенгеймера, приводятся основные сведения из колебательно-вращательной теории, операторной теории возмущений, описывается схема построения колебательно-вращательного гамильтониана молекулы во внутримолекулярных координатах.

Вторая глава посвящена проблеме исследования спектров высокого разрешения тетраэдрических молекул типа сферического волчка. В аналитическом виде получены волновые функции неприводимого представления E молекул типа сферического волчка, а также рассчитанные на их основе матричные элементы гамильтониана, описывающие «тетраэдрические» расщепления в спектре. Полученные результаты использовались при разработке программного пакета «*SPHETOM*», эффективность которого продемонстрирована на примере анализа спектра молекулы герман. Пакет программ «*SPHETOM*» имеет ряд преимуществ перед альтернативным пакетом программ «*XTDS*», более удобен для решения целого ряда спектроскопических задач.

В третьей главе приводятся результаты, позволяющие установить связь (корреляцию) между различными спектроскопическими характеристиками молекул XYZ_3 и XY_3 типа симметричного волчка симметрии C_{3v} . Используя известную связь между спектроскопическими параметрами была улучшена процедура оптимизации значений этих параметров, в результате чего процедура нахождения молекулярных спектров молекул XYZ_3 и XY_3 (путём решения обратной задачи) приобрела дополнительную устойчивость и точность. Применимость соотношений проиллюстрирована на примере молекулы фторметана CH_3F . За счёт использования соотношений корреляции параметров была достигнута точность 0.0005 см^{-1} при восстановлении экспериментальных данных этой молекулы. Такая точность в работе названа удовлетворительной, однако с точки зрения альтернативного к эффективному подходу к расчётам молекулярных спектров (подходу из первых принципов), такая точность характеризуется как сверхвысокая.

В четвертой главе проводится анализ спектров высокого разрешения молекулы SO_2 . Здесь использована процедура, позволяющая исследовать спектры очень слабых «горячих» и комбинационных полос молекул (которые обычно трудноанализируемы на фоне более сильных полос из-за их слабых интенсивностей и из-за сильного взаимного возмущения взаимодействующих полос), а также приведена новая информация о структуре спектров молекулы SO_2 . Для нахождения очень слабых «горячих» и комбинационных полос путём решения обратной задачи, стандартные процедуры фита изначально не применимы (функция невязки представляет собой очень острые пики на квазислучайном фоне). Поэтому, как было показано в работе, изначально необходимо найти параметры гамильтониана перебором, и лишь затем использовать стандартные процедуры фита, подставив туда подобранные значения в качестве начальных условий.

Общие выводы и результаты, полученные в работе, представлены в **заключении**.

В приложениях А-В приведены полученные в работе результаты, а именно, выражения для матричных элементов молекул типа сферического волчка, колебательно-вращательные переходы в спектре молекулы CH_3F и значения колебательно-вращательных энергий молекулы SO_2 .

Диссертация написана хорошим научным языком и легко читаема, положения диссертации хорошо аргументированы. Хочется отдельно отметить многоплановость работы: и теоретическая часть с аналитическими выкладками, и программирование с освоением численных методов, и расчёт с получением конкретного спектроскопического результата, и кропотливая идентификация экспериментальных спектров.

По работе имеются следующие замечания:

1. Незначительная избыточность языка: Прикладные приложения стр. 4, пакет программ

программы стр. 60.

2. Опечатки: операторпой стр. 22, намильтониан стр. 23, фисированной стр. 51, коррректное стр. 59, вращательно расщепление стр. 74).

3. Обозначение «размерность неприводимого представления» объясняется в п. 2.4, а первый раз используется в п. 1.4, что несколько неудобно для понимания при последовательном чтении. В п. 2.4 «размерность неприводимого представления» обозначена вертикальными чертами, в п. 3.1 для неприводимого представления E вообще опущен соответствующий символ размерности, а в остальных случаях эта размерность обозначена через квадратные скобки.

4. Стр. 39: «значения элементов матрицы гамильтониана остаются реальными» следует исправить на «значения элементов матрицы гамильтониана остаются действительными»

5. При чтении таблицы 2.2 возникает иллюзия, что присутствуют два одинаковых столбца. Тем более что озаглавлены эти столбцы одинаково.

6. При сравнении экспериментального и синтетического спектра молекулы GeH_4 (рис. 2.1) не приведена величина ошибки воспроизведения спектра (по частотам и интенсивностям). Из самого рисунка при существующем масштабе такую точность определить трудно.

Замечания коснулись лишь оформления работы, в целом их можно охарактеризовать как «Незначительно страдает русский язык, наглядность изложения, строгость соблюдения единообразных обозначений». Разумеется, сделанные замечания не снижают научной важности полученных результатов и общей положительной оценки диссертационной работы. Результаты диссертации опубликованы в рецензируемых журналах, а также были представлены на российских и международных конференциях. Автореферат диссертации полностью и достоверно отражает её содержание.

Считаю, что диссертационная работа «Некоторые особенности методов исследования спектров высокого разрешения молекул типа сферического, симметричного и асимметричного волчка» соответствует всем требованиям ВАК России, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика, а её автор, Болотова И. Б., заслуживает присуждения искомой степени.

Официальный оппонент,

Роман Ильич Овсянников

кандидат физико-математических наук,
научный сотрудник ИПФ РАН

18.11.2015

ФГБНУ «Федеральный исследовательский центр Институт
прикладной физики Российской академии наук»
603950 Россия, г. Нижний Новгород. ГСП-120, ул. Ульянова, 46
e-mail: ovsyannikov@appl.sci-nnov.ru; тел.: +7 (831) 416-49-32

Подпись Овсянникова Романа Ильича заверяю
Ученый секретарь ИПФ РАН,
кандидат физико-математических наук



И.В. Корюкин