

ОТЗЫВ

официального оппонента о диссертации Болотовой Ирины Баторовны «Некоторые особенности методов 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.

Диссертация И. Б. Болотовой посвящена разработке новых подходов и усовершенствованию традиционных методов исследования колебательно-вращательных спектров высокого разрешения многоатомных молекул с учетом степени их симметрии.

На протяжении многих лет остается **актуальной** задача исследования спектров молекул типа сферического волчка, к которым относятся, например, молекулы типа XY_4 , являющиеся важнейшим компонентом во многих промышленных процессах, а также представляющие интерес для астрофизики, атмосферной оптики и многих других. Однако ввиду наличия «тетраэдрических» расщеплений в спектре, обусловленных высокой степенью симметрии таких молекул, проблема исследования особенностей их спектров до сих пор представляет собой сложную задачу. Одним из **новых результатов**, полученных в диссертационной работе, следует отметить впервые найденные в аналитическом виде колебательные волновые функции симметрии E и матричные элементы для молекул типа сферического волчка. На основе полученных результатов соискателем была создана программа, позволяющая исследовать отдельные энергетические состояния и их полиады для молекул XY_4 . В работах предшественников такие исследования проводились лишь в численном виде и при наличии информации о всех состояниях с меньшей энергией.

К новым результатам, полученным в диссертации, относятся найденные на основе операторной теории возмущений соотношения между спектроскопическими параметрами для молекул XYZ_3 и XY_3 , которые позволяют предсказывать значения таких резонансных и других параметров, которые зачастую сложно определить из эксперимента. Эффективность полученных результатов показана на примере впервые исследованной полиады взаимодействующих полос молекулы фторметана. Следует отметить, что соискатель непосредственно участвовала в экспериментальных исследованиях инфракрасных спектров молекул фторметана и двуокиси серы. В результате были получены новые результаты в интерпретации спектров высокого разрешения этих молекул.

Содержание работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка использованной литературы из 145 наименований и приложений. По объему, оформлению и структуре работа удовлетворяет требованиям, установленным для кандидатских диссертаций.

Введение содержит обоснование актуальности выбранной темы, цели и задачи диссертационного исследования, обоснование научной и практической значимости результатов.

Первая глава диссертации имеет вводный характер и посвящена описанию методов исследования многоатомных молекул, построения колебательно-вращательного гамильтониана произвольной молекулы, основным положениям операторной теории

возмущений и теории неприводимых тензорных операторов. Данные сведения используются при изложении оригинальной части работы.

Вторая глава содержит описание полученных в симметризованной форме колебательных волновых функций молекулы типа сферического волчка, а также рассчитанные на их основе матричные элементы операторов, ответственных за «тетраэдрические» расщепления в спектре таких молекул. Описан разработанный с участием автора программный пакет «*SPHETOM*» и показано, что спектр, рассчитанный с помощью данной программы для молекулы тетрагидрида германия хорошо согласуется с экспериментально зарегистрированным спектром.

В **третьей главе** рассматриваются молекулы типа симметричного волчка, колебательно-вращательные спектры которых довольно сложно интерпретировать ввиду наличия большого количества резонансных взаимодействий. Для молекул типа XY_3 и XYZ_3 получены соотношения между спектроскопическими параметрами, которые позволяют предсказывать значения, например, резонансных параметров, что используется для упрощения процедуры анализа спектров. Полученные результаты применены для анализа полиады взаимодействующих полос молекулы метилфторида CH_3F .

Четвертая глава диссертации содержит описание метода, позволяющего исследовать спектры очень слабых «горячих» и комбинационных полос молекул. Эффективность подхода показана на примере спектров молекулы двуокиси серы, относящейся к типу асимметричного волчка.

Общие итоги работы представлены в **заключении**. Они соответствуют заявленным целям и задачам исследования, характеризуют научную новизну и практическую значимость работы.

Достоверность полученных в диссертационной работе результатов не вызывает сомнений, поскольку все исследования, проводимые в диссертации, основаны на общих принципах квантовой механики и теоретической колебательно-вращательной спектроскопии. Расчеты проведены грамотно и квалифицированно. Это подтверждается сравнением отдельных результатов расчета с экспериментальными данными и тем, что в частных случаях полученные диссертантом результаты согласуются с более ранними результатами других авторов.

В целом диссертация И. Б. Болотовой выполнена на высоком научном уровне и содержит новые результаты, представляющие интерес как для теоретической спектроскопии, так и для различных приложений. Автореферат диссертации полностью и точно отражает её содержание.

По диссертации имеются следующие замечания:

1. Отсутствует обзор литературы, определяющий место диссертационного исследования в данной отрасли науки. Формулировка актуальности решаемых проблем не подтверждена ссылками на соответствующие современные научные работы. При этом имеется сравнение собственных исследований с работами других авторов, работающих в том же направлении, которые делаются по ходу изложения результатов в соответствующих разделах диссертации.

2. Оценка погрешности разработанных методов расчета производится путем сравнения с экспериментальными данными (стр. 73, 74, табл. 4.1) и составляет 1-3%. Для спектроскопии это довольно большая погрешность, поэтому возникает естественный вопрос – каков источник этой погрешности и можно ли ее уменьшить. Это погрешность теоретического расчета, погрешность экспериментальных измерений или некая другая. В работе использован ряд приближений (метод возмущений, приближение Борна-Оппенгеймера и др.), каждое из которых вносит свой вклад в конечную погрешность. В диссертации этот вопрос не исследован.

3. В работе имеются опечатки, особенно много их во введении (например, на стр. 5 и 4). Есть опечатки и в формулах. Так, в строке за формулой (1.2) заряд ядра должен быть указан как eZ_N вместо Z_N ; на стр. 73 и далее греческий индекс v_5 часто записан как латинское v_5 . На стр. 77 соединение CH_3F называется то фторметаном, то фторометаном.

Сделанные замечания не снижают важности полученных результатов и общей положительной оценки диссертационной работы, которая представляет собой законченное научное исследование, свидетельствующее о высокой научной квалификации автора. Результаты работы широко представлены в научной печати и были обсуждены на всероссийских и международных конференциях.

Считаю, что диссертационная работа «Некоторые особенности методов исследования спектров высокого разрешения молекул типа сферического, симметричного и асимметричного волчка» является законченным научным исследованием и по содержанию полностью соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013г. №842, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а её автор – Ирина Баторовна Болотова – заслуживает присуждения искомой степени по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

Официальный оппонент,
доктор физико-математических наук,
профессор кафедры теоретической физики
Томского государственного
педагогического университета
634061, г. Томск, ул. Киевская, 60
e-mail: epp@tspu.edu.ru
Тел.: +7 (3822) 55-11-23

(Эпп Владимир Яковлевич)

