

СВЕДЕНИЯ О РЕЗУЛЬТАТАХ ПУБЛИЧНОЙ ЗАЩИТЫ ДИССЕРТАЦИИ

Диссертационный совет Д 212.267.07, созданный на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», извещает о результатах состоявшейся 24 декабря 2015 года публичной защиты 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 на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Время начала заседания: 16-30.

Время окончания заседания: 18-20.

На заседании диссертационного совета присутствовали 18 из 24 членов диссертационного совета, из них 6 докторов наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика:

1. Багров В.Г., председатель диссертационного совета	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
2. Киреева И.В., ученый секретарь диссертационного совета	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
3. Бордовицын В.А.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
4. Брудный В.Н.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
5. Бухбиндер И.Л.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
6. Войцеховский А.В.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
7. Гермогенов В.П.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
8. Дударев Е.Ф.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
9. Караваев Г.Ф.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
10. Коротаяев А.Д.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
11. Лавров П.М.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
12. Мельникова Н.В.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
13. Потекаев А.И.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
14. Тюменцев А.Н.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
15. Тютюрев В.Г.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
16. Чумляков Ю.И.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
17. Шаповалов А.В.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
18. Шарапов А.А.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02

Заседание провёл председатель диссертационного совета, доктор физико-математических наук, профессор Багров Владислав Гаврилович.

По результатам защиты диссертации тайным голосованием (результаты голосования: за присуждение ученой степени – 18, против – нет, недействительных бюллетеней нет) диссертационный совет принял решение присудить И.Б. Болотовой ученую степень кандидата физико-математических наук.

Заключение диссертационного совета Д 212.267.07

на базе федерального государственного автономного образовательного
учреждения высшего образования

«Национальный исследовательский Томский государственный университет»

Министерства образования и науки Российской Федерации

по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 24.12.2015 г., № 46

О присуждении **Болотовой Ирине Баторовне**, гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «**Некоторые особенности методов исследования спектров высокого разрешения молекул типа сферического, симметричного и асимметричного волчка**» по специальности **01.04.02** – Теоретическая физика принята к защите 08.10.2015 г., протокол № 38, диссертационным советом Д 212.267.07 на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, приказ о создании диссертационного совета № 798-745/68 от 13.04.2007 г.).

Соискатель **Болотова Ирина Баторовна**, 1989 года рождения.

В 2011 году соискатель окончила федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

В 2015 году соискатель очно окончила аспирантуру федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

Работает в должности инженера-исследователя лаборатории теоретической и математической физики в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации; по совместительству – в должности

техника кафедры общей физики в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» Министерства образования и науки Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре квантовой теории поля федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации и на кафедре общей физики федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» Министерства образования и науки Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, **Бехтерева Елена Сергеевна**, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», кафедра общей физики, профессор; по совместительству – федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», лаборатория квантовой теории интенсивных полей, ведущий научный сотрудник.

Научный консультант – доктор физико-математических наук, **Уленков Олег Николаевич**, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», кафедра общей физики, профессор; по совместительству – федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», лаборатория квантовой теории интенсивных полей, главный научный сотрудник.

Официальные оппоненты:

Эип Владимир Яковлевич, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего

профессионального образования «Томский государственный педагогический университет», кафедра теоретической физики, профессор

Овсянников Роман Ильич, кандидат физико-математических наук, федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук», отдел 380 отделения нелинейной динамики и оптики, научный сотрудник дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация – федеральное государственное бюджетное учреждение науки **Институт оптики атмосферы им. В. Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук**, г. Томск, в своем положительном заключении, подписанном **Пономаревым Юрием Николаевичем** (доктор физико-математических наук, профессор, заместитель директора по направлению «Спектроскопия атмосферы»), **Быковым Александром Дмитриевичем** (доктор физико-математических наук, профессор, лаборатория молекулярной спектроскопии, главный научный сотрудник), указала, что актуальность темы диссертационной работы И.Б. Болотовой обусловлена тем, что детальное знание колебательно-вращательной структуры спектров молекул необходимо для решения широкого круга научных и практических задач. Научная ценность и практическая значимость работы заключаются в том, что на основе анализа симметричных свойств молекул типа XY_4 , XY_3Z и XY_3 получен целый ряд новых соотношений, что позволяет значительно упростить расчеты уровней энергии и волновых функций, учесть корреляцию в значениях параметров при решении обратных спектроскопических задач; не менее ценной является новая информация об энергетическом спектре молекул CH_3F и SO_2 . Автором предложены также некоторые новые методы и приемы анализа слабых спектров в случаях, когда традиционные методы, основанные на методе комбинационных разностей, оказываются неработоспособными.

Соискатель имеет 27 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации – 27 работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях – 10 (из них 5 статей в зарубежных журналах, индексируемых Web of Science, и 3 статьи

в российских журналах, переводные версии которых включены в Web of Science), в сборниках материалов международных и всероссийских научных конференций – 17 (из них зарубежных научных конференций – 16). Общий объем публикаций – 5,99 п.л., авторский вклад – 2,90 п.л.

Наиболее значительные научные работы по теме диссертации, опубликованные в журналах, включенных в Перечень российских рецензируемых научных журналов, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук:

1. Ulenikov O. N. High resolution study of the $\nu_1+2\nu_2-\nu_2$ and $2\nu_2+\nu_3-\nu_2$ «hot» bands and ro-vibrational re-analysis of the $\nu_1+\nu_2/\nu_2+\nu_3/3\nu_2$ polyad of the $^{32}\text{SO}_2$ molecule / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **I. B. Bolotova**, C. Leroy, V.-M. Horneman, S. Alanko // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2011. – Vol. 112, is. 3. – P. 486–512. – 1.62 / 0.41 п.л. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2010.09.013

2. Ulenikov O. N. High Resolution Analysis of the SO_2 Spectra in the Region of 2600-2900 cm^{-1} : $2\nu_3$, $\nu_2+2\nu_3-\nu_2$, and $2\nu_1+\nu_2$ Bands / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **I. B. Bolotova**, I. A. Konov, V.-M. Horneman, C. Leroy // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2012. – Vol. 113, is. 7. – P. 500–517. – 1.06 / 0.22 п.л. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2012.01.006

3. Фомченко А. Л. Некоторые вопросы определения спектроскопических параметров в аксиально-симметричных молекулах XYZ_3 симметрии C_{3v} / А. Л. Фомченко, А. Г. Литвиновская, Н. И. Распопова, **И. Б. Болотова**, Ю. С. Аслаповская, В. А. Замотаева, Ю. В. Кривчикова, Ю. В. Чертавских // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2013. – Т. 56, № 7. – С. 104–109. – 0.32 / 0.11 п.л.

в переводной версии журнала:

Fomchenko A. L. On the Determination of the Spectroscopic Parameters of Axially Symmetric XYZ_3 (C_{3v}) Molecules / A. L. Fomchenko, A. G. Litvinovskaya, **I. B. Bolotova**, N. I. Raspopova, Y. S. Aslapovskaya, V. A. Zamotaeva, Y. V. Krivchikova, Y. V. Chertavskikh // Russian Physics Journal. – 2013. – Т. 56, № 7. – С. 837–844.

4. Распопова Н. И. О расчете параметров тетраэдрических расщеплений в колебательных спектрах молекул типа XY_4 симметрии T_d : определение колебательных функций в симметризованной форме / Н. И. Распопова, И. А. Конов, **И. Б. Болотова**, Ю. В. Кривчикова // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2013. – Т. 26, № 2. – С. 239–248. – 0.42 / 0.16 п.л.

5. Бехтерева Е. С. Расчет колебательно-вращательной энергетической структуры молекул тетраэдрической симметрии типа XY_4 / Е. С. Бехтерева, О. В. Громова, Н. И. Распопова, **И. Б. Болотова**, Ю. В. Кривчикова, К. Б. Березкин // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2014. – Т. 57, № 7. – С. 99–103. – 0.52 / 0.10 п.л.

в переводной версии журнала:

Bekhtereva E. S. Calculations of the vibrational-rotational energy structure of molecules with tetrahedral symmetry of the type XY_4 / E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, N. I. Raspopova, **I. B. Bolotova**, Yu. V. Krivchikova, K. V. Berezkin // Russian Physics Journal. – 2014. – V. 57. – P. 969–973.

6. Белова А. С. Анализ спектра высокого разрешения слабой полосы поглощения $\nu_1+\nu_2+\nu_3$ молекулы SO_2 / А. С. Белова, **И. Б. Болотова**, О. В. Громова, Е. С. Бехтерева, О. Н. Улеников // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2014. – Т. 57, № 11. – С. 59–61. – 0.57 / 0.12 п.л.

в переводной версии журнала:

Belova A. S. An analysis of the High-Resolution Spectrum of the Weak $\nu_1+\nu_2+\nu_3$ Absorption Band of the SO_2 Molecule / A. S. Belova, **I. B. Bolotova**, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, O. N. Ulenikov // Russian Physics Journal. - 2015. - V. 57. - P. 1518-1524. – DOI 10.1007/s11182-015-0413-0

7. **Болотова И. Б.** Анализ спектров высокого разрешения молекулы фторметана в диапазоне 2400-2800 cm^{-1} / **И. Б. Болотова** // Известия Томского политехнического университета. – 2015. – Т. 326, № 1. – С. 134–139. – 0.73 п.л.

На автореферат поступили 6 положительных отзывов. Отзывы представили:

1. **В.А. Килин**, д-р физ.-мат. наук, доц., профессор кафедры высшей математики

Национального исследовательского Томского политехнического университета, *без замечаний*. 2. **Е.П. Гордов**, д-р физ.-мат. наук, главный научный сотрудник центра климато-экологических исследований Института мониторинга климатических и экологических систем СО РАН, г. Томск, *без замечаний*. 3. **Г.А. Онопенко**, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры прикладной математики Томского государственного архитектурно-строительного университета, *без замечаний*. 4. **П.Г. Сенников**, д-р хим. наук, заведующий лабораторией плазмохимических методов получения высокочистых веществ Института химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девярых РАН, г. Нижний Новгород, *без замечаний*. 5. **В.Ф. Пичугин**, д-р физ.-мат. наук, проф., профессор кафедры экспериментальной физики Национального исследовательского Томского политехнического университета, *без замечаний*. 6. **Н.Н. Филиппов**, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры молекулярной спектроскопии Санкт-Петербургского государственного университета, *без замечаний*.

В отзывах отмечается, 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 др. В диссертации И.Б. Болотовой рассматриваются особенности, а также связанные с ними сложности исследования колебательно-вращательных спектров высокого разрешения основных типов квазижестких молекул: типа сферического, симметричного и асимметричного волчка. Полученные для молекул типа сферического волчка волновые функции (симметрии E) и рассчитанные на их основе матричные элементы операторов гамильтониана, ответственные за «тетраэдрические» расщепления в спектрах таких молекул, позволили разработать программный пакет *SPHETOM*, предназначенный для исследования спектров молекул XY_4 и вместе с тем свободный от недостатков других имеющихся программ такого типа. Для молекул XY_3 и XYZ_3 симметрии C_{3v} установлены

соотношения между значениями спектроскопических и резонансных параметров, что во многих случаях разрешает проблему, связанную с корреляцией параметров гамильтониана и устраняет сложности описания сильно взаимодействующих колебательно-вращательных состояний молекул. Совокупность представленных результатов, положений и выводов можно квалифицировать как значительный вклад в развитие методов теоретического анализа оптических спектров высокого разрешения. Новая информация о структуре колебательно-вращательных спектров молекул CH_3F и SO_2 представляет интерес при решении академических и прикладных задач физики, химии, атмосферной оптики и может быть использована для пополнения таких баз спектроскопических данных, как «GEISA» и «HITRAN».

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что **В.Я. Эпп** является известным специалистом в области теоретической физики; **Р.И. Овсянников** является высокопрофессиональным специалистом в области теоретической спектроскопии и в вопросах расчета колебательно-вращательной энергетической структуры молекул; **Институт оптики атмосферы им. В. Е. Зуева СО РАН** является одним из передовых научных центров России, проводящих исследования в области теоретической колебательно-вращательной спектроскопии.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработан математический аппарат, позволяющий в аналитическом виде получать волновые функции и матричные элементы гамильтониана, ответственные за «тетраэдрические» расщепления в спектрах молекулы типа сферического волчка;

доказана возможность исследования очень слабых спектров высокого разрешения молекул типа асимметричного волчка на основе предложенного в работе метода;

выведены ранее неизвестные соотношения между резонансными и другими спектроскопическими параметрами молекул типа симметричного волчка, позволяющие во многих случаях разрешить проблему, связанную с корреляцией параметров гамильтониана при решении обратной спектроскопической задачи.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказано, что на основе операторной теории возмущений и теории неприводимых тензорных операторов возможно в аналитическом виде определить выражения для колебательных волновых функций и операторов гамильтониана, описывающих «тетраэдрические» расщепления в спектре высокого разрешения молекул типа сферического волчка, а также установить соотношения между различными спектроскопическими и резонансными параметрами молекул типа симметричного волчка симметрии C_{3v} ;

применительно к проблематике диссертации эффективно использованы методы теории групп, операторной теории возмущений, а также теория неприводимых тензорных систем;

изложены результаты исследования колебательно-вращательной структуры спектров многоатомных молекул, обладающих различной степенью симметрии, в частности, для молекул типа сферического волчка впервые получены в аналитическом виде выражения для волновых функций и матричных элементов гамильтониана, ответственных за «тетраэдрические» расщепления в спектре молекул;

изучены соотношения между значениями резонансных и спектроскопических параметров молекул XY_3 и XYZ_3 типа симметричного волчка, позволяющие на основе имеющейся экспериментальной информации об одних спектроскопических параметрах определить значения других спектроскопических и резонансных параметров.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

разработан подход к определению в аналитическом виде колебательных волновых функций, а также матричных элементов операторов гамильтониана, ответственных за «тетраэдрические» расщепления в спектре молекул типа XY_4 . На этой основе разработан и с успехом применен к анализу спектров реальных молекул программный пакет *SPHETOM*, позволяющий исследовать колебательно-вращательные спектры молекул типа сферического волчка;

определены в аналитическом виде простые соотношения между резонансными и спектроскопическими параметрами молекул аксиальной симметрии XY_3 и XYZ_3 ;

представлены новые результаты исследования спектров высокого разрешения молекул CH_3F и SO_2 . Исследование спектров некоторых колебательно-вращательных полос стало возможным благодаря разработанному в работе методу изучения сверхслабых спектров высокого разрешения.

Рекомендации об использовании результатов диссертационного исследования. Полученные результаты могут быть использованы в научных и образовательных учреждениях, в которых ведутся исследования по сходной тематике: Национальном исследовательском Томском государственном университете, Институте оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН (г. Томск), Федеральном исследовательском центре Институте прикладной физики РАН (г. Нижний Новгород), Национальном исследовательском Томском политехническом университете, Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова, Институте спектроскопии РАН (г. Троицк) и др.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

идея базируется на квантово-механической природе строения вещества и на методах теоретической колебательно-вращательной спектроскопии многоатомных молекул;

использованы современные программные пакеты аналитического программирования (MAPLE) и алгоритмизации и вычислительной обработки данных (FORTRAN);

установлено качественное и количественное согласие полученных автором результатов с результатами, представленными в независимых источниках, с экспериментальными данными, а также внутренняя непротиворечивость полученных результатов.

Научная новизна работы заключается в том, что впервые в аналитической форме получены выражения для колебательных волновых функций симметрии E молекул типа сферического волчка, что позволило определить также в аналитическом виде выражения для матричных элементов гамильтониана, ответственных за «тетраэдрические» расщепления в спектрах таких молекул.

На основе полученных результатов разработан программный пакет *SPHETOM*, предназначенный для расчета спектров высокого разрешения молекул типа XY_4 . Для молекул типа XY_3 и XYZ_3 разработан метод количественной оценки наиболее значимых резонансных параметров. Получена новая экспериментальная информация о структуре колебательно-вращательных спектров молекул CH_3F и SO_2 .

Личный вклад соискателя состоит в: участии в постановке целей и задач исследования, получении формул, выводе соотношений и теоретической обработке данных, алгоритмизации и разработке программных компонентов, получении численных результатов, экспериментальной регистрации некоторых из исследованных спектров, формулировке научных положений и выводов, написании и подготовке к публикации научных статей по теме диссертации. Результаты, представленные в работе, получены соискателем лично, либо в соавторстве при его непосредственном участии.

Диссертация соответствует п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи по разработке методов теоретического описания спектров высокого разрешения многоатомных молекул с учетом степени симметрии рассматриваемого объекта и их практической реализации в виде компьютерных программ, имеющей значение для развития теоретической колебательно-вращательной спектроскопии молекул.

На заседании 24.12.2015 г. диссертационный совет принял решение присудить **Болотовой И.Б.** ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 6 докторов наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика, участвовавших в заседании, из 24 человек входящих в состав совета, проголосовал: за – 18, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель

диссертационного совета

Ученый секретарь

диссертационного совета

24.12.2015 г.



[Handwritten signature in blue ink]

Багров Владислав Гаврилович

[Handwritten signature in blue ink]

Киреева Ирина Васильевна