

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Фомченко Анны Леонидовны
«Исследование эффекта изотопозамещения в молекулах, удовлетворяющих
"расширенной" модели локальных мод»
по специальности 01.04.02 – теоретическая физика

Корректная трактовка экспериментально наблюдаемых молекулярных спектров, в частности, колебательно-вращательных, в значительной степени опирается на теоретические расчеты, известные принципиальные и, до сих пор, не решенные проблемы которых связаны с корректным построением гамильтониана для многоатомной молекулы и последующим решением соответствующего уравнения Шредингера. Поэтому использование полуэмпирических методов с привлечением прецизионных экспериментальных данных современной молекулярной спектроскопии высокого разрешения для построения потенциальной функции молекулы является вынужденным, но необходимым средством теоретического описания спектральных свойств молекул, в частности, колебательно-вращательных.

Диссертационная работа Фомченко А.Л. посвящена разработке подхода, основанного на эффекте изотопозамещения и «расширенной» модели локальных мод с целью получения новой информации об изотопической зависимости спектроскопических параметров различных изотопических модификаций молекул. В результате проведенных исследований теория изотопозамещения получила дальнейшее *развитие*, успешно примененное к расчету колебательно-вращательных спектров метана и его дейтерированным модификациям; получены аналитические зависимости между различными спектроскопическими параметрами материнской молекулы и таковыми изотопических модификаций; предложен оригинальный метод построения внутримолекулярных потенциальных поверхностей, значительно упрощающий описание внутренней динамики молекул. Все это имеет несомненную научную и практическую ценность и вносит существенный вклад в развитие теоретической молекулярной спектроскопии.

Актуальность темы, научная новизна и ценность полученных результатов, их достоверность не вызывают сомнения. Все результаты достаточно широко представлены в отечественной и мировой печати, прошли апробацию на международных конференциях.

Замечания по содержанию автореферата:

1. При описании результатов гл.5 (стр.13) утверждается: «... показано, что естественные координаты являются функциями новых R-координат...». Разве может быть иначе?
2. Молекула CH_2D_2 может иметь две различные геометрические модели. Из автореферата неясно, какая из них (или обе) были исследованы.
3. Личный вклад автора очень туманно сформулирован.

Сформулированные замечания не умаляют ценность диссертации в целом. Содержание и объём проделанной исследований позволяют сделать вывод, что диссертационная работа Фомченко А.Л. удовлетворяет требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а её автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

Профессор кафедры высшей математики ФТИ НИ ТПУ
доктор физ.-мат. наук

В.А. Килин

Подпись Килина В.А. заверяю,
ученый секретарь НИ ТПУ

О.А. Ананьева

Отзыв составил: Виктор Андреевич Килин,
Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, г. Томск, проспект Ленина, дом 30; <http://tpu.ru/>; tpu@tpu.ru; (3822) 60-63-33
25 августа 2014 г.