

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы
Фомченко Анны Леонидовны
**"Исследование эффекта изотопозамещения в молекулах,
удовлетворяющих "расширенной" модели локальных мод",**
представленной на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.02 – теоретическая физика

Диссертационная работа А.Л. Фомченко посвящена исследованию влияния изотопозамещения на спектроскопические параметры и параметры эффективных гамильтонианов молекул, к которым применима "расширенная" модель локальных мод. Развиваемый подход применим к многоатомной молекуле любой симметрии, однако соискатель сосредоточился на изотопозамещении в молекулах типа сферического волчка, а, конкретно, на молекуле метана. На первом этапе, исходя из существующих экспериментальных данных, а также основываясь на результатах *ab initio* расчетов, соискателем были установлены простые соотношения между параметрами квартичной и кубической ангармоничности в материнской молекуле метана. Более того, было получено приближенное соотношение, связывающее вращательную постоянную молекулы с ее константами ангармоничности. Этот необычный результат, заключающийся в том, что силовое поле молекулы определяет ее тензор инерции, заслуживает дополнительного внимания и обоснования даже в тексте автореферата. Затем, используя полученные приближенные соотношения между спектроскопическими параметрами в рамках "расширенной" модели локальных мод получены изотопические соотношения для них в случае изотопозамещения типов $XY_4 \rightarrow XY_3Z$ и $XY_4 \rightarrow XY_2Z_2$. Отмечу впечатляющий результат, когда на основе параметров основной изотопической модификации метана, CH_4 , были получены соответствующие параметры для изотопической модификации CH_2D_2 и с ними был рассчитан спектр в одном из диапазонов длин волн. Рассчитанный спектр с высокой точностью совпадает с экспериментальным спектром. В последней главе диссертации для решения задачи по восстановлению потенциальной функции молекулы из экспериментальных данных предложено использовать для валентных колебаний координаты, которые выражаются через координаты типа Морзе, а для деформационных колебаний - нормальные координаты. В отличие от первых глав этот подход апробирован на молекулах H_2S и D_2S .

Не могу не отметить некоторую небрежность в оформлении автореферата. Так, например, на Рисунке 1 по оси абсцисс представлены волновые числа, а подпись гласит

“длина волны”. В тексте используются и некоторые жаргоны. Например, в последнем предложении перед заключением написано: “В качестве иллюстрации разработанная расчетная схема была применена для исследования «энергетической структуры потенциальной функции» молекул H_2S и H_2CO . Не ясно, что такое «энергетическая структура потенциальной функции».

Результаты диссертации опубликованы в ведущих журналах по соответствующей тематике. Они также докладывались на многочисленных конференциях, в том числе и на международных.

Несмотря на приведенные замечания, обсуждаемая диссертационная работа соответствует требованиям, предъявляемым к соответствующим квалификационным работам, а ее автор, Фомченко Анна Леонидовна, заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

Заведующий лабораторией
теоретической спектроскопии
Института оптики атмосферы СО РАН
Площадь академика Зуева, 1
Тел. 8-3822-49-17-94
vip@lts.iao.ru
д.ф.-м.н.

Валерий Иннокентьевич Перевалов

Подпись В.И. Перевалова заверяю:
и.о. ученого секретаря ИОА СО РАН
к.ф.-м.н.
14 июля 2014 г.



Вадим Витальевич Дудоров