

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации 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

В диссертации Фомченко А.Л. на основе "расширенной модели" локальных мод и теории изотопозамещения в молекулах предложен способ установления аналитических соотношений между различными молекулярными и спектроскопическими параметрами молекулы и ее изотопомеров. Предложена также модель определения внутримолекулярной потенциальной поверхности молекул с использованием специального координатного представления.

Актуальность. Развитие новых теоретических подходов и моделей, обсуждаемых в диссертации Фомченко А.Л., актуально для получения новых знаний о фундаментальных физических свойствах молекул, связей этих свойств для различных изотопомеров молекулы и с их спектроскопическими проявлениями. Не менее важны полученные результаты и для приложений в молекулярной спектроскопии при решении обратной спектроскопической задачи. В последнем случае установленные соотношения между фундаментальными молекулярными параметрами и спектроскопическими постоянными для молекул, удовлетворяющих "расширенному" приближению локальных мод (класс таких молекул достаточно велик и важен в различных приложениях), становится особенно важным и значимым, поскольку они позволяют избавиться от так называемых параметров неоднозначности, появляющихся в обратной задаче, и тем самым упростить ее и повысить надежность решения. Все это пополняет теоретический багаж квантовой механики молекул.

Переходя к оценке работы в целом, отмечу, что она выполнена на высоком современном уровне, содержит ряд **новых научных результатов**, имеющих приоритетное значение. К их числу можно отнести следующие результаты:

- установлены аналитические соотношения между спектроскопическими и молекулярными параметрами XYZ_3 , XY_2Z_2 , XY_4 . Результаты успешно применены к молекулам метана и ее изотопозамещенными модификациями CH_2D_2 , CH_3D , CHD_3 .
- предложена модель определения многомерных потенциальных поверхностей молекул с использованием специальных колебательных координат, которые позволяют существенно уменьшить размерности матриц при диагонализации.

Основные результаты работы достаточно полно опубликованы в изданиях, рекомендованных ВАК для публикации результатов кандидатских диссертаций (5 статей), прошли широкую апробацию на всероссийских и международных конференциях и симпозиумах (7 тезисов).

Практическое значение и научная ценность. Разработанные методы и модели могут быть использованы для совершенствования или проверки точности *ab initio* методов, а также для тестирования других расчетных методик. Они уже сейчас показали себя эффективным инструментом при обработке экспериментальных спектров высокого разрешения на примере молекулы метана и ее изотопомерам.

Достоверность полученных результатов подтверждается количественными и качественным согласием с известными экспериментами, расчетами и выводами других авторов, полученными на основе иных подходов.

О законченности диссертационной работы свидетельствует хорошо обоснованная постановка задачи и пройденный до конца путь ее решения.

Замечания носят скорее рекомендательный характер, направленный на улучшение представления полученных результатов:

1. В выражениях (3) и (8) автореферата показана связь между параметрами x_{ii} и B_e , связанных с разными типами движений молекулы, соответственно, колебательным и вра-

щательным в отсутствие колебаний (жесткая молекула). С теоретической точки зрения необходима физическая интерпретация этой связи.

2. Есть мелкие недостатки в оформлении: повторения в формулах (3) и (8), четыре раза в тексте повторяется жаргонная фраза "более чем удовлетворительное согласие (соответствие, результат)" (стр.6, 10, 11, 14), которая несет оттенок субъективности.
3. В определении координат в (13) и (14), по-видимому, опечатка.

Заключение. Диссертационная работа Фомченко Анны Леонидовны "Исследование эффекта изотопозамещения в молекулах, удовлетворяющих "расширенной" модели локальных мод" удовлетворяет требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ему искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

Заведующий
кафедрой оптики и спектроскопии
Федерального государственного
автономного учреждения высшего
образования "Национальный исследовательский
Томский государственный университет"
(почтовый адрес: 634050, Россия, Томск, пр. Ленина, 36
телефон: (3822) 529640
адрес эл. почты: vnch@phys.tsu.ru)
д.ф.-м.н.
12.09.2014г.

Черепанов Виктор Николаевич



подпись
Зам. Нач.
УДИОО
М.Б. УДАЛОВА