

Отзыв

об автореферате диссертационной работы Фомченко А.Л.
«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»

Колебательно-вращательная спектроскопия является важным источником информации о характере внутримолекулярных взаимодействий, состояниях и свойствах молекул. Для понимания протекающих в молекуле процессов необходимо построение корректных внутримолекулярных потенциальных функций. При этом достаточно высокая точность в определении их параметров должна сочетаться с универсальностью, т.е. независимостью разрабатываемых для их построения методов от типа симметрии молекул и количества ядер в ней, а также экономичностью используемых алгоритмов расчета. Некоторым аспектам этой весьма важной и актуальной задачи современной теоретической молекулярной спектроскопии и посвящена диссертационная работа А.Л.Фомченко. Применение традиционной теории к исследованию высоковозбужденных колебательных состояний молекул, основанной на концепции нормальных координат, приближении малых колебаний и использующей методы теории возмущений, не вполне очевидно, поскольку, как известно, колебательные возбуждения приводят к возрастанию амплитуды колебаний, усилению резонансных эффектов и появлению сильных возмущений.

Предложенный в работе Фомченко А.Л. новый подход, основанный на компиляции теории изотопозамещения и "расширенной" модели локальных мод, позволяет одновременно использовать существенно большие массивы экспериментальных данных не только о «материнской» молекуле, но и о её различных изотопомерах. Соотношения, связывающие параметры различного рода резонансных взаимодействий, с параметрами фундаментальных полос, играют существенную роль в предсказании параметров резонансных взаимодействий, что, в свою очередь, ведет к упрощению процедуры интерпретации и дальнейшего анализа спектров.

Работа Фомченко А.Л. является частью исследований в области теоретической молекулярной спектроскопии, выполняемых в последние годы группой О.Н.Уленикова и Е.С.Бехтеревой в сотрудничестве с известными зарубежными специалистами в этой области. Судя по автореферату работа представляет собой законченное исследование и производит хорошее впечатление. Многие из полученных результатов имеют приоритетное значение и могут быть использованы при интерпретации спектров высокого разрешения некоторых важных в практическом отношении молекул. Их достоверность подтверждается согласием с результатами, полученными другими авторами и с экспериментальными данными. Все результаты достаточно полно опубликованы в ведущих отечественных и зарубежных изданиях, прошли апробацию на конференциях и симпозиумах.

Считаю, что диссертационная работа Фомченко А.Л. «Исследование эффекта изотопозамещения в молекулах, удовлетворяющих "расширенной" модели локальных мод» представляет заметный вклад в теоретическую молекулярную спектроскопию, удовлетворяет требованиям ВАК, а Фомченко А.Л. достойна присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

Зав. лабораторией
плазмохимических методов
получения высокочистых веществ ИХВВ РАН им.Г.Г.Девярых,
д. х. н.

П. Г. Сенников

10.07.2014

Подпись П.Г.Сенникова заверяю.
Зам.директора ИХВВ РАН им.Г.Г.Девярых,
д.х.н.

А.Н.Моисеев

Сенников Петр Геннадьевич
Тел. +7(831)4627162
Эл.почта: sen@ihps.nnov.ru
603950 Нижний Новгород ГСП-75
ул.Тропинина 49
Институт химии высокочистых веществ РАН им.Г.Г.Девярых

