



ICB

Laboratoire

Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne

UMR 6303 CNRS - Université de Bourgogne

<http://icb.u-bourgogne.fr>



Physique - Chimie

Nanosciences - Interfaces et Réactivité dans les Matériaux - Optique interaction Matière Rayonnement - Analyses-Instrumentation

Prof. Claude LEROY
Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne
UMR CNRS 6303
Université de Bourgogne
21000 DIJON, FRANCE

Dijon, 19th May 2014

Review of the French scientific co-supervisor, Pr. Claude LEROY,
about thesis of Anna FOMCHENKO

«“Expanded” Local Mode Approach and Isotopic Effect in Polyatomic Molecules»

After having studying in the Physics Department of Tomsk State University (TSU) where she obtained her Master degree in 2011, Mrs Anna FOMCHENKO applied for a French grant to the French Embassy of Russia. Her excellent level and marks obtained in TSU and also already published papers in International Physics Journals allowed her to obtain this grant for 2011-2014.

During her PhD study, while she was half the year between 2011 and 2014 in the Université de Bourgogne, I had to co-supervise Mrs Anna FOMCHENKO (co-supervised thesis between Université de Bourgogne and Tomsk State University). She has displayed herself as one of the most talented students having an intense interest in the scientific work. An evidence of giftedness and diligence of Anna FOMCHENKO is, in particular, that she is co-author of 12 publications, four of them are papers in the Journal of Molecular Spectroscopy and Molecular Physics (these international journals have high impact-factor); five communications were published in Proceedings of International conferences.

In her thesis Anna FOMCHENKO considers the very important physical problem of the theoretical investigation of polyatomic molecules of XY_2Z_2 (C_{2v}), XYZ_3 (C_{3v}), XY_4 (T_d) type. Using isotopic substitution theory, operator perturbation theory and symmetry properties of the axially symmetric molecules in the framework of the "expanded" local mode approach, was determined a set of relations, which allow to connect different types of spectroscopic parameters (parameters of diagonal blocks, Coriolis, and Fermi interaction parameters) for various isotopomers methane molecule.

Obtained simple analytical relations allow to predict directly the spectroscopic parameters of the effective Hamiltonians of different isotopomers, without passing through time-consuming numerical calculations of energy levels using the multidimensional potential hypersurface.

Also in the thesis are presented a simple Hamiltonian model, which allows to considerably simplify the realization of the procedure of determination of the potential energy surface in comparison with more cumbersome standard methods.

I strongly recommend, without any doubt, Anna FOMCHENKO for defending her PhD degree and wish her to obtain her PhD Diploma with the highest positive assessment.

Prof. Claude LEROY
Directeur Français de la thèse



Claude LEROY - Professeur des Universités
9 Avenue Alain Savary, B.P. 47870 - 21078 DIJON Cedex - FRANCE
☎ (+33) 3 80 39 59 80 - Fax (+33) 3 80 39 59 71 - claudio.leroy@u-bourgogne.fr

Профессор Клод Леруа
Междисциплинарная Лаборатория Карно Бургундии
UMR CNRS 6303
Университет Бургундии
21000 Дижон, Франция

Дижон, 19 мая 2014

Отзыв французского научного руководителя профессора Клода Леруа
о диссертационной работе Анны Фомченко

**«Исследование эффекта изотопозамещения в молекулах, удовлетворяющих
"расширенной" модели локальных мод»**

После обучения на физическом факультете Томского государственного университета (ТГУ), где она получила степень магистра в 2011 году, Анна Фомченко подает заявку на грант в посольство Франции в России. Ее отличный уровень знаний и оценки, полученные в ТГУ, а также уже опубликованные статьи в Международных журналах по физике позволили ей получить этот грант на период 2011-2014 гг.

Во время ее обучения в аспирантуре, в то время как она была в течение полугода (с 2011 г. по 2014 г.) в Университете Бургундии, я был руководителем Анны Фомченко (написание диссертации с совместным научным руководством, Университет Бургундии - Томский Государственный Университет). Она проявила себя как один из самых талантливых студентов, имеющих повышенный интерес к научной работе. Свидетельством одаренности и трудолюбия Анны Фомченко является, в частности, то, что она является соавтором 12 публикаций, четыре из них - статьи в журналах *Journal of Molecular Spectroscopy* и *Molecular Physics* (эти международные журналы имеют высокий импакт-фактор); пять работ были опубликованы в трудах международных конференций.

В своей диссертации Анна Фомченко рассматривает очень важную физическую проблему теоретического исследования многоатомных молекул типа XY_2Z_2 (C_{2v}), XYZ_3 (C_{3v}), XY_4 (T_d). Используя теорию изотопозамещения, операторную теорию возмущений и свойства симметрии аксиальносимметричных молекул в рамках "расширенного" приближения локальных мод, был определен набор соотношений, которые позволяют связать различные виды спектроскопических параметров (параметры диагональных блоков, параметры взаимодействия Кориолиса и Ферми) для различных изотопомеров молекулы метана.

Полученные простые аналитические соотношения позволяют непосредственно предсказывать спектроскопические параметры эффективного гамильтониана различных изотопомеров без трудоемких численных расчетов уровней энергии, используя многомерную потенциальную гиперповерхность.

Кроме того, в диссертации представлена простая модель гамильтониана, которая позволяет значительно упростить реализацию процесса определения потенциальной поверхности по сравнению с более громоздкими стандартными методами.

Я настоятельно рекомендую, без всякого сомнения, Анну Фомченко для защиты степени PhD и желаю ей получить диплом PhD с самой высокой положительной оценкой.

Профессор Клод Леруа
Научный руководитель
/подпись/
/Печать: Междисциплинарная
Лаборатория Карно Бургундии
ICB UMR 6303 CNRS
UNIVERSITÉ DE BOURGOGNE
UFR Sciences et Techniques
Bât. Mirande - BP 47870
21078 DIJON Cedex

