

ОТЗЫВ

официального оппонента о 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.

Диссертация А.Л. Фомченко посвящена исследованию фундаментальных свойств многоатомных молекул на основе положений общей теории изотопозамещения и "расширенной" модели локальных мод и дальнейшего использования полученных результатов для предсказания параметров, характеризующих спектры высокого разрешения молекулы на основе известной информации о свойствах иных ее изотопомеров. **Актуальность** выбранной темы обусловлена часто встречающейся в ряде задач молекулярной спектроскопии необходимостью построения теоретической модели, позволяющей предсказать изотопические зависимости спектроскопических и молекулярных параметров многоатомных молекул. Результаты, полученные в диссертации, являются новыми и выделяют данную работу из совокупности аналогичных исследований тем, что:

- Автором разработан новый подход, основанный на компиляции общей теории изотопозамещения и "расширенной" модели локальных мод, детально изученный на примере молекулы метана и ее изотопных модификаций.
- На основании данного подхода в общем виде найдены изотопические соотношения между спектроскопическими параметрами изотопомеров метана различной симметрии.
- Предложено новое координатное представление гамильтониана произвольной многоатомной молекулы, позволяющее существенно упростить решение проблемы определения внутримолекулярной потенциальной функции. Работоспособность предложенного координатного преобразования успешно проверена на примере трехатомных, четырехатомных и пятиатомных молекул различной симметрии.

Достоверность полученных в диссертации теоретических результатов и рассчитанных спектральных характеристик исследуемых молекул не вызывает сомнений, поскольку все исследования, проводимые в диссертации, основаны на общих положениях и принципах теоретической колебательно-вращательной спектроскопии. Расчеты проведены квалифицированно и грамотно. Это подтверждается тем, что в частных случаях полученные диссертантом результаты совпадают с более ранними результатами других авторов.

Рецензируемая диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, пяти приложений, заключения, списка использованной литературы из 134 наименований. По своему объему и структуре работа удовлетворяет требованиям, установленным для кандидатских диссертаций.

Во **введении** дано описание актуальности выбранной темы, поставлены цели и задачи диссертации, сформулированы научная и практическая значимость работы.

Первая глава диссертации посвящена описанию методов исследования многоатомных молекул, построения колебательно-вращательного гамильтониана произвольной молекулы, основным положениям общей теории изотопозамещения, операторной теории возмущений, теории неприводимых тензорных операторов, теории локальных мод. Данные сведения необходимы для изложения оригинальной части работы.

Вторая глава содержит описание разработанного в диссертации "расширенного" приближения локальных мод на примере молекулы метана. Показано, что полученное простое значение параметра неоднозначности для данной молекулы позволяет получить многочисленные результаты для спектроскопических параметров, в том числе связать их между собой. В свою очередь, результаты расчетов на основе полученных теоретических результатов хорошо согласуются с экспериментальными данными, что подтверждает правильность разработанного подхода.

В третьей главе проведено исследование модификации молекулы метана, содержащей два атома дейтерия, на основе разработанного "расширенного" приближения локальных мод и теории изотопозамещения. Проиллюстрировано, что полученные результаты, связывающие между собой спектроскопические и резонансные характеристики изотомера и материнской молекулы, позволяют предсказывать спектры исследуемой молекулы CH_2D_2 .

В четвертой главе разработанный подход применяется к двум другим изотопическим модификациям молекулы метана CH_3D и CHD_3 . Т.к. рассматриваемые молекулы – это молекулы типа симметричного волчка, то их колебательно-вращательные спектры являются относительно сложными для анализа. Полученные в данной главе связи и соотношения между спектроскопическими параметрами этих молекул позволяют на основе параметров материнской молекулы предсказывать параметры изотопомеров, что используется для упрощения процедуры анализа спектров.

Пятая глава содержит описание нового подхода, позволяющего упростить процедуру определения внутримолекулярной потенциальной функции нормальных молекул. Суть данного подхода заключается в удобном выборе колебательных координат, используемых для построения колебательно-вращательного гамильтониана.

Общие итоги работы представлены в **заключении**. Они соответствуют заявленным целям и задачам исследования, характеризуют научную новизну и практическую значимость работы.

По содержанию и оформлению работы можно сделать следующие замечания:

1. Диссертация перегружена техническими деталями проведенных расчетов и таблицами сравнения расчетных и экспериментальных значений параметров. В результате физическая часть работы и, собственно, демонстрация научной

новизны оказались завуалированы. Часть таблиц можно было перенести в приложения, оставив в основном тексте обсуждение плюсов и минусов используемых моделей и методов расчета.

2. Не могу не отметить оптимизм автора по поводу результатов расчета – иногда расхождение расчетных и экспериментальных данных на 15-20 процентов обозначается как «более чем удовлетворительный результат» (параметры (3.39) и (3.40), таблица 3.9), а соответствие на уровне 25% несколько хуже, но «его можно рассматривать как удовлетворительное» - стр. 86.

Сделанные замечания не снижают важности полученных результатов и общей положительной оценки диссертационной работы, которая представляет собой законченное научное исследование, свидетельствующее о высокой научной квалификации автора. Результаты диссертационной работы опубликованы в рецензируемых журналах и были представлены на международных конференциях. Автореферат правильно и полностью отражает содержание диссертации.

Считаю, что диссертационная работа «Исследование эффекта изотопозамещения в молекулах, удовлетворяющих "расширенной" модели локальных мод» является законченным квалификационным научным исследованием и по содержанию полностью соответствует требованиям п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденных Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 N 842, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор - А.Л. Фомченко заслуживает присуждения искомой степени по специальности 01.04.02 - теоретическая физика.

Доктор физико-математических наук,
профессор кафедры теоретической физики
Томского государственного

педагогического университета
634061 г. Томск, ул. Киевская 60

E-mail: epp@tspu.edu.ru

Тел.: (3822) 52-11-23

Федеральное государственное
бюджетное образовательное
учреждение высшего
профессионального образования

«Томский государственный педагогический университет»

В.Я. Эпп

(Эпп Владимир Яковлевич)

Подпись удостоверяю
ученый секретарь
Ученого совета ТГПУ

10.07.2014

