

СВЕДЕНИЯ О РЕЗУЛЬТАТАХ ПУБЛИЧНОЙ ЗАЩИТЫ ДИССЕРТАЦИИ

Диссертационный совет Д 212.267.07, созданный на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», извещает о результатах состоявшейся 18 сентября 2014 года публичной защиты диссертации Фомченко Анны Леонидовны «Исследование эффекта изотопозамещения в молекулах, удовлетворяющих "расширенной" модели локальных мод» по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

На заседании диссертационного совета присутствовали 20 из 24 утверждённых членов диссертационного совета, из них 8 докторов наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика:

1.	Багров В.Г., председатель диссертационного совета	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
2.	Киреева И.В. ученый секретарь	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
3.	Бордовицын В.А.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
4.	Бухбиндер И.Л.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
5.	Гермогенов В.П.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
6.	Давыдов В.Н.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
7.	Дударев Е.Ф.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
8.	Караваев Г.Ф.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
9.	Коротаев А.Д.,	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
10.	Лавров П.М.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
11.	Ляхович С.Л.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
12.	Мельникова Н.В.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
13.	Потекаев А.И.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
14.	Старенченко В.А.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
15.	Трифонов А.Ю.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
16.	Тюменцев А.Н.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
17.	Тютюрев В.Г.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
18.	Чумляков Ю.И.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
19.	Шаповалов А.В.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
20.	Шарапов А.А.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02

Заседание провел председатель диссертационного совета доктор физико-математических наук, профессор Багров Владислав Гаврилович.

По результатам защиты диссертации тайным голосованием (результаты голосования: за присуждение ученой степени – 20, против – нет, недействительных бюллетеней – нет) диссертационный совет принял решение присудить А.Л. Фомченко ученую степень кандидата физико-математических наук.

**Заключение диссертационного совета Д 212.267.07 на базе
федерального государственного автономного
образовательного учреждения высшего образования
«Национальный исследовательский Томский государственный университет»
Министерства образования и науки Российской Федерации
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук
аттестационное дело № _____**

решение диссертационного совета от 18.09.2014 г., № 13

О присуждении **Фомченко Анне Леонидовне**, гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация **«Исследование эффекта изотопозамещения в молекулах, удовлетворяющих "расширенной" модели локальных мод»** по специальности **01.04.02** – Теоретическая физика принята к защите 19 июня 2014 г., протокол № 7, диссертационным советом **Д 212.267.07** на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, приказ о создании диссертационного совета № 798-745/68 от 13.04.2007 г.).

Соискатель **Фомченко Анна Леонидовна**, 1987 года рождения.

В 2011 году окончила государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Томский государственный университет».

В 2014 году очно окончила аспирантуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

Работает в должности ассистента кафедры теоретической и экспериментальной физики в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования (в период выполнения работы – федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования) «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» Министерства образования и науки Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре теоретической физики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации, на кафедре теоретической и экспериментальной физики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» Министерства образования и науки Российской Федерации и в междисциплинарной лаборатории Карно Бургундии Университета Бургундии.

Научные руководители:

доктор физико-математических наук, **Бехтерева Елена Сергеевна**, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования (в период выполнения работы – федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования) «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», кафедра общей физики, профессор (по совместительству – федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования (в период выполнения работы – федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования) «Национальный исследовательский Томский государственный университет», кафедра квантовой теории поля, профессор);

PhD, профессор **Клод Леруа**, Университет Бургундии (г. Дижон, Франция).

Научный консультант:

доктор физико-математических наук, **Уленков Олег Николаевич**, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования (в период выполнения работы – федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования) «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», кафедра общей физики, профессор (по совместительству – федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования (в период выполнения работы – федеральное государственное бюджетное

образовательное учреждение высшего профессионального образования) «Национальный исследовательский Томский государственный университет», кафедра квантовой теории поля, профессор).

Официальные оппоненты:

Быков Александр Дмитриевич, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук, лаборатория молекулярной спектроскопии, главный научный сотрудник

Эпп Владимир Яковлевич, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Томский государственный педагогический университет», кафедра теоретической физики, профессор

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт прикладной физики Российской академии наук, г. Нижний Новгород, в своем положительном заключении, подписанном **Хазановым Ефимом Аркадьевичем** (член-корреспондент Российской академии наук, доктор физико-математических наук, заместитель директора), **Третьяковым Михаилом Юрьевичем** (кандидат физико-математических наук, отдел микроволновой спектроскопии, заведующий отделом), **Зобовым Николаем Федоровичем** (кандидат физико-математических наук, отдел микроволновой спектроскопии, старший научный сотрудник), указала, что актуальность темы диссертационной работы А.Л. Фомченко связана с исследованием наиболее общих свойств внутри-молекулярных потенциальных функций многоатомных молекул; научная новизна работы заключается в получении большого количества новых ранее неизвестных связей и соотношений между различными параметрами как одной выделенной молекулы, так и различных изотопомеров; диссертация обладает практической значимостью, так как развитые в диссертации методы позволяют разрешить ряд проблем, возникающих при интерпретации спектров сильно взаимодействующих колебательно-вращательных полос изотопомеров метана, связанных с неоднозначностями и сильной корреляцией спектроскопических параметров.

Соискатель имеет 12 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации – 12 работ, опубликованных в научных рецензируемых изданиях – 5 (из них 4 статьи в журналах, вошедших в базы данных цитирования Web of Science и Scopus), публикаций в материалах всероссийских и международных конференций – 7 (из них 5 зарубежных конференций). Общий объём публикаций – 5.52 п.л., авторский вклад – 2.23 п.л.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Ulenikov, O. N. On the determination of the intramolecular potential energy surface of polyatomic molecules: hydrogen sulfide and formaldehyde as an illustration / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, C. Leroy, O. V. Gromova, **A. L. Fomchenko** // Journal of Molecular Spectroscopy. – 2009. – V. 255. – P. 88–100. – 0.8 / 0.2 п.л. – DOI: 10.1016/j.jms.2009.02.016

2. Ulenikov, O. N. On the «expanded local mode» approach applied to the methane molecule / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, C. Leroy, **A. L. Fomchenko** // Journal of Molecular Spectroscopy. – 2010. – V. 264. – P. 61–65. – 0.34 / 0.1 п.л. – DOI: 10.1080/00268976.2011.611479

3. Ulenikov, O. N. On the «expanded local mode» approach applied to the methane molecule: isotopic substitution $\text{CH}_2\text{D}_2 \leftarrow \text{CH}_4$ / O. N. Ulenikov, **A. L. Fomchenko**, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, C. Leroy // Molecular Physics. – 2011. – V. 109. – P. 1–20. – 1.34 / 0.53 п.л. – DOI: 10.1080/00268976.2011.611479

4. Ulenikov, O. N. On the «expanded local mode» approach applied to the methane molecule: isotopic substitution $\text{CH}_3\text{D} \leftarrow \text{CH}_4$ and $\text{CHD}_3 \leftarrow \text{CH}_4$ / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, **A. L. Fomchenko**, A. G. Litvinovskaya, C. Leroy, M. Quack // Molecular Physics. – 2014. – 1.9 / 0.7 п.л. – DOI: org/10.1080/00268976.2014.912360

На автореферат поступило 8 положительных отзывов. Отзывы представили:

1. **Г.А. Онопенко**, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры прикладной математики Томского государственного архитектурно-строительного университета, *без замечаний*. 2. **Е.П. Гордов**, д-р физ.-мат. наук, главный научный сотрудник Института мониторинга климатических и экологических систем СО РАН, г. Томск, *без замечаний*. 3. **П. Г. Сенников**, д-р хим. наук, зав. лабораторией плазмохимических методов получения высокочистых веществ Института химии

высокоочищенных веществ им. Г.Г. Девятовых РАН, г. Нижний Новгород, *без замечаний*.

4. **М.А. Кошелев**, канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник отдела микроволновой спектроскопии Института прикладной физики РАН, г. Нижний Новгород, *без замечаний*. 5. **В.Н. Черепанов**, д-р физ.-мат. наук, зав. кафедрой оптики и спектроскопии Национального исследовательского Томского государственного университета, *с замечаниями-рекомендациями*: необходима интерпретация связи между параметрами в выражениях (3) и (8) автореферата; есть мелкие недостатки в оформлении и опечатки. 6. **В. И. Перевалов**, д-р физ.-мат. наук, зав. лабораторией теоретической спектроскопии Института оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, г. Томск, *с замечанием*: на рис. 1 по оси абсцисс представлены волновые числа, а подпись гласит «длина волны»; не ясно, что такое «энергетическая структура потенциальной функции» в последнем предложении перед заключением. 7. **В.А. Килин**, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры высшей математики Национального исследовательского Томского политехнического университета, *с замечаниями*: при описании результатов в гл. 5 неясной является фраза «... показано, что естественные координаты являются функциями новых R-координат...»; неясно, какая из геометрических моделей (или обе) молекулы CH_2D_2 были исследованы; личный вклад автора очень туманно сформулирован. 8. **А.А. Мицель**, д-р техн. наук, проф., профессор кафедры автоматизированных систем управления Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники, *с замечанием*: не ясен выбор параметров в формулах (3) и (4).

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что Д.А. Быков является одним из ведущих специалистов в области теории колебательно-вращательных взаимодействий в молекулах; В.Я. Эпп является высокопрофессиональным специалистом в области теоретической физики, а Институт прикладной физики РАН – передовым предприятием в области разработки новых методов и моделей в колебательно-вращательной спектроскопии и их применением к решению прикладных проблем.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана теория изотопозамещения в молекулах типа сферического волчка, удовлетворяющих "расширенной" модели локальных мод;

предложен оригинальный метод определения внутримолекулярной функции, применимый к молекулам с произвольным числом атомов;

доказана возможность предсказания спектроскопических свойств различных изотопомеров молекул типа XH_4 симметрии T_d на основе экспериментальной информации только об основной изотопической модификации;

введено в рассмотрение новое координатное преобразование для многоатомных молекул, позволяющее более просто и эффективно, чем ранее, решать задачу по определению собственных значений и собственных функций колебательно-вращательного гамильтониана молекулы.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

применительно к проблематике диссертации результативно использованы операторная теория возмущений и теория неприводимых тензорных операторов для получения общих выражений, позволяющих связать спектроскопические параметры исследуемых молекул с параметрами внутримолекулярной потенциальной функции;

изложены методы, позволяющие разрешить целый ряд проблем, возникающих при интерпретации спектров сильно взаимодействующих колебательно-вращательных полос изотопомеров метана, связанных с неоднозначностями и сильной корреляцией спектроскопических параметров;

раскрыты возможности использования получаемых из эксперимента с высокой точностью параметров k -1 и a_1 - a_2 расщеплений для высокоточного предсказания параметров резонансных взаимодействий;

изучены фундаментальные зависимости между константами форм колебаний различных изотопомеров молекул, удовлетворяющих "расширенной" модели локальных мод;

проведена модернизация и распространение развитых ранее теории изотопозамещения и "расширенной" модели локальных мод на молекулы типа XY_4 симметрии T_d , XYZ_3 симметрии C_{3v} и XY_2Z_2 симметрии C_{2v} .

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

разработана и внедрена на примере молекулы метана компиляция теории изотопозамещения и "расширенного" приближения локальных мод, позволяющая получить многочисленные ранее неизвестные изотопические соотношения между

различными спектроскопическими параметрами различных изотопомеров молекулы метана, и на этой основе предсказывать параметры спектральных линий той или иной изотопической модификации;

создана система практических рекомендаций для предсказания спектроскопических параметров изотопомеров по значениям параметров основной изотопической модификации;

представлены методические рекомендации для расчета параметров резонансных взаимодействий по известным из эксперимента высокоточным значениям параметров различных типов расщеплений.

Рекомендации об использовании результатов диссертационного исследования. Полученные в работе результаты могут быть использованы в организациях, занимающихся спектроскопией высокого разрешения, исследованиями атмосферы и т.д., таких, как Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Институт спектроскопии РАН (г. Москва), Институт прикладной физики РАН (г. Нижний Новгород), Институт оптики атмосферы СО РАН (г. Томск), Национальный исследовательский Томский политехнический университет; в совместных научных исследованиях, выполняемых Национальном исследовательском Томском государственным университетом и Университетом Бургундии (Дижон, Франция), и при чтении курсов лекций «Физика атомов и молекул», «Современные проблемы молекулярной спектроскопии» в Национальном исследовательском Томском государственном университете.

Оценка достоверности результатов выявила:

теория используемых моделей и математических методов обладает строгостью и непротиворечивостью и, как следствие, результаты и выводы, полученные на ее основе, согласуются с результатами других авторов и с результатами соответствующих экспериментальных исследований;

идея базируется на известных теоретических методах молекулярной спектроскопии;

использованы современные программные среды для разработки алгоритмов и создания программ на языках MAPLE и FORTRAN;

установлено как качественное, так и количественное совпадение авторских результатов с результатами, представленными в независимых источниках по данной тематике, в тех случаях, когда такое сравнение является обоснованным;

использованы современные методики сбора и обработки исходной информации.

Личный вклад соискателя состоит в участии в постановке задач, получении формул на основе теории возмущений, выводе изотопических соотношений для молекул CH_4 , CH_2D_2 , CH_3D , CHD_3 , разработке алгоритмов и создании программ на языке MAPLE, разработке подхода к определению потенциальной функции и в подготовке и оформлении публикаций по выполненной работе. Все результаты, представленные в работе, получены соискателем лично, либо в соавторстве при его непосредственном участии.

Диссертация соответствует п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи по детальному теоретическому исследованию эффекта изотопозамещения в молекулах, удовлетворяющих "расширенной" модели локальных мод применительно к молекуле CH_4 и ее дейтерированным изотопическим модификациям, имеющей значение для развития физики молекул.

На заседании 18.09.2014 г. диссертационный совет принял решение присудить **Фомченко А.Л.** учёную степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 20 человек, из них 8 докторов наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика, участвовавших в заседании, из 24 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 20, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель

диссертационного совета



Багров Владислав Гаврилович

Ученый секретарь

диссертационного совета



Киреева Ирина Васильевна

18 сентября 2014 г.