

## ОТЗЫВ

**Научного руководителя проф. Орлова Ю.Д. о работе Белова Александра Николаевича «Применение базиса функций Матье в конформационном анализе органических соединений», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия**

Диссертационная работа Александра Николаевича Белова посвящена поиску новых путей решения задачи о внутреннем вращении. От первых основополагающих работ в этом направлении прошло более 80-ти лет, но только в 2014 году было получено решение торсионного уравнения Шредингера (ТУ) для потенциала общего вида в базисе плоских волн. Рассмотренные в диссертационной работе в качестве базиса для решения данного уравнения функции Матье (ФМ), имеют ряд преимуществ. Они лучше, чем гармонические функции аппроксимируют потенциалы внутреннего вращения, и главное – являются решением уравнения Матье, к которому сводится в ряде допущений ТУ. Эти факты известны давно, однако, только в 2015 году была предпринята, по видимому, первая попытка найти общий вид матрицы гамильтониана ТУ в базисе ФМ.

Диссертант продолжил эту работу, в которой он столкнулся с рядом чисто математических затруднений, связанных с реализацией практических вычислений по ФМ, не имеющим аналитического представления. Решение этих и других сопутствующих задач позволило диссертанту достичь основной цели работы – вывести соотношения для элементов матрицы гамильтониана ТУ в базисе ФМ. Это открыло возможность дальнейшего расчета конформационных и термодинамических характеристик, что было реализовано для ряда органических молекул и радикалов.

В процессе работы автор проявил высокую физическую и математическую эрудицию. Особо следует отметить его внимание исследованию достоверности результатов, в том числе – сравнение с имеющимися результатами экспериментов и других расчетов. Немало времени и усилий было затрачено на трудоемкие расчеты по исследованию достижения вариационного предела для базисов плоских волн и функций Матье, что позволило обнаружить важную закономерность, указывающую на меру эффективности применения базисов. Важно, что эти и другие задачи диссертант выявлял и формулировал в процессе работы лично, что говорит о его высоком уровне самостоятельности.

Таким образом, диссертационная работа Александра Николаевича Белова является результатом очень большого объема исследований, проверок, осмыслений. Можно заключить, что за время нашего сотрудничества Александр Николаевич Белов сформировался как зрелый исследователь, подготовивший интересную диссертационную работу, характеризующуюся новизной, практической и теоретической значимостью, и имеющую перспективу дальнейшего развития. Считаю, что диссертация Белова А.Н. «Применение базиса функций Матье в конформационном анализе органических соединений» полностью удовлетворяет требованиям, предъявляемым действующим «Положением о присуждении ученых степеней» к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а её автор – Белов Александр Николаевич – заслуживает присвоения указанной степени по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Научный руководитель

Орлов Ю.Д.

Доктор химических наук, профессор,  
заведующий кафедрой общей физики  
ФГБОУ «Тверской государственный университет»,  
Заслуженный работник высшей школы РФ

06.03.2023

*Ю.Д. Орлов*  
*подпись*  
*Начальник*