

Отзыв

официального оппонента на диссертационную работу Александра Николаевича Белова на тему: “**Применение базиса функций Матъе в конформационном анализе органических соединений**”, представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности **1.4.4** — физическая химия.

Термодинамические свойства вещества определяются как характером взаимодействий между его структурными единицами (молекулами), так и внутренними степенями свободы этих структурных единиц (молекул). Если межмолекулярные взаимодействия в определённых границах могут быть описаны модельными потенциалами, то в случае достаточно сложных (многоатомных) молекул ситуация неизмеримо сложнее. Особенно сложна ситуация в случае органических соединений, для которых характерно существование различных конформаций. Поэтому проблема поиска конструктивных методов исследования состояний многоатомных молекул с внутренними степенями свободы весьма **актуальна**.

Диссертационная работа А. Н. Белова посвящена разработке эффективной методики квантовомеханических расчетов торсионных состояний молекул с использованием в качестве базиса функций Матъё с последующим применением для расчетов конформационных и термодинамических характеристик органических соединений. В определённых границах внутреннее вращение может быть исследовано с помощью торсионного уравнения Шрёдингера с потенциалом $V(\varphi)$, о котором известно лишь, что он является периодической функцией от торсионного угла φ . Успех в поиске приближённых решений квантовомеханических задач весьма существенно зависит от выбора базиса, по которому разлагается решение задачи.

Идея использования функций Матъё в качестве базиса при исследовании торсионных состояний молекул высказана в 2015 г. В. В. Туровцевым, Ю. Д. Орловым и А. Н. Цирулевым. Однако, реализация этой идеи встречает

чрезвычайные трудности, поскольку для функций Матьё не существуют конструктивные аналитические представления.

От исходной идеи до её реализации диссертантом проделана большая работа.

Основные этапы этой работы состоят в следующем.

1. Вычисление матричных элементов гамильтониана одномерного торсионного уравнения Шрёдингера в базисе функций Матьё и апробирование метода вычисления торсионных уровней на основании сравнения результатов расчетов для молекул с несимметричными потенциалами внутреннего вращения как с экспериментальными данными, так и с известными ранее расчетами в базисе плоских волн.
2. Вычисление величин конформационных и термодинамических характеристик конформеров внутреннего вращения из полученного в базисе функций Матьё торсионного спектра с учетом распределения торсионных состояний.
3. Исследование достижения вариационного предела для оценки эффективности базиса в численном решении одномерного торсионного уравнения Шрёдингера и оценки погрешностей расчета элементов матрицы гамильтониана в базисе функций Матьё.

Научная новизна данной работы состоит в следующем.

1. Разработана методика вычисления функций торсионных состояний и энергетических уровней одномерного внутреннего вращения молекул, основанная на решении торсионного уравнения Шрёдингера в базисе функций Матьё.
2. Установлены критерии эффективности использования различных базисов при численном решении торсионного уравнения Шрёдингера.
3. Установлен и обоснован метод получения распределения торсионных состояний, рассчитанных в базисе функций Матьё, по конформерам внутреннего вращения.

4. Получен способ оценки погрешностей вычисления матричных элементов гамильтониана в численном решении торсионного уравнения Шрёдингера в базисе функций Матьё при вычислениях уровней внутреннего вращения, мольных долей конформеров внутреннего вращения и вкладов внутреннего вращения в термодинамические характеристики.

Практическая значимость заключается в следующем.

Рассчитаны количественные характеристики веществ ряда органических соединений: структурные функции внутреннего вращения, уровни энергии и переходы, мольные доли конформеров внутреннего вращения, вклады внутреннего вращения в термодинамические характеристики как отдельных конформеров внутреннего вращения, так и их смесей и т. д.

Достоверность и обоснованность

Все результаты диссертанта получены из основных принципов квантовой механики без использования дополнительных гипотез. Существенно также, что рассчитанные энергии торсионных переходов в разумной мере согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

Замечания.

Сколько-нибудь существенных недостатков работы я не обнаружил. Из числа несущественных недостатков отмечу следующие.

- Диссертант ограничивается моделью, в которой вращающийся фрагмент молекулы рассматривается как единое целое, т. е. без учёта внутренних степеней свободы фрагмента. Хотя бы грубая оценка погрешности этой модели могла бы быть полезной.

- Имеется опечатка в подписи к рисунку 5.2 на стр.89 диссертации, в нескольких местах диссертации имеются неизбежные стилистические погрешности.

Оценивая работу в целом, следует отметить, что диссертационная работа А. Н. Белова содержит новые решения ряда актуальных задач, которые создают теоретические основы прогнозирования термодинамических свойств органических соединений с учётом внутренних степеней свободы молекул. Результаты опубликованы в журнальных статьях. Работа прекрасно апробирована в выступлениях на нескольких международных конференциях. Считаю, что диссертация удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям согласно пп.9-14 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842, а ее автор несомненно заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Официальный оппонент

доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры Общей и экспериментальной
физики Новгородского государственного
университета имени Ярослава Мудрого

Анатолий Юльевич Захаров.

26.05.2023

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого».

Почтовый адрес: 173003, Великий Новгород, ул. Большая С.–Петербургская, 41.

email: anatoly.zakharov@novsu.ru.

тел.: +7 905 291 2413

Я, Захаров Анатолий Юльевич, согласен на автоматизированную обработку моих персональных данных, приведенных в этом документе.