

## Отзыв

на автореферат диссертации 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

Решение задачи внутреннего вращения в молекулах продолжает оставаться актуальной, так как позволяет перейти от квантовомеханических величин к наблюдаемым и измеряемым термодинамическим характеристикам. Для молекул со сложным строением, особенно в случае несимметричного потенциала внутреннего вращения эта задача осложняется наличием нескольких вращательных конформеров с различными термодинамическими характеристиками. На сегодняшний день решение этой задачи в ангармоническом приближении традиционно решается в базисе плоских волн. В представленной работе создан альтернативный метод решения в базисе функций Матье, позволяющий решать эту задачу более эффективно. Важно, что автор не ограничился только разработкой метода, но и применил его для ряда соединений.

Материалы диссертации опубликованы в ведущих журналах, не только направленности по физической химии, но и по направлению развития численных методов.

По содержанию автореферата возникло замечание. Непонятно, насколько много вращательных уровней нужно рассчитать, чтобы их количества оказалось достаточно для вычисления термодинамических величин и энергий конформационных переходов с точностью, равной погрешности эксперимента.

Считаю, что работа удовлетворяет всем критериям Положения о порядке присуждения ученых степеней, а ее автор, Белов Александр Николаевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Даю согласие на обработку своих персональных данных.

Доктор химических наук,


главный научный сотрудник,

лаборатории термодинамики высокоэнергетических систем

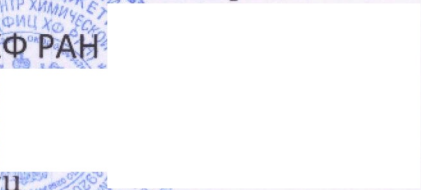
ФГБУН Федеральный исследовательский центр химической физики


им. Н.Н. Семенова Российской академии наук

E-mail: eamir02@mail.ru

 Мирошниченко Е.А.

Подпись Мирошниченко Е.А. подтверждаю  
Ученый секретарь ФИЦ ХФ РАН  
кандидат физ-мат. наук

 Ларичев М.Н.

E-mail: icp@chph.ras.ru  


Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Федеральный исследовательский центр химической физики

им. Н.Н. Семенова Российской Академии Наук

119991, Москва, ул. Косыгина, д. 4