

## 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**

В диссертационной работе Белова А.Н. разработан метод использования функций Матье при разложении решения торсионного уравнения Шрёдингера. Решение задачи на собственные функции и собственные значения позволило получить значения энергий внутреннего вращения и соответствующие им волновые функции. Сама математическая реализация этой задачи уже является серьезным результатом. Используя известные соотношения из статистической физики автору удалось развить этот оригинальный подход и применить полученные результаты для вычисления мольных долей и вращательных вкладов в термодинамические характеристики конформеров внутреннего вращения. В работе представлены не только сами теоретические результаты, но и примеры их применения на конкретных молекулах. Особое внимание обращают на себя вычисления, проведенные для молекул со сложным внутренним строением и обладающих несимметричным потенциалом внутреннего вращения. Отдельно автором показана необходимость квантовомеханического описания конформационных превращений и учета при этом вероятности состояний для вычисления энергии активации.

Основные результаты диссертации представлены вполне достаточным списком публикаций.

В качестве замечания, отметим, что к сожалению, в автореферате не рассмотрен вопрос о стабильности конформеров для рассматриваемых соединений.

В совокупности, работа соответствует требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013 г.,

предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Белов Александр Николаевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Дата составления отзыва 30.05.2023 г.

Шажко Ярослав Витальевич, кандидат технических наук (специальность 05.15.09 - Геотехническая и горная механика), заместитель директора по научной работе федерального государственного бюджетного научного учреждения «Институт физики горных процессов».

Почтовый адрес: 283050, Донецкая Народная Республика, г. Донецк, ул. Розы Люксембург, д. 72

Тел. +7(856) 3116933; +7(949) 3221674,

Е-mail организации и автора отзыва: [ifgpdnr@mail.ru](mailto:ifgpdnr@mail.ru), [syarilo@mail.ru](mailto:syarilo@mail.ru)

30.05.2023

Я, Шажко Ярослав Витальевич, даю согласие на автоматизированную обработку моих персональных данных.

**Подпись Шажко Я.В. заверяю:**

ученый секретарь федерального государственного бюджетного научного учреждения «Институт физики горных процессов»

Ожегова Лариса Дмитриевна

Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Институт физики горных процессов» ул. Розы Люксембург, д. 72 г. Донецк, Донецкая Народная Республика, 283050 Тел. +7 (856) 3116933 факс +7 (856) 3115285 [ifgpdnr@mail.ru](mailto:ifgpdnr@mail.ru)