

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

Исследование вращательных спектров – задача, остающаяся актуальной уже несколько десятков лет. Работу автора можно условно разбить на два этапа – сначала был разработан способ решения торсионного уравнения в базисе функций Матье. Выбор разложения решения по такому базису обоснован тем, что в ряде приближений и несложного потенциала внутреннего вращения, торсионное уравнение Шрёдингера сводится к уравнению Матье. Затем, после апробации на известных и хорошо изученных экспериментальных спектрах, в основной части диссертации показано применение этого метода в конформационном анализе.

Так были определены распределение амплитуды вероятности по потенциальным ямам, мольные доли вращательных конформеров, вклад внутреннего вращения (с учетом распределения конформеров) в термодинамические функции. Особо необходимо отметить показанную автором необходимость квантовомеханического подхода и учета вероятности при вычислении энергии активации при конформационном переходе.

Считаю, что диссертация Белова Александра Николаевича на тему «Применение базиса функций Матье в конформационном анализе органических соединений» соответствует требованиям п. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

5.06.2023 г. Даю согласие на обработку своих персональных данных.

_____ Щербаков Игорь Николаевич
ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет»,
Заведующий кафедрой Физической и коллоидной химии,
Доктор химических наук, 1.4.4. – Физическая химия, доцент.
Адрес: 354058, Ул. Зорге 7, г. Ростов-на-Дону, Россия.
Телефон: +79185475778, e-mail: shcherbakov@sfedu.ru

