

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

Развитие теоретических основ физико-химического исследования свойств органических соединений является актуальной научной задачей с учетом колоссального развития информационных технологий, что позволило ввести такое понятие как цифровая химия в арсенал современной науки. Одной из форм движения, присущей веществу, является внутреннее вращение, энергия которого является составной частью внутренней энергии вещества и, таким образом, прямо влияет на его реакционную способность. Важной задачей количественного описания такой формы движения является нахождение конформационной поверхности потенциальной энергии в результате решения торсионного уравнения Шредингера. В диссертационной работе Белова А.Н. эта задача решается с использованием базиса функций Матье. Автор показал ряд преимуществ своего подхода по сравнению с часто используемым для решения торсионного уравнения Шредингера базисом плоских волн. На примере ряда фтор-содержащих молекул и радикалов показана эффективность авторского метода, позволяющего получать всю необходимую физико-химическую информацию: энергии конформеров, их заселенность, высоту конформационных барьеров, вращательные статистические суммы, необходимые для расчета термодинамических потенциалов и теплоемкости и т.д.

Оценивая работу в целом, отмечу, что Белов А.Н. выполнил высококвалифицированную работу, в которой разрабатывается оригинальный подход для исследования конформационного поведения органических молекул и радикалов. Результаты хорошо осмыслены и обработаны, на этой основе сформулированы корректные выводы. Диссертация Белова А.Н. является научно-квалификационной работой, в которой решена научная задача – разработка теоретических основ конформационного анализа органических соединений с использованием базиса функций Матье, – имеющей важное значение для развития физической химии органических соединений.

Диссертация Белова Александра Николаевича по актуальности проведенного исследования, новизне, научной и практической значимости,

достоверности полученных результатов и выводов соответствует требованиям п.п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г. (в редакции от 21.03.2021 г. № 426 и от 26.09.2022 г. № 1690), а автор диссертации – Белов А.Н. заслуживает присвоения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Хурсан Сергей Леонидович, заместитель директора УФИХ УФИЦ РАН, заведующий лабораторией химической физики УФИХ УФИЦ РАН, доктор химических наук (специальность 02.00.04 – Физическая химия), профессор по кафедре физической химии и химической экологии (специальность 02.00.04 – Физическая химия), e-mail: khursansl@anrb.ru, тел: +79174322426.

Хурсан Сергей Леонидович

08.06.2023 г.

Уфимский институт химии – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимский Федеральный исследовательский центр Российской академии наук (УФИХ УФИЦ РАН), 450054, г, Уфа, пр. Октября, 71, тел.: +73472355560, сайт организации: www.ufaras.ru, e-mail организации: chemorg@anrb.ru

Подпись Хурсана Сергея Леонидовича заверяю:
Ученый секретарь УФИХ УФИЦ РАН
д.х.н., проф.

Гималова Ф.А.