

Отзыв

на автореферат диссертации Белова Александра Николаевича
«Применение базиса функций Матье в конформационном анализе органических соединений», представленной к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Конформационный анализ органических соединений является **актуальной задачей** физико-химических исследований во многих областях науки, поскольку именно различия конформационных состояний определяет различие свойств лекарственных препаратов, полиморфизм энергоемких материалов и проч. Поэтому тема данной диссертационной работы, посвященной разработке нового метода расчета энергетических уровней и состояний внутреннего вращения в молекулах и далее оценке конформационных и термодинамических характеристик веществ, представляется не только актуальной, но и имеющей значимое **практическое применение**.

Поскольку уравнение Шредингера, описывающее внутреннее вращение в молекулах (торсионное уравнение (ТУ) Шредингера) является, с математической точки зрения, уравнением Матье, аргументация автора об эффективности решения ТУ с использованием именно функций Матье (ФМ) представляется весьма убедительной. Однако до выполнения этой работы ФМ не имели аналитического представления, что и определяло отсутствие реализации этого подхода. Поэтому тематика данной работы, где **впервые** получены соотношения для расчета матричных элементов оператора Гамильтона

для внутреннего вращения в базисе функций Матъе является **актуальной** и обладающей **научной новизной**.

Таким образом, **теоретическая значимость** работы определяется возможностью решения задачи распределения торсионных уровней в аналитическом виде, а **практическая** – получением количественных характеристик структурных функций широкого круга веществ. Весьма важным представляется возможность расчета долей конформеров при различных температурах, обоснованная автором. Кроме того, А.Н. Беловым выполнено детальное исследование накопления возможной ошибки при численных расчетах и доказана приемлемая величина получаемой погрешности.

К автореферату имеется ряд замечаний:

- (1) Автор декларирует использование базиса ФМ как альтернативу базиса ПВ для численного моделирования ТУ, но поскольку сравнительные характеристики этих альтернатив не представлены, то приходится лишь полагаться на мнение автора о том, что расчеты в базисе ФМ более эффективны. Однако сравнение результатов, полученных с использованием базиса ФМ с экспериментальными данными, позволяет сделать заключение о высокой точности разработанного подхода.
- (2) Из автореферата не ясно для чего проводится варьирование параметра q функций Матъе.
- (3) На стр. 1 автореферата имеется ряд неточностей, так термодинамические свойства определяются не «вкладами внутреннего вращения», а различиями самих конформационных состояний соединений. «Решением ТУ являются функции Матъе», - полагаю, что точнее было бы «функции Матъе позволяют эффективно решать ТУ Шредингера».

Однако указанные недостатки не снижают общий высокий уровень и ценность выполненного исследования.

В целом, судя по автореферату, считаю, что данная работа удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям,

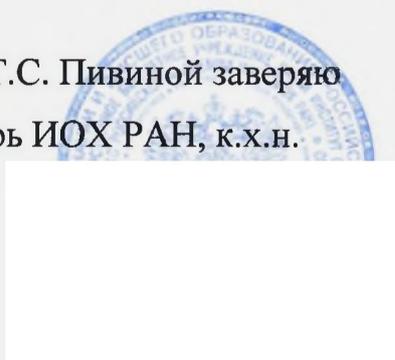
а ее автор Белов Александр Николаевич заслуживает присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук.

Д.х.н., профессор,
ведущий научный сотрудник
ФГБУН ИОХ им. Н.Д. Зелинского РАН
Ленинский пр., д.47, Москва, 119991
E-mail: tsp@ioc.ac.ru
Тел. +7 (499) 137-13-79



/Т.С. Пивина/

Подпись д.х.н. Т.С. Пивиной заверяю
Ученый секретарь ИОХ РАН, к.х.н.



/И.К. Коршевец/

30.05.2023 г.