

Отзыв на автореферат диссертации Белова Александра Николаевича

«Применение базиса функций Матъе в конформационном анализе органических соединений»,

представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Более точное прогнозирование термодинамических свойств требует учета вклада внутреннего вращения. При этом, процентное соотношение конформеров внутреннего вращения и их термодинамические характеристики могут существенно отличаться. Это обосновывает актуальность и новизну представленной к защите работы. Автор предлагает новый способ решения торсионного уравнения Шрёдингера, используя при этом разложение волновой функции в базисе функций Матъе. В работе введен и обоснован объективный критерий эффективности и показано, что базис функций Матъе для этой задачи обладает преимуществами по сравнению традиционно используемого базиса плоских волн. Сравнение полученного автором вращательного спектра для ряда органических соединений в том числе фторзамещенных соединений с данными спектроскопии указывают на работоспособность этого метода. Особый интерес представляет показанный в работе процесс вычисления термодинамических характеристик и энергий конформационных превращений для молекул с несимметричным потенциалом внутреннего вращения. Полученные результаты должны помочь при анализе механизмов реакций, например, во фторированных спиртах спектроскопическими методами.

Считаю, что диссертация Белова Александра Николаевича на тему «Применение базиса функций Матъе 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.

Даю согласие на обработку своих персональных данных.

_____ Шуклов Иван Алексеевич

ФГАОУ ВО «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»,

Кандидат химических наук

заместитель заведующего лабораторией фотоники квантово-размерных структур,

ведущий научный сотрудник

Адрес: Долгопрудный, Институтский пер. д.9

Телефон: +7-916-542-80-26, e-mail: shuklov.ia@mipt.ru