

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.411.02,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО
ОБРАЗОВАНИЯ «ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 15.06.2023 г. № 13

О присуждении **Белову Александру Николаевичу**, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Применение базиса функций Матъе в конформационном анализе органических соединений» по специальности 1.4.4. Физическая химия принята к защите 12 апреля 2023 г. протокол № 8 диссертационным советом 24.2.411.02, созданным на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» Министерства науки и высшего образования РФ; адрес: 170100, г. Тверь, ул. Желябова, 33; приказ № 105/нк от 11 апреля 2012 г.

Соискатель – Белов Александр Николаевич, 12 декабря 1979 года рождения, в 2002 году окончил государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Тверской государственный университет» с присвоением квалификации физик по специальности «Физика»; в 2005 году окончил аспирантуру государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Тверской государственный университет».

Работает старшим преподавателем кафедры общей физики физико-технического факультета федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» Министерства науки и высшего образования РФ.

Диссертация выполнена на кафедре общей физики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» Министерства науки и высшего образования РФ.

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор Орлов Юрий Димитриевич, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет», заведующий кафедрой общей физики.

Официальные оппоненты: Захаров Анатолий Юльевич, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

«Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого», профессор кафедры общей и экспериментальной физики; Карташинская Елена Сергеевна, доктор химических наук, федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко», отдел супрамолекулярной химии, научный сотрудник, дали **положительные отзывы** на диссертацию.

Ведущая организация - федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», г. Нижний Новгород, в своем **положительном отзыве**, подписанном доктором химических наук, профессором кафедры физической химии Зеленцовым Сергеем Васильевичем и утвержденном кандидатом физико-математических наук, проректором по науке и инновациям Грязновым Михаилом Юрьевичем, указала, что диссертационная работа Белова А.Н. представляет собой научно-квалификационную работу, которая по актуальности поставленной задачи, новизне и достоверности полученных результатов соответствует требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям (п.9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденное Постановлением Правительства Российской Федерации 24 сентября 2013 года № 842 (в текущей редакции)), а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Соискатель имеет 67 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 19 работ, из них 6 статей в журналах, входящих в Перечень ВАК и/или индексируемых в WoS и/или Scopus. Получено свидетельство о государственной регистрации программного комплекса.

Наиболее значимые из них:

1. Белов, А.Н. Гамильтониан одномерного торсионного уравнения Шрёдингера в комплекснозначном базисе функций Матъе / Белов А.Н., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2017. т.60. №6. с. 7-12.

2. Belov, A.N. Measure of basis efficiency at solving the Schrödinger torsion equation. Reaching the variational limit / Belov A.N., Turovtsev V.V., Fedina Yu.A., Orlov Yu.D. // Journal of Physics: Conference Series. – 2020. V. 1658. Issue 1. art.no.012003.

3. Белов, А.Н. Меры эффективности базиса в задаче внутреннего вращения / Белов А.Н., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2020. №12. с. 338-447.

Публикации в достаточной степени отражают содержание, новизну, практическую и теоретическую значимость диссертационного исследования.

На диссертацию и автореферат поступило 6 отзывов, все **отзывы положительные**:

1. Мирошниченко Евгения Александровича, доктора химических наук, главного научного сотрудника ФГБУН «Федеральный исследовательский

центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН». В отзыве содержится замечание, что отсутствуют оценки количества необходимых уровней энергии внутреннего вращения для вычисления термодинамических величин.

2. Шажко Ярослава Витальевича, кандидата технических наук, заместителя директора по научной работе ФГБУН «Институт физики горных процессов». Имеется замечание, что в работе не рассмотрен вопрос стабильности конформеров для рассматриваемых соединений.

3. Щербакова Игоря Николаевича, доктора химических наук, доцента, ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», заведующего кафедрой Физической и коллоидной химии. Замечаний не содержит.

4. Хурсана Сергея Леонидовича, доктора химических наук, профессора, Уфимский институт химии – обособленное структурное подразделение ФГБНУ «Уфимский федеральный исследовательский центр РАН», заместителя директора, заведующего лабораторией химической физики. Замечаний не содержит.

5. Шуклова Ивана Алексеевича, кандидата химических наук, заместителя заведующего лабораторией фотоники квантово-размерных структур ФГАОУ ВО «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)». Замечаний не содержит.

6. Пивинной Татьяны Степановны, доктора химических наук, профессора, ведущего научного сотрудника ФГБУН «Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН». Содержит замечания: не представлены сравнительные характеристики базиса ФМ и базиса ПВ; из автореферата не ясно для чего проводится варьирование параметра q функций Матье; есть неточности в оформлении.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что официальные оппоненты и сотрудники ведущей организации являются специалистами высокой профессиональной квалификации в области физической химии. Официальный оппонент А.Ю. Захаров является признанным специалистом в области термодинамики, статистической физики, а также теоретической и математической физики. Официальный оппонент Е.С. Карташинская является специалистом в области квантово-химических расчетов.

Диссертационный совет отмечает, что **на основании выполненных соискателем исследований:**

- **разработан** способ построения матрицы гамильтониана торсионного уравнения Шрёдингера в базисе функций Матье, что позволило получить значения энергий уровней внутреннего вращения и соответствующие им функции состояния (волновые функции). На основании выполненных математических преобразований в базисе функций Матье получено выражение для амплитуды и плотности вероятности состояний.

- **введен** и обоснован критерий эффективности базисов при численном решении уравнения Шредингера для внутреннего вращения на основе понятия достижения вариационного предела.

- **разработан** способ использования базиса функций Матье при решении задач конформационного анализа, в частности, нахождения мольных долей конформеров внутреннего вращения, определения энергий конформационных переходов и вклада внутреннего вращения в термодинамические характеристики.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что полученные в диссертационной работе результаты позволяют использовать базис функций Матье для численного решения в матричном виде уравнения Шредингера для внутреннего вращения. Показано, что выбранный способ решения дает незначительные вычислительные погрешности. Установлено, что количество достоверно вычисляемых уровней линейно зависит от числа базисных функций и не зависит от вида потенциала внутреннего вращения. Для конформеров внутреннего вращения в базисе функций Матье получено аналитическое выражение для распределения плотности вероятности состояний.

Значение полученных соискателем **результатов исследования для практики** обусловлено тем, что указанный способ решения торсионного уравнения Шредингера в базисе функций Матье позволяет получать спектр внутреннего вращения, энергии конформационных переходов и вращательные вклады для каждого из конформеров в термодинамические характеристики. Показано, что учет распределения энергетических уровней внутреннего вращения позволяет более точно прогнозировать конформационные переходы. Полученные в работе величины для ряда соединений могут быть использованы при формировании справочных материалов.

Оценка достоверности результатов работы основана на использовании уравнения Шредингера для внутреннего вращения. Для ряда соединений проведено сравнение расчетов в базисе функций Матье с данными спектроскопии, показавшее хорошее соответствие. Расчеты с варьированием параметра функций Матье показали вычислительную устойчивость результатов.

Личный вклад соискателя заключается в самостоятельном получении всех значимых результатов. Постановка задач и обсуждение результатов проводились совместно с научным руководителем. Автор самостоятельно производил необходимые математические вычисления. Аналитические выражения для вычисления интегралов, содержащих функции Матье, и результат для плотности вероятности состояний получены автором лично.

Автор также принимал непосредственное участие в подготовке публикаций, самостоятельно выполнил подготовку тезисов и докладов.

В ходе защиты диссертации были высказаны критические замечания о

физической интерпретации параметра q базиса функций Матье, а также об оценке стабильности конформеров.

Соискатель Белов А.Н. ответил:

1. Параметр q в работе является действительным положительным числом. Варьированием параметра q в пределах от 1 до 10 показана вычислительная устойчивость результатов расчетов к изменению q . В случае использования приближений, где структурная функция является константой, а потенциальная – синусоидой, уравнение Шредингера для внутреннего вращения сводится к уравнению Матье. При этом параметр q оказывается связанным со структурной функцией простым соотношением.

2. Стабильность конформера определяется глубиной потенциальной ямы и величиной kT . В работе рассматривались внутренние вращения с потенциальными ямами, глубина которых заметно превосходит величину kT . При этом, как показано в работе, в каждой потенциальной яме оказывалось достаточное количество энергетических уровней. Таким образом, рассмотренные в работе конформеры внутреннего вращения являются стабильными.

Диссертация соответствует критериям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» № 842 от 24.09.2013 г. в текущей редакции. На заседании 15 июня 2023 года диссертационный совет 24.2.411.02 принял решение за разработку методики применения базиса функций Матье в конформационном анализе органических соединений, **присудить** Белову А.Н. ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 11 человек (из них 4 доктора наук по специальности 1.4.4. Физическая химия (физико-математические науки)), участвовавших в заседании, из 15 человек, входящих в состав совета, проголосовал: «за» – 11, «против» – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Заместитель председателя
диссертационного совета

Каплунов
Иван Александрович

Ученый секретарь
диссертационного совета

Барабанова
Екатерина Владимировна

15.06.2023 г.