

UNIVERSITÄT ROSTOCK

Prof. Dr. rer. Nat. Sergey P. Verevkin

Institut für Chemie

Abteilung Physikalische Chemie Fax: +49-381-498-6524

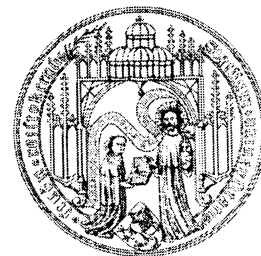
Dr.-Lorenz-Weg, 1 Tel :+49-381-498-6508

18059 Rostock, Germany sergey.verevkin@uni-rostock.de

Universität Rostock

Institut für Chemie

18051 Rostock



ФГБОУ ВПО «Тверской государственный университет»
Ученому секретарю диссертационного совета Д 212.263.02
кандидат химических наук, доценту
Феофановой М.А.
170002, г. Тверь, Садовый переулок, 35

Германия, Росток, 22.05.2014

Отзыв

по диссертации «Создание и применение квантовомеханической модели расчета термодинамических свойств веществ в широком интервале температур»
на соискание учёной степени доктора физико-математических наук

по специальности

02.00.04 - физическая химия

Туровцев Владимир Владимирович

Диссертационная работа „Создание и применение квантово-механической модели расчета термодинамических свойств веществ в широком интервале температур“ представленная на соискание учёной степени доктора физико-математических наук является своевременным вкладом в развитие квантово-химических методов расчета термодинамических свойств.

Хотелось бы особенно выделить два аспекта диссертационной работы. Первый - разработка ангармонического приближения. Для массовых расчетов термодинамических свойств на современном этапе широко используется приближение "жесткий ротатор-гармонический осциллятор". Это приближение хорошо справляется с расчетом только ограниченного количества простых молекул. Давая результаты на уровне «химической точности» в 4-5 кДж/моль для энергетических свойств. Усложнение строения молекулы за счет разветвления и внутреннего вращения значительно снижает надежность предсказания, а порой приводит к совершенно неприемлемым результатам. В этой связи постановка задачи разработки на основе положений квантовой механики и статистической физики модели прогнозирования

достоверных значений термодинамических свойств многоатомных соединений в ангармоническом приближении является актуальной.

Второй важный аспект - разработка методики расчета свойств в широком температурном диапазоне. Как правило, использование расчетных ангармонических, масштабированных или гармонических частот, приводит к прогрессирующей ошибке особенно с ростом температуры и числа атомов. Кроме того, природа скалирующих факторов безусловно должна измениться с температурой. Учитывая важность успехов квантовой химии для оптимизации технологических процессов при повышенных температурах, достижение заявленной точности в общем случае возможно только с помощью ангармонической модели предлагаемой автором.

Эти два важных аспекта легли в основу авторской методики для расчета энтальпии, энтропии, свободной энергии и теплоемкости многоатомных молекул с учетом ангармонизма колебательных уровней и вклада внутреннего вращения в широком температурном интервале. Предложенная автором квантово-механическая модель оценки термодинамических свойств многоатомных веществ, на мой взгляд, является новым и крупным вкладом в развитие расчетных методов физической химии.

Основные результаты работы детально, но четко сформулированы в одиннадцати выводах. Замечаний по тексту автореферата и содержанию работы нет.

Полагаю, что представленная диссертационная работа содержит новые и уникальные теоретические разработки и результаты, а соискатель Туровцев Владимир Владимирович, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Доктор химических наук,
Профессор кафедры физической химии
университета города Росток



С.П. Веревкин

Universität Rostock
Institut für Chemie
Abt. Physikalische Chemie
Dr.-Lorenz-Weg, 1
18059, Rostock
Tel :+49-381-498-6508
e-mail: sergey.verevkin@uni-rostock.de

Universität Rostock
Institut für Chemie
18051 Rostock