

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации В.В. Туровцева «Создание и применение квантовомеханической модели расчета термодинамических свойств веществ в широком интервале температур», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия

Актуальность и практическая значимость квантовомеханических расчетов обусловлена тем, что термодинамические свойства имеются в настоящее время только для ~ 0.02% известных веществ. Для радикалов имеются только энтальпии образования около 500 соединений. Знание термодинамических свойств позволяет оптимизировать технологические процессы, конструировать вещества с заданными эксплуатационными свойствами.

Автором разработана модель расчета основных термодинамических функций многоатомных молекул с учетом ангармонизма колебательных уровней и вклада внутреннего вращения. Предложены и обоснованы принципы построения феноменологических соотношений “строение-свойство” в рамках теории функционала плотности и “квантовой теории атомов в молекуле”.

Изучено распределение электронной плотности в алканах, нитроалканах и их радикалах. Оценено влияние свободной валентности на параметры радикального центра и ближайшего окружения.

Найдено решение торсионного уравнения Шредингера в базисе плоских волн с периодическим потенциалом общего вида в случае, когда потенциальная и структурная функции представлены в виде разложения в ряд Фурье по синусам и по косинусам. Выполнен расчет основных термодинамических свойств n-алканов, нитроалканов и их радикалов от 298 до 1500 К.

Туровцев В.В. существенно расширил и развил квантовомеханические методы расчета термодинамических свойств молекул и радикалов, приблизил погрешности расчетов к уровню современных экспериментальных величин. Практически им создано новое направление квантовохимических расчетных методов.

Рецензируемая работа удовлетворяет требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор, Туровцев В.В., заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.04-физическая химия.

Главный научный сотрудник
ИХФ им. Н.Н. Семенова РАН
доктор химических наук



Мирошниченко Е.А.

119991 г.Москва, ул. Косыгина,4

Собственноручную подпись
сотрудника *Мирошниченко Е.А.*
удостоверяю
Секретарь *А.И.*

