

Отзыв

На автореферат диссертационной работы Туровцева Владимира Владимировича
«Создание и применение квантовомеханической модели расчета термодинамических свойств
веществ в широком интервале температур»

Количество новых синтезируемых соединений лавинообразно возрастает, а экспериментальное определение их термодинамических характеристик остается сложной и трудоемкой работой. Изучение термодинамических свойств - неотъемлемая часть развития молекулярной физики, моделирования химических процессов и оптимизации процессов химических производств, развития промышленной фармации и изучения процессов в окружающей среде. Установление закономерностей «строение вещества – свойство» - одна из центральных задач химии. Поэтому отсутствие термодинамических свойств соединений часто усложняет а иногда и делает невозможным решение многих задач в названных областях науки и техники.

В этой связи цель работы - прогнозирование термодинамических свойств соединений на основе квантовомеханических расчетов и установление количественных корреляций «электронное строение – свойство» не вызывает сомнения.

Представленная работа выглядит последовательной и хорошо спланированной.

В обзоре литературы рассмотрены два главных направления в квантовой химии – решение уравнения Шредингера и теория функционала плотности. Убедительно показана наибольшая перспективность использования методологии функционала плотности (DFT) и квантовой теории атомов в молекуле (QTAIM) для решения задач диссертации.

Главным достоинством работы стала разработка квантовомеханической модели, которая позволила определить сразу четыре термодинамических параметра (энтальпию, энтропию, свободную энергию и теплоемкость) многоатомных молекул в широком 298-1500 К интервале температур.

Интересным в теоретическом отношении является раздел, в котором автор уточняет понятия «неспаренного электрона» и «свободной валентности» в теории QTAIM.

Вместе с тем в работе следует отметить несколько недостатков:

1. В автореферате декларируется апробация разработанной модели на широком классе O-, N-, S- содержащих органических соединений, хотя из них в диссертацию включены только n-нитроалканы и n-нитроалкильные радикалы. Представление термодинамических параметров для более разнообразных классов органических соединений могло бы обогатить представленную работу.

2. В тексте автореферата утверждается, что согласно данным таблицы 5 предпочтительным методом оценки погрешности полной электронной энергии является MP4SDTQ/6-311++G(3df,3pd). Но согласно данным той же таблицы метод B3LYP с базисами 6-311++G(3df,3pd) 6-311++g(3df,3pd) дает меньшие погрешности расчета полной электронной энергии для H₂ и N₂.

Приведенные замечания не влияют на высокую положительную оценку диссертационной работы Туровцева В.В., являющейся новым весомым вкладом в развитие направления физической химии – применение квантовой механики в термодинамике, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико – математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Профессор кафедры физической и коллоидной химии
Национального университета «Львівська політехніка»

д.х.н., проф.

Подпись Дибривного В.Н. заверяю
Ученый секретарь Национального университета
«Львівська політехніка»

вул. Степана Бандери, 12, м. Львів, 79013



Дибривный В.Н.

Р.Б. Брылынский