

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Туровцева В.В.

“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.

В представленной работе приведены результаты развития и совершенствования неэмпирических квантовохимических методов прогнозирования величин различных свойств и характеристик химических соединений с использованием подходов квантовой механики.

Работа представляет значительный теоретический интерес поскольку в ней сделан существенный шаг в решении фундаментальной проблемы нахождения новых закономерностей в соотношении полученных опытным путем свойств веществ с их строением и в разработке на этой основе методов прогнозирования термодинамических характеристик химических соединений.

Полученные результаты имеют несомненную практическую ценность для проведения термодинамического анализа технологических схем соответствующих промышленных синтезов с целью их рационализации, оптимизации и разработки альтернативных вариантов.

Наиболее существенным представляются следующие результаты исследований:

- глубокий анализ и развитие квантовомеханического подхода и расчетных методик применительно к определению термодинамических свойств соединений: геометрических параметров соединений, полной электронной энергии, колебательных спектров с учетом ангармоничности, внутреннего вращения;

- анализ и развитие с квантовых позиций аддитивных подходов к оценке термодинамических свойств соединений, повышающий точность аддитивных оценок свойств;

- результаты определений ангармонических колебательных спектров 35 молекул алканов и нитроалканов и соответствующих им радикалов, потенциальных функций внутреннего вращения в молекулах ряда алканов и нитроалканов и производных от них радикалах, термодинамических свойств представительной группы нитроалканов и алкильных и нитроалкильных радикалов;

- разработка пакета программ для практических расчетов различных свойств соединений.

Работа широко апробирована на научных конференциях разного уровня, ее результаты в достаточной степени отражены в приведенных публикациях.

Рассматриваемая работа соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание степени доктора физико-математических наук, а новизна и важность развиваемого автором научного направления по развитию и совершенствованию неэмпирических квантовохимических методов прогнозирования величин различных свойств и характеристик химических соединений на основе квантовомеханических подходов и полученные при этом результаты свидетельствуют о том, что ее автор, Туровцев Владимир Владимирович, заслуживает присуждения ему искомой степени.

6 июня 2014 г.

Доктор химических наук,  
профессор



Г.Н. Роганов

Подпись профессора кафедры „Химической технологии высокомолекулярных соединений“ д.х.н, профессора Роганова Геннадия Николаевича удостоверяю.

Начальник отдела кадров  
УО „Могилевский государственный  
университет продовольствия“



А.В. Копышева