

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Русаковой Натальи Петровны «Квантовохимическое исследование электронного строения серосодержащих молекул и радикалов», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Диссертационная работа Русаковой Н.П. посвящена определению параметров геометрического и электронного строения серосодержащих молекул и радикалов. Такие данные необходимы, с фундаментальной точки зрения, для установления взаимосвязи свойств вещества со строением его молекул. Кроме того, хорошо известна биологическая роль серосодержащих соединений в функционировании различных органов и тканей живых организмов, в протекании в них различных физиологических и биохимических процессов. Вместе с тем, большое количество биологически активных молекул и радикалов серы практически не изучены из-за ничтожно малого времени их существования в свободном виде. Сказанное определяет несомненную актуальность и практическую направленность диссертационного исследования, выполненного Русаковой Н.П.

Для достижения поставленной цели автором были использованы квантово-химические расчеты, результаты которых позволяют охарактеризовать распределение электронной плотности в стационарных состояниях (как правило, в энергетических минимумах) без привлечения упрощений и модельных соображений. Для интерпретации полученных таким образом результатов автором была применена квантовая теория QТАИМ (квантовая теория «атомов в молекулах»). Следует отметить, что данная теория – одна из наиболее теоретически обоснованных и обладающая достаточной долей наглядности. В рамках такого подхода Русаковой Н.П. был выполнен анализ геометрического и электронного строения большого количества гомологов органических и неорганических молекул и радикалов поливалентной серы, дано обоснование групповой фрагментации молекул и радикалов, впервые получено распределение спиновой плотности для ряда серосодержащих радикалов; проведён анализ индуктивного влияния групп, содержащих атомы поливалентной серы. К числу значимых итогов работы Русаковой Н.П. следует отнести как разработку метода построения, так и само построение шкалы электроотрицательностей групп для молекул и радикалов поливалентной серы, которая может быть использована при моделировании вещества с заданными свойствами. Важно, что автор видит возможность не только использования рассчитанных характеристик (зарядов, энергий, объёмов) атомных групп как дескрипторов строения в других неэмпирических моделях (это стандартная практика), но и рассматривает перспективу применения разработанного метода составления качественных шкал электроотрицательностей при построении соответствующих шкал для представителей гомологических рядов, содержащих другие гетероатомы.

Вместе с тем, при прочтении автореферата возникли следующие вопросы и замечания.

1. Диссертант для определения зарядов атомов использует характеристики распределения зарядовой плотности, а именно, поток градиента электронной плотности. Однако помимо этого метода существует большое количество других методов определения зарядов атомов (например, анализ заселенности орбиталей по схеме Малликена, метод Лёвдина, основанный на ортогонализации базисных функций, метод определения зарядов на основе распределения электростатического потенциала и др.),

которые не упоминаются и не обсуждаются в автореферате. Чем обоснован выбор метода, использованного автором работы? Проводил ли диссертант сравнение своих результатов и результатов, полученных с использованием других существующих методов? И если да, то, как соотносятся между собой эти результаты?

2. На стр. 8 автореферата автор использует термин «поток вектора градиента электронной плотности». Но градиент – это и есть вектор! Правильное написание – «поток градиента электронной плотности». Оригинальные работы Бейдера, автора квантовой теории QТАИМ, оперируют термином «an electron density distribution's gradient vector field», в переводе на русский - векторное поле градиента электронной плотности. И это корректное математическое определение. Следует аккуратнее и тщательнее относиться к написанию ключевых терминов.

В целом, судя по автореферату, можно сделать заключение о том, что диссертационная работа Русаковой Н.П. выполнена на современном научном уровне. По содержанию, объему, актуальности, научной новизне и практической значимости рассматриваемая работа соответствует критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации в последней редакции от 24.09.13 № 842, а сама Русакова Наталья Петровна заслуживает присуждения ей искомой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Ведущий научный сотрудник лаборатории

«ЯМР-спектроскопия и численные методы
исследования жидких систем»

Федерального государственного бюджетного учреждения науки

Института химии растворов им. Г.А. Крестова

Российской академии наук,

доктор химических наук, профессор

Федотова

М. В. Федотова

153045 г. Иваново, ул. Академическая, 1

+7 (4932) 351869

hebrus@mail.ru

11.03.2016 z

Подпись М. В. Федотовой заверяю

Ученый секретарь ИХР РАН,

к.х.н.



Ю. П. Пуховский