

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

Исследования строения и свойств серосодержащих соединений представляет особый интерес для различных областей науки и технологий, таких как нефтехимия, экология, фармакология. При этом соответствующие работы на экспериментальном уровне часто встречают серьезные затруднения, связанные с трудностями выделения чистых образцов и их токсичностью. Также, на фоне высочайшей реакционной способности практически трудно осуществимы подобные исследования для радикалов серосодержащих соединений. В тоже время, достигнутый прогресс квантовой химии, широкое распространение соответствующих комплексов программ открывает возможность проведения таких исследований на расчетно-теоретическом уровне с гарантией получения достаточно достоверных результатов. Все вышесказанное свидетельствует об актуальности темы данной диссертации, и практической значимости ее результатов.

Особо следует отметить то, что в данной диссертации исследования произведены в рамках «квантовой теории атомов в молекуле» (QTAIM – по международной аббревиатуре) Р. Бейдера. Это современная, физически обоснованная полевая теория наилучшим образом описывает распределение электронной плотности в молекулах. Она наиболее популярна среди физиков; в нашей стране систематические исследования на ее основе проводятся только четырьмя научными группами, в одной из которых выполнена представленная диссертация. И уже это определяет научную новизну и теоретическую значимость данной диссертационной работы. Также особо следует отметить общее число изученных соединений (молекул и радикалов) и их более двухсот (!), при этом рассмотрены гомологические ряды и изомеры, в которых наряду с серой присутствует и кислород..

К важнейшим результатам, полученным в диссертации, по моему мнению, следует отнести:

1. Квантовомеханическое обоснование группового фрагментирования серосодержащих молекул и радикалов в рамках QTAIM;
2. Непосредственное введение набора фрагментов (групп) для серосодержащих молекул и радикалов, и их классификацию на фрагменты переносимые, частично переносимые, и уникальные (непереносимые).

