

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

Взаимосвязь «строение-свойство» является одним из базовых принципов современной физической химии. В автореферате диссертации Русаковой Н. П. изложена модель построения шкалы электротрицательностей групп, исходя из распределения электронной плотности. Основой модели служит «квантовая теория атомов в молекуле» Р. Бейдера - наиболее теоретически обоснованный подход, связывающий наблюдаемые квантовой механики с понятиями классической теории строения молекул. В представленной работе проведены массовые квантовохимические расчеты серосодержащих соединений и получено значительное количество интегральных электронных параметров атомов и групп. Изучено влияние более электроотрицательных групп на молекулярную цепь и найдены количественные меры, характеризующие индуктивный эффект этих групп. Тем самым появляется возможность построения надежных количественных корреляций «строение-свойство» (*QSPR*) для целых классов серосодержащих соединений, что является **актуальной задачей**.

Изученные соединения содержат атомы серы с различной валентностью; в работе прослежено изменение их электронного строения и дальность распространения индуктивного влияния в зависимости от количества валентных связей и положения в молекулярной цепи. Для всех групп найдены «стандартные», переносимые величины электронных свойств - основа моделей *QSPR*. Для некоторых соединений проведено сопоставление с известными литературными данными, однако **новизна** работы заключается в том, что большинство изученных молекул и радикалов ранее не были охарактеризованы никакими физико-химическими величинами.

По работе, изложенной в автореферате диссертации, есть несколько замечаний:

- Не приняты во внимание локальные параметры электронной плотности, например, в критических точках связывающих путей;
- Не показана возможность применения найденных закономерностей в практической химии.

Указанные замечания никак не затрагивают существо работы. Диссертация Русаковой Н.П. «Квантовохимическое исследование электронного строения серосодержащих молекул и радикалов» по своей актуальности, научной новизне, достоверности и практическому значению

соответствует критериям п. 9 Постановления правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г. «О порядке присуждения ученых степеней», а ее автор, Русакова Наталья Петровна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 - физическая химия.

Зав. кафедрой квантовой химии

РХТУ им. Д.И. Менделеева

Д.ф.-м.н. профессор

Москва 125047

Миусская площадь, д.9.

Тел. +7-499-978-9584

E-mail: tsirel@muctr.ru

В.Г. Цирельсон

1 марта 2016

