

О Т З Ы В

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

Представленная к защите работа посвящена изучению электронного строения молекул и радикалов поливалентной серы в рамках теории функционала плотности (DFT) и построению на основе расчётных данных DFT, а именно зарядовой и спиновой плотности, качественной шкалы электроотрицательностей фрагментов соединений в рамках квантовой теории атомов в молекулах (QTAИМ). Такая шкала может быть использована для разработки молекулярных дескрипторов в рамках регрессионных подходов «структура-активность» и «структура-свойство» (QSAR и QSPR, соответственно) применяемых, в частности для синтеза новых лекарственных препаратов. Методы QSAR и QSPR используются фармацевтическими компаниями как средство предварительной оценки активности новых соединений до использования дорогостоящего экспериментального тестирования. По этим причинам тема диссертации представляется несомненно актуальной. Кроме практической значимости работа интересна с концептуальной точки зрения, поскольку в ней фактически решается вопрос о возможности разделения химического соединения на фрагменты, взаимодействующие посредством обмена электронами. Судя по приведённым результатам, как для молекул, так и радикалов такое разделение возможно, очевидно из-за отсутствия заметного переноса электронов между фрагментами в выбранном автором классе соединений.

Сильной стороной работы является сочетание DFT расчётов молекул и радикалов нескольких типов серосодержащих соединений с последующим анализом бейдеровских зарядовых и спиновых плотностей в рамках QTAИМ. Выбранный подход позволил автору предложить схему деления рассматриваемых соединений на более или менее независимые фрагменты. По бейдеровским зарядам этих фрагментов была предложена качественная шкала электроотрицательностей.

По работе имеется следующее замечание:

В приведённом примере (Таблица 3) радикала $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_n-(\text{O}-\text{S}-\text{O})\cdot$ убедительно показано, что неспаренный электрон делокализован только по фрагменту O-S-O и практически не распространяется по цепи $-(\text{CH}_2)_n$. При этом не упоминается возможность переноса электрона от радикального центра по цепи, если на другом её конце присутствует фрагмент, содержащий гетероатомы. Такой перенос возможен, например, по механизму спиновой поляризации, и имеет место для белковых молекулярных систем. Возникает вопрос, нет ли среди рассмотренных радикалов примера такого типа.

Несмотря на приведённое замечание, которое не касается основного содержания работы, диссертация Русаковой Н.П. по своей актуальности, научной и практической значимости и новизне соответствует требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям (п.9 «Положения о присуждения учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г.), а Русакова Наталья Петровна заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Зав. лабораторией квантовой химии
Института катализа им. Г.К.Борескова,
д.х.н.

Адрес: ИК СО РАН
630090, Новосибирск, пр. Лаврентьева, 5
E-mail: I.L.Zilberberg@catalysis.ru
Тел. + 7 383 326 94 19
23.03.2016

