

UNIVERSITÄT ROSTOCK

Prof. Dr. S.P. Verevkin

Fachbereich Chemie

Institut für Physikalische Chemie

Dr.-Lorenz-Weg, 1

18059 Rostock, Germany

Fax: +0049-381-498-6502

Tel :+0049-381-498-6508

e-mail: sergey.verevkin@uni-rostock.de



ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

М.А. Феофанова

Ученый секретарь

совета по защите диссертаций Д 212.263.02

кандидат химических наук, доцент

170002, г. Тверь, Садовый пер., д. 35, ауд. 226.

Германия, Росток, 24.03.2016

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

К настоящему времени одним из основных инструментов изучения строения и свойств молекул и веществ является компьютерное моделирование. Актуальность и практическая значимость квантово-механических расчетов, изложенных в диссертации Русаковой Н.П., обусловлены тем, что в рамках надежных методов и моделей количественно охарактеризованы физико-химические свойства веществ, синтез которых крайне затруднен, а в случае радикалов и невозможен.

В представленной работе изучено распределение электронной плотности и получены электронные параметры атомов и групп молекул нескольких гомологических рядов. Тем самым, исходя из базовых постулатов компьютерной химии и классической теории строения молекул, закладывается основа для построения количественных корреляций «строение-свойство». Возможность создания таких корреляций и использование в них электронных параметров обосновано в «квантовой теории атомов в молекуле» Р. Бейдера. В результате в диссертации изучено электронное строение и получена шкала электроотрицательностей групп, составляющих молекулы различных гомологических рядов.

Замечания к автореферату диссертации:

- В автореферате не приведено достаточное обоснование выбранных методов расчета;
- Не указано, для каких «свойств» в взаимосвязях «строение-свойство» может быть применена полученная шкала электроотрицательностей.

Оценивая работу Русаковой Н.П. «Квантовохимическое исследование электронного строения серосодержащих молекул и радикалов» в целом считаю, что по своей актуальности, научной новизне, достоверности и практической значимости 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.

Доктор химических наук,
профессор кафедры физической химии
университета города Росток

С.П. Веревкин

Universität Rostock
Institut für Chemie
Abt. Physikalische Chemie
Dr.-Lorenz-Weg, 1
18059, Rostock
Tel :+ 49-381-498-6508
e-mail: sergey.verevkin@uni-rostock.de

Universität Rostock
Institut für Chemie
18051 Rostock

UNIVERSITÄT ROSTOCK

Dr. Vladimir N. Emel'yanenko

Fachbereich Chemie

Institut für Physikalische Chemie Fax: +49-381-498-6501

Dr.Lorenz-Weg, 1

Tel :+49-381-498-6499

18059 Rostock, Germany

vladimir.yemelyanenko@uni-rostock.de



ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

М.А. Феофанова

Ученый секретарь

совета по защите диссертаций Д 212.263.02

кандидат химических наук, доцент

170002, г. Тверь, Садовый пер., д. 35, ауд. 226.

Германия, Росток, 24.03.2016

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации

Русаковой Натальи Петровны

«КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ
СЕРСОДЕРЖАЩИХ МОЛЕКУЛ И РАДИКАЛОВ»,

представленной на соискание ученой степени

кандидата химических наук

по специальности 02.00.04 - физическая химия

Представленная диссертация развивает одно из основных направлений в физической химии – поиск взаимосвязей «строение-свойство». С этой точки зрения решаемая в работе задача представляется актуальной.

В основу предлагаемых количественных корреляций положен постулат о связи электронного строения с физико-химическими параметрами соединения. Поэтому в качестве базовой теории использована «квантовая теория атомов в молекуле» Р. Бейдера. Развиваемая в диссертации модель предлагает использовать электронные интегральные параметры атомов и атомных группировок как дескрипторы строения при установлении данных взаимосвязей. В работе изучен индуктивный эффект серосодержащих групп и, исходя из изменения зарядов ближайших фрагментов, получена шкала электроотрицательностей групп большого числа молекул.

Изучены соединения, синтез и всестороннее исследования которых крайне затруднены, а экспериментальное определение найденных в работе параметров вряд ли к настоящему времени возможно. Об этом говорит и крайне скудный фонд известных физико-химических свойств. Новизна, теоретическая и практическая значимость работы заключается в том, в рамках надежных расчетных методов получено значительное количество электронных параметров ранее не изученных соединений, которые могут быть использованы в различных феноменологических построениях.

К автореферату диссертации, есть несколько замечаний:

- Не показано применение выбранных дескрипторов к расчету термодинамических свойств веществ;
- Не найден вид конкретных взаимосвязей «строение-свойство».

Тем не менее, считаю, что диссертация Русаковой Н.П. «Квантовохимическое исследование электронного строения серосодержащих молекул и радикалов» по своей актуальности, научной новизне, достоверности и практической значимости 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.

Кандидат химических наук,
научный сотрудник кафедры физической химии
университета города Ростoka

В.Н. Емельяненко

Universität Rostock
Institut für Chemie
Abt. Physikalische Chemie
Dr.-Lorenz-Weg, 1
18059, Rostock
Tel :+49-381-498-6499
e-mail: vladimir.yemelyanenko@uni-rostock.de

Universität Rostock
Institut für Chemie
18051 Rostock