

О Т З Ы В

на автореферат диссертации Русакова Юрия Юрьевича “Квантово-химическое изучение констант спин-спинового взаимодействия с участием ядер селена и теллура”, представленной на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 - физическая химия

Исследование структуры элементоорганических соединений является актуальной задачей физической химии. Один из удобных инструментов ее решения основан на комплексном подходе, сочетающем использование теоретических (квантово-химические расчеты) и экспериментальных методов (спектроскопия ЯМР). Этот эффективный подход, успешно развиваемый в Иркутском институте химии им. А.Е. Фаворского, вносит существенный вклад в развитие общей теории конформационного анализа элементоорганических соединений.

Диссертационная работа Ю.Ю. Русакова, выполненная в русле этой перспективной тематики, посвящена разработке высокоточной методологии расчета констант спин-спинового взаимодействия (КССВ) с участием ядер селена и теллура, а также исследования стереоспецифичности этих констант. С этой целью диссертантом впервые были проведены высокоуровневые квантово-химические расчеты КССВ ${}^nJ(^{77}\text{Se}-\text{X})$ и ${}^nJ(^{125}\text{Te}-\text{X})$ ($\text{X} = {}^1\text{H}, {}^{13}\text{C}, {}^{15}\text{N}, {}^{19}\text{F}, {}^{29}\text{Si}, {}^{31}\text{P}, {}^{77}\text{Se}$; $n = 1-3$) для широкого ряда селено- и теллуруорганических, учитывающие влияния релятивистских эффектов для атомов Se и Te. Также впервые были выявлены и теоретически обоснованы стереохимические зависимости поведения рассчитанных КССВ. Разработаны и апробированы новые специализированные J-ориентированные базисные наборы для атомов селена и теллура. Все полученные результаты обладают несомненной научной новизной и могут служить эффективным инструментом структурного анализа селено- и теллуруорганических соединений.

Автореферат диссертации хорошо написан и оформлен, а его основные положения и выводы убедительно обоснованы. Материалы диссертации очень хорошо апробированы: они легли в основу 4-х обзоров и 18-и статей в профильных журналах, а представлялись на конференциях различного уровня. Принципиальных замечаний по существу работы нет. Единственное, что хотелось бы прояснить – рассматривалось ли влияние халько-/галогенофильных взаимодействий ($\text{Se/Te}\cdots\text{Cl}$, $\text{Se/Te}\cdots\text{Se/Te}$) на рассчитываемые значения КССВ? Дело в том, что такие взаимодействия могут быть достаточно сильны даже в растворах (см., например, <https://doi.org/10.1002/9783527825738.ch11>), особенно галогенсодержащих растворителей таких как CDCl_3 .

В целом и общем, считаю, что рассматриваемая диссертационная работа полностью удовлетворяет требованиям пп. 9–11,13,14 Положения о присуждении ученых степеней, утверждённого Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013 года, а соискатель, Русаков Ю.Ю., достоин присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 - физическая химия.

Главный научный сотрудник лаборатории металл-органических координационных полимеров Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук, доктор химических наук

Артемьев Александр Викторович

Адрес: 630090, Россия, г. Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 3.

Телефон: +7-993-011-5017

E-mail: chemisufarm@yandex.ru

Подпись Артемьева А.В. заверяю
И.о. ученого секретаря ИНХ СО РАН

к.х.н. Филатов Е.Ю.

30 мая 2022 г

