

О Т З Ы В

на автореферат диссертации Уханева Степана Александровича “Квантово-химические расчеты спектральных параметров ЯМР ^{19}F фторсодержащих соединений различных классов”, представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Диссертационная работа Степана Александровича посвящена разработке методологии квантово-химических расчетов спектральных параметров ЯМР ^{19}F . Диссертантом и его руководителем выполнено масштабное квантово-химическое исследование широкого ряда фторсодержащих соединений в рамках теории функционала плотности. Были подобраны оптимальные протоколы для вычисления химических сдвигов ^{19}F и КССВ с участием ядра фтора. Проведено детальное исследование стереохимического строения некоторых представителей непредельных фторсодержащих органических соединений. Подробно изучен релятивистский эффект влияния тяжелого атома на ядро атома фтора и оценен его вклад в значение химического сдвига ^{19}F . Полученные результаты имеют фундаментальное значение для развития ЯМР спектроскопии. Автореферат хорошо передает суть диссертационной работы. Результативность автора подтверждается 6 статьями в международных журналах, что является очень хорошим результатом.

Принципиальных замечаний к работе нет, однако имеется одно пожелание к разделу, посвященному релятивистскому эффекту тяжелого атома на параметры ЯМР ^{19}F . Исследование выполнено на органических молекулах, где атомы I и F разделены цепочкой из 1–4 атомов углерода. Для большей полноты работы, вероятно, имело смысл также проанализировать системы с прямой связью F–тяжелый атом. Например, фториды тяжелых p-элементов или очень популярные в химии перфторортеллуратные производные ($-\text{OTeF}_5$), для которых характерны большие КССВ $^{125}\text{Te}-^{19}\text{F}$ (> 3000 Гц) и достаточно интересные спектры ЯМР ^{19}F (*Chem. Rev.* 2025, 125, 9140, см. Figure 2).

Таким образом, что представленная диссертация полностью отвечает требованиям пп. 9–14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842 “О порядке присуждения ученых степеней”, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Уханев С.А., заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Главный научный сотрудник
лаборатории металл-органических
координационных полимеров
ФГБУН Института неорганической
химии им. А. В. Николаева Сибирского
отделения РАН (ИНХ СО РАН)
д.х.н. по специальности 02.00.08 –
химия элементоорганических соединений

Артемьев Александр Викторович

Проспект Академика Лаврентьева, 3,
Новосибирск, 630090
Тел.: 8-993-011-5017
E-mail: chemisufarm@yandex.ru

