

ОТЗЫВ

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"

Диссертационная работа Русакова Юрия Юрьевича посвящена разработке общих подходов к расчету констант спин-спинового взаимодействия (КССВ) с участием ядер селена и теллура и их применению в стереохимических исследованиях широкого ряда селено- и теллуруорганических соединений.

В работе особое внимание уделено изучению стереохимического поведения КССВ $^{77}\text{Se}-^1\text{H}$, связанному с ориентационным эффектом неподеленной электронной пары селена. Показано, что полученные закономерности в сочетании с экспериментальными измерениями могут успешно применяться для решения практических задач, связанных с определением стереохимического строения новых селеносодержащих гетероциклов и селанилалкенов с открытой цепью.

Автором выполнен ряд квантово-химических расчетов КССВ $^{77}\text{Se}-^{13}\text{C}$. Представлено подробное изучение влияния качества и ресурсоемкости базисного набора на точность проводимых расчетов. Особое внимание в работе уделено изучению релятивистских эффектов атома селена. Следует отметить, что изучение релятивистских эффектов в значениях КССВ $^{77}\text{Se}-^{13}\text{C}$ проведено на высоком четырехкомпонентном уровне теории электронной плотности в широком ряду селеносодержащих соединений. Были, в частности, рассчитаны релятивистские поправки, обусловленные как скалярными, так и спин-орбитальными эффектами, причем было установлено, что основное влияние оказывают именно скалярные взаимодействия, которые передаются через электроны связи.

Проведено исследование стереоспецифичности геминальных и вицинальных КССВ $^{77}\text{Se}-^{13}\text{C}$, что ранее никем не изучалось. В частности, было показано, что эти зависимости, полученные с учетом и без учета релятивистских поправок, практически совпадают, на основании чего сделан вывод о том, что роль релятивистских эффектов в дальних константах спин-спинового взаимодействия $^{77}\text{Se}-^{13}\text{C}$ минимальна.

Особо интересные результаты (на мой взгляд) были получены автором по проведению квантово-химические расчетов КССВ с участием теллура. Такие расчеты находятся на переднем плане мировой науки, а до появления работ диссертанта в данной области, публикаций, представляющих хоть сколько-нибудь адекватные результаты по этому вопросу, вообще не было. Для констант спин-спинового взаимодействия с участием теллура главная проблема заключалась в полном отсутствии соответствия теоретических и экспериментальных результатов, так как во многих случаях теоретические и экспериментальные данные различались в десятки раз! Этот пробел был успешно устранен диссертантом, который, с одной стороны, впервые в мире исследовал возможность высокоточного расчета КССВ теллура с наиболее популярными ЯМР-активными ядрами, ^1H , ^{13}C , ^{31}P , и, с другой стороны, изучил стереоспецифичность геминальных и вицинальных КССВ $^2\mathcal{J}(\text{Te},\text{H})$ и $^3\mathcal{J}(\text{Te},\text{H})$, представляющих важный инструмент стереохимического анализа.

Кроме того, по результатам проделанной работы была выявлена необходимость создания специализированных базисных наборов для атомов селена и теллура, предназначенных для расчета КССВ с участием этих ядер. И такие наборы, действительно, были созданы диссертантом и успешно апробированы в представительных рядах селено- и теллуруорганических соединений. Этот результат можно расценивать как достижение мирового масштаба, которое в значительной мере решает проблему практического применения квантово-химических расчетов КССВ с участием ядер селена и теллура.

Работа прошла серьёзную апробацию. По теме диссертации опубликованы 4 обзора и 18 оригинальных статей в рецензируемых научных журналах международного уровня первого и второго квартилей. По результатам исследований были также опубликованы 11 тезисов докладов на Российских и международных конференциях различного уровня.

Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации, а сама диссертационная работа Русакова Юрия Юрьевича "Квантово-химическое изучение констант спин-спинового взаимодействия с участием ядер селена и теллура" представляет собой законченный научно-квалификационный труд, предлагающий решение актуальных задач современной физической химии. Данная диссертационная работа открывает новые перспективы в стереохимическом анализе селено- и

теллуруорганических соединений с использованием подходов квантовой химии, обладая несомненной научной новизной и представляя достоверные и обоснованные результаты. Таким образом, данная диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени доктора химических наук (пп. 9-11, 13, 14 "Положения о присуждении учёных степеней", утвержденного постановлением правительства РФ от 24.09.2013 № 842), а ее автор, несомненно, заслуживает присуждения ему искомой ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 – "Физическая химия".

Заведующая кафедрой
Химической технологии им. Н.И. Ярополова
ФГБОУ ВО «Иркутский национальный
исследовательский технический университет»,
доктор химических наук, профессор

Дьячкова Светлана Георгиевна



Контактные данные:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Иркутский национальный исследовательский технический университет» (ФГБОУ ВО «ИРНИТУ»)

Почтовый адрес: 664074, г. Иркутск, ул. Лермонтова 83

Телефон/факс: +7 (3952) 405-100, 405-009

E-mail: info@istu.edu ; dyachkova@istu.edu

Адрес сайта: <http://www.istu.edu>