

ОТЗЫВ

на автореферат Русакова Юрия Юрьевича «Квантово-химическое изучение констант спин-спинового взаимодействия с участием ядер селена и теллура», представленный на соискание учёной степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Химия соединений селена и теллура представляет в настоящее время большой интерес для многих областей промышленности, от фоточувствительной электроники до фармацевтической промышленности. Исследование селено- и теллуросодержащих соединений, проведенное в данной работе, несомненно является актуальной и важной в практическом отношении задачей. В целом, диссертационная работа Русакова Ю.Ю. посвящена разработке высокоточной методологии расчета констант спин-спинового взаимодействия с участием ядер селена и теллура и изучению стереохимических особенностей этих констант на предмет их применимости для структурного и стереохимического анализа селено- и теллуросодержащих соединений.

К важнейшим результатам работы стоит отнести следующие:

1. Впервые проведены высокоуровневые коррелированные квантово-химические расчеты прямых, геминальных и вицинальных КССВ с участием селена и теллура с рассмотрением роли релятивистских эффектов в широком ряду селено- и теллуруорганических соединений. При этом впервые было проведено подробное теоретическое изучение стереохимического поведения КССВ с участием селена и теллура.
2. Разработаны и апробированы новые специализированные *J*-ориентированные базисные наборы для атомов селена и теллура.

Результаты данной работы могут служить эффективным инструментом структурного анализа селено- и теллуруорганических соединений. Так, на основе разработанной автором оригинальной методики, сочетающей в себе высокоточные квантово-химические расчеты констант спин-спинового взаимодействия с участием селена и теллура в рамках метода поляризационного пропагатора второго порядка и анализа протонно-связанных спектров ЯМР ^{77}Se , проведено изучение стереохимического строения ряда 2-замещенных селенофенов, селеносодержащих гликозидов, фенилселанилалкенов, селеносодержащих четырех-, пяти- и шестичленных гетероциклов, *Z*-2-(винилсульфонил)этилселанил сульфидов, различных пирольных производных 1,3-диселенана и родственных им 1,2-диселеноланов.

Кроме того, автором впервые в мире (не побоюсь этого выражения) проведены высокоточные расчеты геминальных и вицинальных КССВ $J(\text{Te},\text{H})$ с учетом релятивистских, колебательных и сольватационных поправок, в результате чего была обнаружена ярковыраженная стереоспецифичность геминальных и вицинальных КССВ $J(\text{Te},\text{H})$ к ориентации неподеленной электронной пары теллура, которая была

подробно изучена на примере дивинилтеллурида.

В ходе выполнения данной работы были впервые проведены высокоточные расчеты прямых КССВ селена и теллура с атомом фосфора, $J(\text{Se},\text{P})$ и $J(\text{Te},\text{P})$, в серии замещенных фосфинселенидов и соответствующих теллуридов. По результатам проведенного исследования предложена и апробирована гибридная схема расчета прямых КССВ $J(\text{Se},\text{P})$ и $J(\text{Te},\text{P})$ и обнаружена заметная чувствительность релятивистских поправок к КССВ данного типа по отношению к характеру заместителей при атоме фосфора.

Наконец, автором разработаны и реализованы на практике новые эффективные специализированные J -ориентированные базисные наборы $asvXz-J$ ($X = 2, 3, 4$) для расчета КССВ с участием атомов селена и теллура. Данные базисные наборы были получены путем последовательного насыщения базисных оболочек вплоть до g -пространства. Обращает особое внимание обнаруженная автором закономерность, заключающаяся в том, что насыщение f -пространства играет определяющую роль для точного расчета КССВ с участием селена и особенно теллура.

Результаты диссертационной работы прошли обширную апробацию в виде 4 обзоров, 18 статей в реферируемых журналах, рекомендованных ВАК, и 11 докладов на российских и международных конференциях.

Автореферат диссертации не вызывает принципиальных замечаний. В целом, диссертационное исследование Русакова Юрия Юрьевича «Квантово-химическое изучение констант спин-спинового взаимодействия с участием ядер селена и теллура» является актуальной, логичной и завершённой научной работой, которая выполнена на современном вычислительном, экспериментальном и теоретическом уровнях. По объему научной и практической значимости данное диссертационное исследование полностью соответствует всем требованиям, изложенным в п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», а ее автор, Русаков Юрий Юрьевич, заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Проректор ФГБОУ ВО «Ангарский
государственный технический университет»,
доктор химических наук
(02.00.03-органическая химия),
профессор



Истомина Наталия Владимировна

665835, Иркутская область,
г. Ангарск, ул. Чайковского, 60
Телефон: 8(3955) 67-88-45; E-mail: prorector@angtu.ru

