

ОТЗЫВ

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

Диссертационная работа Уханева С.А. посвящена разработке оптимальной методики проведения квантово-химического моделирования спектров ЯМР ^{19}F , объединяющей в себе достаточную точность и рациональные вычислительные затраты. Актуальность тематики исследования не вызывает сомнений, поскольку аккуратное квантово-химическое моделирование спектров ЯМР в большинстве случаев является сложной и весьма нетривиальной задачей, а систематические исследования влияния различных эффектов на величины ключевых параметров (химических сдвигов и КССВ) крайне немногочисленны. Насколько мне известно, работа диссертанта в частности является первым систематическим исследованием подобного толка относительно спектров на ядрах ^{19}F , что отмечено в том числе и в тексте автореферата. Основная научная новизна работы заключается в предложении наиболее предпочтительных вычислительных схем, позволяющих получить достаточно точные результаты при сбалансированных требованиях к вычислительным ресурсам.

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в шести статьях в рецензируемых журналах, входящих в перечень рекомендованных ВАК, и представлены на конференциях различного уровня.

Степень достоверности результатов и личный вклад автора не вызывают сомнений. Исследования выполнены на высоком уровне.

Однако, к работе возникло несколько замечаний и вопросов:

- 1) В автореферате не раскрыты критерии выбора функционалов и базисных наборов для проведения их сравнительного анализа. Было бы не лишним привести аргументацию на этот счет.
- 2) В разделе 1.1. автореферата автор делает заключение, что оптимальными для проведения оптимизации структур являются базисные наборы resG-2 или rs-2 , однако, в разделе 1.4. оптимизация проводится с использованием cc-pVQZ без

пояснения причины смены базисного набора и обсуждения ограничений модели, подобранной в более ранних разделах.

- 3) Не очевидны мотивы маркировки различными цветами семейств базисных наборов (рис. 3 и 5). На мой взгляд, логичнее было бы ранжировать их, например, по степени предпочтительности, а не принадлежности к конкретному семейству. Либо же дать пояснение, почему сделан акцент именно на данном аспекте.
- 4) Планируется ли в дальнейшем исследование влияния эффектов применяемой модели сольватации в данном контексте? Этот момент представляется также достаточно важным.

Данные замечания не умаляют научную новизну и значимость данной работы. Таким образом, считаю, что диссертационная работа «Кваново-химические расчеты спектральных параметров ЯМР ^{19}F фторсодержащих соединений различных классов» отвечает требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям (пп. 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842 в действующей редакции), и ее автор, Уханев Степан Александрович, заслуживает присуждения искомой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Даю свое согласие на обработку персональных данных.

К.х.н., научный сотрудник
лаборатории специального органического синтеза
НИИ Физической и органической химии
Южного федерального университета

Козленко А.С.

Козленко Анастасия Сергеевна,
НИИ Физической и органической химии Южного федерального университета
Адрес: 344090, г. Ростов-на-Дону, пр. Стачки, д. 194/2
Тел.: +7(863)2184000; e-mail: kozlenko@sfedu.ru
07.05.2026

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «ЮЖНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»	
УПРАВЛЕНИЕ ДЕЛАМИ И КАДРОВОЙ РАБОТЫ	
Личную подпись <u>Козленко А.С.</u>	
ЗАБЕРЯЮ:	
Ведущий специалист по управлению персоналом <u>Иванов В.А. Володина</u>	
«08» 05 2026 г.	