

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Русакова Юрия Юрьевича «Квантово-химическое изучение константы спин-спинового взаимодействия с участием ядер селена и теллура»**

представленной на соискание ученой степени доктора химических наук
(специальность 1.4.4—Физическая химия)

Целью диссертационной работы является разработка высокоточной методологии расчета констант спин-спинового взаимодействия (КССВ) с участием ядер селена и теллура, и изучение их стереоспецифичности с целью применения для анализа строения практически важных селено- и теллуросодержащих соединений.

Автор диссертации успешно осуществил фундаментальное исследование по анализу возможностей и ограничений высокоуровневых коррелированных квантово-химических методов расчета КССВ с участием селена и теллура. Показал, что при расчете прямых КССВ селена/теллура с углеродом/фосфором учет релятивистских эффектов обязателен.

В работе, используя высокоточные расчеты, проведен анализ стереохимической зависимости геминальных и вицинальных КССВ $J(\text{Se},\text{H})$ и $J(\text{Se},\text{C})$. Показано, что для этих КССВ наблюдается ярко выраженное стереохимическое поведение, что может служить эффективным инструментом установления структуры селеноорганических соединений.

Разработанные методики и подходы были грамотно использованы диссертантом для изучения стереохимии ряда замещенных селенофенов, селеносодержащих гликозидов, фенилселанилалкенов, селеносодержащих 4-, 5- и 6-членных гетероциклов и т.д.

В рамках работы впервые проведены высокоточные расчеты КССВ $J(\text{Te},\text{H})$ с учетом релятивистских, колебательных и сольватационных поправок и обнаружена стереоспецифичность этих КССВ на примере дивинил теллурида.

Автором предложена и апробирована гибридная схема расчета прямых КССВ $J(\text{Se},\text{P})$ и $J(\text{Te},\text{P})$, оптимизированная с точки зрения «цена-качество». В ходе работы предложены новые специализированные J-ориентированные базисные наборы для расчета КССВ с участием атомов селена и теллура, и показана их эффективность.

По прочтении автореферата возникло одно замечание. По сути, эта работа посвящена в первую очередь в поиске адекватного расчетного приближения для оценки ЯМР параметра (КССВ). В такого рода работах для сравнения расчета с экспериментом важно иметь модельные системы, которые структурно очень определены (т.е. конформационно жесткие или же те, для которых имеются экспериментальные ЯМР параметры, полученные в условиях медленного обмена в шкале метода), чтобы не вносить дополнительный фактор, влияющий на расчетную величину, которую затем сравнивают с экспериментальной. Однако, в рамках данной работы автором в качестве моделей часто используются конформационно неоднородные системы, для которых экспериментально известны только усредненные КССВ. Поэтому качество расчета оценивается путем сравнения экспериментального значения с расчетом для конформеров с соответствующими весами. *Однако, вопрос насколько расчётная оценка заселенности форм согласуется с экспериментальной остается без обсуждения.*

Впрочем, это замечание не влияет на высокую оценку выполненной диссертационной работы. В целом автореферат дает полное представление о работе и квалификации автора и позволяет считать, что диссертационная работа, безусловно, является важным современным исследованием. Полученные результаты будут полезны для многих исследователей, работающих в области органической и структурной химии.

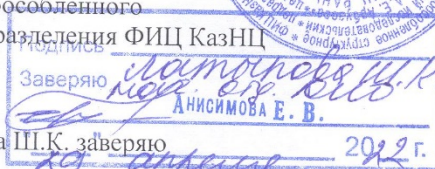
Считаю, что диссертация Русакова Юрия Юрьевича «Квантово-химическое изучение КССВ с участием ядер селена и теллура», является завершенной научно-квалификационной работой. По своему уровню, актуальности, достоверности и обоснованности выводов она полностью соответствует требованиям, предъявляемым к

диссертациям на соискание учёной степени доктора химических наук (пп. 9-11,13,14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 №842), а её автор Русаков Ю.Ю. безусловно заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

доктор химических наук по специальностям 1.4.3. Органическая химия и 1.4.4. Физическая химия, главный научный сотрудник лаборатории радиоспектроскопии ИОФХ им. А.Е.Арбузова – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН



Латыпов Шамиль Камильевич



Подпись Латыпова Ш.К. заверяю

«29» апреля 2022 г.

Российская Федерация, 420088, г. Казань, ул. Академика Арбузова, д. 8,
тел. +7 843 2731892, Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук»
e-mail: lsk@iopc.ru

В соответствии Федеральным законом от 27.07.2006 № 152-ФЗ «О персональных данных» настоящим дано согласие на обработку моих персональных данных в целях включения в аттестационное дело для защиты диссертации соискателя.



Латыпов Шамиль Камильевич

