

ОТЗЫВ

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

В работе выполнено исчерпывающее исследование возможностей различных базовых неэмперических схем расчета констант спин-спинового взаимодействия $J(^{77}\text{Se}, X)$, где $X = ^1\text{H}, ^{13}\text{C}, ^{15}\text{N}, ^{19}\text{F}, ^{29}\text{Si}, ^{31}\text{P}, ^{77}\text{Se}$ и $J(^{125}\text{Te}, Y)$, где $Y = ^1\text{H}, ^{13}\text{C}, ^{31}\text{P}$, в рамках метода поляризационного пропагатора второго порядка. В расчетах использовались специально разработанные локально плотные базисные наборы, адекватные для матричного представления операторов спин-спинового взаимодействия. При необходимости были определены релятивистские вклады четырехкомпонентной схемы метода функционала плотности. Тщательно рассмотрены зависимости констант J от локальных структурных особенностей на примере более чем девяноста содержащих Se и Te соединений.

Актуальность работы определяется необходимостью развития высокоточной и эффективной методологии квантово-химического расчета J с участием селена и теллура для изучения их стереоспецифичности и установления стереохимического строения селено- и теллууроорганических соединений методами ЯМР.

Научная новизна: Впервые на неэмпирическом коррелированном уровне теории проведено систематическое изучение стереохимического поведения геминальных и вицинальных $J(\text{Se}, \text{H})$ и $J(\text{Te}, \text{H})$. На основе разработанной методики, сочетающей в себе высокоточные квантово-химические расчеты J и анализ протонно-связанных спектров ЯМР ^{77}Se , проведено изучение стереохимического строения большого ряда соединений селена. Впервые изучена возможность высокоточного расчета прямых констант $J(\text{Se}, \text{C})$, $J(\text{Te}, \text{C})$, $J(\text{Se}, \text{P})$ и $J(\text{Te}, \text{P})$.

Полученные результаты имеют важное **практическое значение**, так как они дают возможность использование ЯМР ^{77}Se и ^{125}Te для определения локальных структурных особенностей, содержащих данные атомы соединений.

В качестве замечаний по изложению автореферата можно указать, что на странице 29 отсутствует изображение структуры **1**; в подписи к рис. 23 и в тексте автореферата отсутствует определение сокращений FC, SD, PSO и DSO; в тексте автореферата отсутствует комментарий плохого соответствия экспериментального и теоретических значений $J(\text{Se}, \text{Se})$ для соединения **79**.

Диссертационная работа Русакова Юрия Юрьевича является исследованием, выполненным на высоком научном уровне. В работе успешно решена проблема надежной детальной характеристики важнейших факторов, определяющих стереохимическую зависимость констант спин-спинового взаимодействия соединений Se и Te. Диссертация является законченной научной работой, имеющей существенное значение для получения структурно значимой информации из ЯМР спектров.

Совокупность полученных в работе результатов и сформулированных автором выводов позволяет считать, что диссертационная работа Ю.Ю. Русакова удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям по специальности 1.4.4 – физическая химия, а ее автор заслуживает присуждения искомой ученой степени.

в.н.с. лаб. «молекулярной спектроскопии и анализа» ИХХТ СО РАН - обособленного подразделения ФИЦ КНЦ СО РАН, д.х.н. по специальности 1.4.4 – физическая химия

Наслузов Владимир Алексеевич

31.05.2022 г.

г.н.с. лаб. «молекулярной спектроскопии и анализа» ИХХТ СО РАН - обособленного подразделения ФИЦ КНЦ СО РАН, д.х.н. по специальности 1.4.4 – физическая химия

Рубайло Анатолий Иосифович

31.05.2022 г.

660036, г. Красноярск, Академгородок, д. 50, стр. 24, тел. +7 9232770022, e-mail v.nasluzov@yandex.ru

Подпись Наслузова В.А. и Рубайло А.И. заверяю
Ученый секретарь ИХХТ СО РАН обособленного подразделения ФИЦ КНЦ СО РАН



Ю.Н. Зайцева