

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

В последние десятилетия резко возрос интерес к органическим соединениям селена и теллура. Это явилось следствием расширения сферы применения селено- и теллуросодержащих соединений в медицине, электронике и других областях хозяйственной деятельности. По этой причине возрастает потребность в установлении структуры селено- и теллуросодержащих соединений по спектрам ЯМР. Эти спектры зачастую сложны, и для их прецизионного анализа требуется проведение высококачественных квантово-химических расчетов спектральных параметров, а именно, химических сдвигов и констант спин-спинового взаимодействия (КССВ). Из сказанного следует, что диссертационная работа Русакова Ю.Ю. *актуальна*.

К *научной новизне* работы следует отнести разработку методологии качественного расчета ядерных КССВ селено- и теллуросодержащих соединений методами квантовой химии. Следует отметить, что расчет КССВ является крайне сложной задачей. Более того, поскольку в представленной работе речь идет о константах, вовлекающих такие «тяжелые» ядра, как селен и теллур, то их расчет должен учитывать релятивистские эффекты, а это – особая, еще мало изученная задача, требующая выработки специальных подходов и инструментов. Можно утверждать, что разработка универсальных методологий квантово-химического расчета КССВ с участием ядер селена и теллура является вызовом даже для современной квантовой химии. Действительно, до появления публикаций Русакова Ю.Ю. по этой проблеме в мировой литературе практически отсутствовали работы, представляющие сколько-нибудь адекватные квантово-химические расчеты обсуждаемых констант, в особенности теллурных.

В диссертационной работе на модельных соединениях были выявлены теоретические закономерности геминальных и вицинальных КССВ Se-H. Далее они были успешно применены к решению практических задач, связанных с отнесением сигналов протонов в ряду пиразольных производных 1,3-диселенана, родственном им 1,2-диселенолане, рядах 2-замещенных селенофенов, селеносодержащих

гликозидов, фенилселанилалкенов, селеносодержащих четырех-, пяти- и шестичленных гетероциклов, Z-2-(винилсульфанил)этинилселанилсульфидов. Это демонстрирует применимость разработанной вычислительной методологии для практической интерпретации спектров ЯМР указанных соединений и свидетельствует о несомненной *практической значимости* работы.

В работе впервые проведены высокоточные расчеты геминальных и вицинальных КССВ $J(T,H)$ с учетом релятивистских, колебательных и сольватационных поправок, при этом обнаружена их ярко выраженная стереоспецифичность. Установлено, что высокоточный расчет прямых КССВ $J(T,C)$ требует обязательного учета релятивистских эффектов, составляющих около половины результирующих значений.

Еще одним важным результатом диссертационной работы Русакова Ю.Ю. является создание новых специализированных J -ориентированных базисных наборов для атомов селена и теллура. Так, новые J -ориентированные базисные наборы $ascXz-J$ ($X = 2, 3, 4$), несомненно, открывают перспективы прецизионного моделирования спектров ЯМР селен- и теллуторганических соединений в целом.

Автореферат содержит большое количество фактических данных, которые четко систематизированы, в том числе в виде таблиц; иллюстрирован большим количеством схем, рисунков, графиков; написан добротным научным языком.

Достоверность полученных в диссертации результатов и обоснованность выносимых на защиту научных положений и выводов обеспечены использованием комплекса современных методов квантово-химических расчетов высокого уровня. Полученные диссертантом результаты и их интерпретация прошли широкую *апробацию* в виде выступлений на научных конференциях различного уровня. По результатам диссертационной работы опубликовано 18 научных статей и 4 обзора в ведущих научных журналах 1-го и 2-го квартиля.

Таким образом, судя по автореферату, диссертационная работа Русакова Юрия Юрьевича на тему «Квантово-химическое изучение констант спин-спинового взаимодействия с участием ядер селена и теллура» представляет собой самостоятельную, логически выстроенную, выполненную на высоком профессиональном уровне, обладающую научной новизной, законченную научно-квалификационную работу. Ее цели достигнуты, поставленные задачи решены,

выводы обоснованы, а результаты имеют несомненное теоретическое и практическое значение.

Замечаний по существу работы нет. Имеются мелкие недочеты оформления: редкие пунктуационные ошибки, во фразе «... и родственном им 1,2-диселенолане» (с. 43, п. 3 «Выводов») неправильные падежные окончания. В русскоязычной номенклатуре названия соединений типа «диметилселенид» принято писать слитно.

Из всего сказанного заключаю, что, судя по автореферату, по новизне и актуальности, научно-методическому уровню, теоретической и практической значимости полученных результатов диссертация на тему «Квантово-химическое изучение констант спин-спинового взаимодействия с участием ядер селена и теллура» полностью *удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям* в «Положении о порядке присуждения ученых степеней», утвержденном постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., пункты 9-14 (в действующей редакции), а именно: ее можно квалифицировать как *крупное научное достижение*, которое позволяет успешно решать структурные задачи химии селен- и теллуторганических соединений методами ЯМР и квантовой химии. Ее автор Русаков Юрий Юрьевич безусловно *заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук* по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Заведующий кафедрой химической технологии
органических красителей и фототропных соединений
Санкт-Петербургского государственного технологического института
(технического университета)
доктор химических наук (1.4.3 – органическая химия), профессор,
почетный работник сферы образования Российской Федерации
Рамш Станислав Михайлович



23 мая 2022 г.

Подпись *Рамша Станислав Михайлович*
Михайлович
Начальник отдела кадров *В. Ширяев*



3

Персональные данные:

ФИО: Рамш Станислав Михайлович

Почтовый адрес: 190013, Санкт-Петербург, Московский пр., 26

Телефон: +7 (911) 724-26-42

e-mail: sramsh@technolog.edu.ru

Наименование организации (полное / сокращенное):

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет) / СПбГТИ(ТУ)

Согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Рамш Станислав Михайлович



23 мая 2022 г.

Подпись *Рамша Станислав Михайлович*
Михайлович
Начальник отдела кадров

И

В. Мирясов И.В.

