

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 химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия

Сфера применения фторорганических соединений непрерывно расширяется. При этом наряду с техническими материалами (полимеры, устойчивые к температурам и агрессивным средам, инертные растворители и др.) широко исследуется и уже применяется различные биологические активные вещества, содержащие фторуглеродные фрагменты (фармацевтические и ветеринарные препараты, химические средства защиты растений, препараты для биохимических исследований). Определяющим фактором применения фторорганических соединений особенно в последних из указанных направлений является точное представление о структуре соединений.

Исследование структуры фторорганических соединений в основном базируется на применении метода ЯМР ^{19}F . Исследователями накоплена большая база данных по спектроскопии ЯМР на ядрах фтора. И, тем не менее, актуальность исследования Уханева С.А. можно представить цитатой из пособия по спектроскопии органических соединений [Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл Спектрометрическая идентификация органических соединений. М.: БИНОМ Лаборатория знаний. 2011. С. 369], широко используемой химиками: *«Химические сдвиги на ядрах фтора довольно трудно предсказывать... Одна из причин заключается в том, что для ядер фтора существенный вклад в экранирование вносит не только диамагнитная составляющая (связанная с общей электронной плотностью около данного атома фтора), но и парамагнитное экранирование, вызванное поляризацией электронного окружения»*. Еще сложнее задача, касающаяся констант спин-спинового взаимодействия. Рассматриваемый автором диссертации квантово-химический подход во много решает указанные проблемы.

В ходе проведения систематических квантово-химических исследований широкого набора фторсодержащих соединений разнообразного строения с использованием подходов высокого уровня Уханевым С.А. получены важные научные результаты для фторорганической химии. Эти результаты вносят существенный вклад и в развитие физической химии, особенно в разделах, касающихся строения молекул и спектроскопии. Важно подчеркнуть, что при исследованиях автор постоянно ориентируется на баланс ресурсоемкости и точности проводимых расчетов.

Особо следует отметить проведенный Уханевым С.А. анализ вклада релятивистских эффектов соседних тяжелых атомов в химические сдвиги ^{19}F . Это новое, практически революционное направление в квантовой химии, когда роль релятивистских эффектов рассматривают не на самом тяжелом атоме, а учитывают его влияние на соседний.

Материал диссертации хорошо представлен в научных публикациях и апробирован на конференциях высокого уровня. Знакомство с авторефератом не

дает поводов для принципиальной критики работы, однако в ходе знакомства с материалом возникли некоторые вопросы, например: На рис. 12 (стр. 12) представлены абсолютные отклонения расчетов химических сдвигов ^{19}F ряда ненасыщенных конформеров, при этом наибольшие отклонения наблюдались для соединений 84, 85, содержащих тиенильный заместитель. Может ли автор как-то интерпретировать эти результаты?

Естественно, этот вопрос не снижает ценности полученных научных результатов. Считаю, что в научно-квалификационной работе Уханева С.А. решена важная теоретическая задача в области физической химии, касающаяся квантово-химических расчетов параметров спектров ЯМР ^{19}F .

Диссертационная работа «Квантово-химические расчеты спектральных параметров ЯМР ^{19}F фторсодержащих соединений различных классов» соответствует требованиям, установленным в п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в редакции 2023 г.), а ее автор, Уханев Степан Александрович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия.

Профессор кафедры «Техносферная безопасность» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Иркутский государственный университет путей сообщения» (664074, г. Иркутск, ул. Чернышевского, д. 15.), телефон +7(908)663-97-59, электронная почта: rusnatali64@yandex.ru, сайт организации <https://www.irgups.ru/>), доктор химических наук по специальности 02.00.08 - химия элементоорганических соединений, доцент.

Руссавская Наталья Владимировна


(подпись)

13.04.2026 года

Подпись Н.В. Руссавской удостоверяю:

