

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы
Юсуповой Альфии Равиленны
«Внутримолекулярные превращения ароматических нитрозооксидов»,
представленной на соискание учёной степени
кандидата химических наук
по специальности 02.00.04 – физическая химия

Изучение высокорекционных интермедиатов химических реакций всегда сопряжено с огромными экспериментальными затруднениями. В этой области знания ведущую роль играет физико-математическое моделирование. Работа Юсуповой Альфии Равиленны посвящена теоретическому изучению термодинамических и кинетических свойств ароматических нитрозооксидов, что отражено в обширном перечне задач. В диссертации затрагиваются вопросы конформационных превращений, механизмов реакций, барьеров и скоростей реакций, что делает её современной и актуальной.

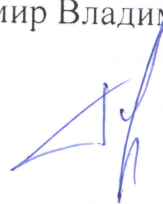
Альфия Равиленна рассмотрела применимость некоторых квантовохимических методов к оценке структурных, электронных и термодинамических свойств выбранных соединений. На основании полученных оценок она изучила действие заместителей в замещённых ароматических нитрозооксидах и стабилизирующие внутримолекулярные невалентные взаимодействия, выполнила моделирование состояний и спрогнозировала пути превращения молекул. Это позволило провести массовые расчёты констант скоростей, энтальпий активации и тепловых эффектов реакций.

Никаких существенных замечаний к работе нет, есть пять небольших придинок к оформлению автореферата, а именно: в работе проведён анализ распределения электронной плотности молекул, но в автореферате это не представлено; судя по Таблице 2, не имеет смысла приводить энтальпии с точностью до десятых кДж/моль; внутримолекулярные невалентные взаимодействия удобнее описывать в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» (в моделях DFT нет пи-систем и пи-орбиталей, это терминология метода валентных связей); не сказано, как были найдены свободные энергии Гиббса для соединений с несколькими движениями большой амплитуды; не описан термин «индукционный эффект», хотя в 4 выводе он указан.

Совокупность научно-практических результатов, а также обоснованность выводов, представленных в автореферате диссертации «Внутримолекулярные превращения ароматических нитрозооксидов»,

удовлетворяет всем требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, и соответствует критериям, изложенным в пп. 9 – 14 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г № 842. Работа выполнена на высоком научном уровне и, на основании вышеизложенного, её автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Заведующий кафедрой физики, математики и медицинской информатики
Тверского государственного медицинского университета доктор физико-математических наук
(специальности 02.00.04 – физическая химия), доцент по кафедре медицинской и биологической физики и информатики
Туровцев Владимир Владимирович
раб. тел. (4822) 32 11 70
e-mail: turtsma@tversu.ru


10.06.2020

170100, г. Тверь, ул. Советская, 4, ФГБОУ ВО «Тверской государственный медицинский университет», тел. (4822) 32-17-79
Официальный сайт: <https://tvgmu.ru/>
e-mail: info@tvgmu.ru

Я, Туровцев Владимир Владимирович, полностью согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета Д 002.198.02, и их дальнейшую обработку

Подпись Туровцева В В
Зам. нац. управления кадров
Е.Е. Лучникова
Удостоверяю

