

## ОТЗЫВ

на автореферат кандидатской диссертации

Бикмухаметова Камиля Шамиловича

"Молекулярная и кристаллическая структура производных 1,2,4,5,7-тетраоксазоканов и тетраоксаспирододекан диаминов",

представленной на соискание учёной степени

кандидата химических наук

по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Диссертационная работа Бикмухаметова К.Ш. представляет собой изучение строения перспективных циклических азотсодержащих пероксидов. Структурноподобные соединения относятся к возможным биологически активным веществам, что делает её очень актуальной.

Диссертантом проделана большая работа по экспериментальному определению геометрических параметров молекул в конденсированной фазе, а также проведены квантово-химические расчёты одиночных молекул в вакууме. Были установлено строение тринадцати производных тетраоксазоканов и четырёх тетраоксаспирододекан диаминов. Хочется отметить применение при изучении электронного строения физически важной и теоретически обоснованной «квантовой теории атомов в молекулах» (QTAIM) Ричарда Бейдера.

Диссертация представляет собой большую законченную работу, результаты которой опубликованы в рецензируемых журналах, входящих в список ВАК и индексируемых ведущими базами данных, и доложены на российских конференциях.

В своём отзыве хочу отметить некоторую неполноту исследования:

Квантовохимическое изучение структур проведено с помощью метода B3LYP/6-31G(d,p). Выбор функционала не понятен, так как он не очень хорошо работает с кислород-азот содержащими соединениями (был ли он протестирован на подобных молекулах?).

Автор применяет для анализа электронных эффектов метод натуральных связевых орбиталей (NBO) и использует устаревшую терминологию метода валентных связей. Следует отметить, что функционал B3LYP (как и любой функционал DFT) выдаёт только Кон-Шемовские делокализованные орбитали (никаких сигма-, пи- и орбиталей неподелённых пар среди них нет).

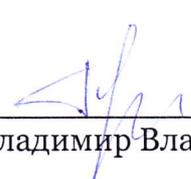
Собственные числа фокиана («орбитальные энергии») в методе натуральных орбиталей очень чувствительны к набору «метод/базис» и процедуре унитарного преобразования, поэтому лучше проводить анализ их относительных значений и представлять в ЭВ.

Не очень понятны как или с помощью чего были определены невалентные взаимодействия. Скорее всего, по сигнатуре точек на связевых путях, но в автореферате это не указано.

Указанные замечания не относятся к сути работы и не снижают её научной ценности.

Считаю, что кандидатская диссертация Бикмухаметова К.Ш. на тему "Молекулярная и кристаллическая структура производных 1,2,4,5,7-тетраоксазоканов и тетраоксаспирододекан диаминов" представляет законченное научное исследование, по своей актуальности, научной новизне, достоверности и практическому значению соответствует критериям, изложенным в пп. 9-14 Положения о присуждении учёных степеней, утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842 (в редакции 2017 г.), а ее автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 - Физическая химия.

Рецензент  
заведующий кафедрой физики,  
математики и медицинской информатики  
ФГБОУ ВО Тверского ГМУ Минздрава  
России,  
доктор физико-математических наук  
(1.4.4. Физическая химия),  
доцент  
email: turtsma@tversu.ru

  
Туровцев Владимир Владимирович

Подпись Туровцева В.В. заверяю

«11» мая 2022 г.



Туровцева В.В.  
Удостоверяю  
руководитель  
Управления кадров  
Е.Е. Лучникова

170100, г. Тверь, ул. Советская, д. 4, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный медицинский университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации, тел. +7 4822 321170  
email: [info@tvghmu.ru](mailto:info@tvghmu.ru), [info@tvghma.ru](mailto:info@tvghma.ru)