

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Ахметшиной Екатерины Степановны
«Развитие концепции полного набора гомодесмотических реакций для
анализа молекулярной энергетики органических веществ с невалентными
эффектами стерической и электронной природы», представленной на
соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности

1.4.4. – Физическая химия

Диссертационная работа Ахметшиной Екатерины Степановной посвящена применению концепции полного набора гомодесмотических реакций в связке с несколькими квантовохимическими приближениями (G3, G4, M06-2X/cc-pVTZ) для предсказания структуры и свойств циклических молекул и алкильных радикалов.

Практическая значимость и актуальность работы заключается в получении надежных энталпий образования циклических, алифатических, гетероциклических соединений и алкильных радикалов. Эти данные необходимы для: а) термодинамического моделирования химических процессов в газовой фазе с участием этих соединений; б) расширения реперной базы данных термохимии углеводородов. Разделение и количественная оценка невалентных эффектов в исследуемых и реперных соединениях представляет собой фундаментальный аспект данного исследования, необходимого для развития теоретической органической химии. Основные результаты работы отражены в публикациях в рецензируемых журналах, а также нашли широкую апробацию на конференциях всероссийского и международного уровней.

При прочтении автореферата Е.С. Ахметшиной появляются следующие вопросы и замечания:

1) Для оценки невалентных эффектов используется отклонение предсказанной энталпии реакции гомодесмотических реакций от термонейтральности. Насколько хорошо рассмотренные квантовохимические приближения (G3, G4, M06-2X/cc-pVTZ) согласуются между собой при расчете энталпий гомодесмотических реакций?

2) Насколько сильно могут влиять на предсказанные энталпии реакций и их производные (энталпии образования, невалентные эффекты) ошибка неполноты используемых базисных наборов и ошибка суперпозиции базисов?

3) Первым в автореферате упоминается Рисунок 3, а не Рисунок 1. Возможно, следовало бы изменить хронологическую подачу рисунков.

4) На стр. 6 автореферата опечатка: «M062X/cc-pvtz» должно читаться как «M06-2X/cc-pVTZ». Данные замечания никоим образом не снижают значимость полученных результатов и общее положительное впечатление о работе.

В целом, на основании автореферата можно заключить, что диссертационная работа Ахметшиной Е.С. соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, согласно п.п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г. (с последующими дополнениями), а Ахметшина Екатерина Степановна заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. - Физическая химия.

Миненков Юрий Валерьевич

кандидат химических наук (PhD), ведущий научный сотрудник, заведующий группой квантово-химических расчетов ФИЦ ХФ РАН

Телефон: +7 495 939-71-87

E-mail: Yury.Minenkov@chph.ras.ru

Согласен на обработку персональных данных

Миненков Юрий Валерьевич

Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН), 119991, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4, корпус 1, тел. +74991372951, сайт организации <https://www.chph.ras.ru/>, e-mail организации icp@chph.ras.ru

Подпись Миненкова Юрия Валерьевича заверяю:

Заместитель учёного секретаря ФИЦ ХФ РАН



Михалёва М.Г.