

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 Степановны 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 энтальпий 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 энтальпии реакции гомодесмотических реакций от термонеutralности. Насколько хорошо рассмотренные квантовохимические приближения (G3, G4, M06-2X/cc-pVTZ) согласуются между собой при расчете энтальпий гомодесмотических реакций?

2) Насколько сильно могут влиять на предсказанные энтальпии реакций и их производные (энтальпии 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.

