

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Ахметшиной Екатерины Степановны «Развитие концепции полного набора гомодесмотических реакций для анализа молекулярной энергетике органических веществ с невалентными эффектами стерической и электронной природы», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. - Физическая химия

Расчётные методы определения стандартных энтальпий образования  $\Delta_f H^0$  органических молекул находят всё более широкое применение в органической химии при изучении кинетики реакций, оценке реакционной способности органических соединений, а также прогнозировании возможности реализации тех или иных маршрутов химических превращений. Значительный прогресс в развитии термодинамических расчетов величин  $\Delta_f H^0$  достигнут с применением методов квантовой химии. Поскольку точные расчёты органических молекул невозможны, а повышение точности приближённых вычислений приводит к существенному возрастанию требований к ресурсоемкости вычислительных устройств, то важнейшими элементами расчётов становится разработка концепций ресурсосберегающих подходов. Одним из наиболее рациональных способов сокращения вычислений в последние годы стало использование концепции гомодесмотических реакций, явившейся дальнейшим развитием изодесмотических подходов. Поэтому диссертационная работа Ахметшиной Е.С. несомненно актуальна.

Диссертантом на высоком научно-методическом уровне выполнен значительный объём исследований по конструированию наборов гомодесмотических реакций и на их основе расчёта величин  $\Delta_f H^0$  и энергии напряжения цикла для большого числа алициклических и гетероциклических соединений, а также значений  $\Delta_f H^0$  для углеводородных радикалов. Использование высокоуровневых расчётов обусловлено давними традициями Уфимской квантово-химической научной школы профессора С.Л. Хурсана. Полученные диссертантом результаты имеют существенную научную новизну и несомненную практическую значимость. Выводы работы обоснованы и аргументированы.

По автореферату имеются замечания:

1. Автореферат написан в сложном для понимания химиками-органиками стиле. Ключевые термины часто не расшифрованы. Так термины «невалентные взаимодействия» и «невалентные эффекты» встречаются на протяжении всего текста автореферата. Из названия диссертации следует, что они могут быть стерической и электронной природы, а на стр.13 написано, что они включают напряжение цикла. Известно, что есть четыре типа напряжений в циклических соединениях: Байера, Питцера, Ван-дер-Ваальса и Прелога (Терней А. Современная органическая химия. – 1981). Из автореферата недостаточно ясно, какие типы напряжений учитывались? Что представляет собой *gauche*-эффект (стр.9)?

2. Диссертант пишет, что «Величины стандартных энтальпий образования циклических соединений в пределах экспериментальной и вычислительной погрешности совпадают с немногочисленными и надежными литературными значениями энтальпий образования» (стр.21). Однако, сопоставительных данных в автореферате нами не обнаружено. Как определялась надёжность литературных значений?

3. В автореферате отсутствуют сведения, показывающие преимущества выбранного подхода и методов по сравнению с альтернативными подходами и методами.

Замечания не являются принципиальными. 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.

Доктор химических наук  
по специальностям 1.4.3 Органическая химия (02.00.03)  
и 2.6.10. Технология органических веществ (05.17.04)  
профессор, профессор кафедры технологии пластмасс,  
органических веществ и нефтехимии института химических  
и нефтегазовых технологий Кузбасского государственного  
технического университета имени Т.Ф. Горбачёва  
Тел. + 7 913 438 85 66  
e-mail: perkel2@rambler.ru

Перкель  
Александр  
Львович

Согласен на обработку персональных данных  
Доктор химических наук  
по специальности 1.4.4 Физическая химия (02.00.04),  
профессор, профессор кафедры технологии пластмасс,  
органических веществ и нефтехимии института химических  
и нефтегазовых технологий Кузбасского государственного  
технического университета имени Т.Ф. Горбачёва  
Тел. + 7 913 126 63 67  
e-mail: vsctoos@mail.ru

Воронина  
Светлана  
Геннадьевна

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева» (КузГТУ), 650000, Кемеровская область - Кузбасс, г. Кемерово, ул. Весенняя, д.28, тел.: +7(3842)396960, сайт организации: [www.kuzstu.ru](http://www.kuzstu.ru), e-mail организации: [kuzstu@kuzstu.ru](mailto:kuzstu@kuzstu.ru)

подпись Перкель А.Л. Воронина С.Г.  
д.с.н. Воронина С.Г.  
ведущий специалист  
Отдела управления делами  
ИИТУ  
05.08.2024