

ОТЗЫВ

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

Определение термодинамических характеристик органических веществ является актуальной задачей современной физической химии и её решение позволяет решать вопросы прогнозирования свойств веществ и механизмов их реакций. Диссертационная работа Ахметшиной Екатерины Степановны посвящена развитию концепции полного набора гомодесмотических реакций, которая позволяет определять термодинамические характеристики с высокой точностью. В качестве тестового набора соединений представлены циклические углеводородные соединения и гетероциклы, а также алкильные радикалы. Для соединений рассчитаны значения стандартных энтальпий образования, энергий напряжения, а также энергии диссоциации связей с использованием квантовохимических расчётов. Точность рассчитанных величин подтверждается сравнением с литературными данными. В диссертации проанализирована взаимосвязь структуры и рассчитанных энергетических величин. Представленная концепция может быть применима к другим органическим соединениям. Основные результаты работы опубликованы в 7 статьях журналов перечня ВАК, три из которых – в международных изданиях.

В качестве замечания к автореферату отмечу:

1. Определение энергий напряжения циклических соединений производилось с использованием композитных методов G3, G4, а энтальпий образования свободных радикалов – в рамках M06-2X/cc-pVTZ. Чем обусловлен такой выбор функционала, базиса и методов?

2. Каким образом проводился выбор литературных данных термодинамических величин реперных соединений, в частности – энтальпий образования малых радикалов (стр. 16)?

3. На странице 21: «Массив известных величин $\Delta_f H^\circ$ алкильных радикалов увеличен более чем в 6 раз.». С каким из источников проведено сравнение и является ли он исчерпывающим?

Также присутствуют стилистические и орфографические ошибки.

Высказанные замечания не влияют на высокую оценку работы. Важность полученных результатов не вызывает сомнений и не ставит под сомнение обоснованность, достоверность, оригинальность и научную новизну основных положений, выносимых на защиту. На основании автореферата можно сделать вывод, что диссертационная работа Ахметшиной Е.С. соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, согласно п.п. 9-14 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого Постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г. (с последующими дополнениями), а Ахметшина Екатерина Степановна заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – Физическая химия.

Томилин Феликс Николаевич, кандидат химических наук (специальность 02.00.04 – физическая химия), Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук» (ФИЦ КНЦ СО РАН), Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, Старший научный сотрудник, Лаборатория физики магнитных явлений (Адрес: 660036 г. Красноярск, ул. Академгородок, 50, строение 38, тел.: + (3912) 43-26-35, e-mail: felixnt@gmail.com)

27 августа 2024 г.

