

Отзыв

об автореферате 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»

Диссертация Ахметшиной Екатерины Степановны посвящена развитию оригинальной концепции полного набора гомодесмотических реакций применительно к циклическим соединениям и алкильным радикалам.

Тема диссертационной работы, без сомнения представляет значительный фундаментальный интерес, так как объектами исследования выступают как циклические соединения, имеющие значительное стерическое напряжение, так и радикалы, где имеется взаимодействие неспаренного электрона с ближайшими заместителями.

В результате исследований автором подход полного набора гомодесмотических реакций был адаптирован не только для оценки стандартных энтальпий образования соединений, но также для энергий напряжения в циклах.

Предложенное автором развитие концепции полного набора гомодесмотических реакций показало результаты, которые находятся в хорошем согласии с экспериментальными величинами.

К наиболее научно-значимым и новым результатам следует отнести:

1. Оценку стандартных энтальпий образования и энергии стерического напряжения в циклах для 89 соединений.
2. Разработку методики разделения и оценки энергий невалентных взаимодействий в метил- и фторзамещенных циклопропанах.
3. Определение для большого набора алкильных радикалов различного строения значений стандартных энтальпий образования, и дальнейшую оценку энергии диссоциации связей C-H и C-CH₃ на их основе.

Результаты диссертации представлены в 7 статьях, опубликованных в рецензируемых российских и зарубежных журналах, рекомендованных ВАК, и прошли достаточную апробацию (11 докладов на международных и российских научных конференциях).

Вопросы и замечания к тексту автореферата:

Ни в тексте автореферата, ни в выводах, в частности, не приводятся комментарии касательно выбора расчетных методов. Автор использует три различных метода – G3, G4 и M06-2X/cc-pVTZ. Для оценки энтальпии

образования и энергии напряжения циклических соединений использовались методы G3 и G4. Анализ энергетики замещенных циклопропанов также выполнялся двумя методами G3 и G4, но в Таблице 1 и на Рисунке 3 представлены результаты только для метода G4. Оценка стандартных энтальпий образования свободных алкильных радикалов выполнялась третьим методом – M06-2X/cc-pVTZ. В итоге результатов расчета метода G3 не представлено в автореферате. Обосновано ли было его использование?

Указанные замечания не снижают научную и практическую значимость диссертации Ахметшиной Е.С. и не влияют на ее высокую оценку в целом. Диссертационная работа посвящена актуальным проблемам, выполнена на высоком научном уровне, и полностью 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 сам диссертант, Ахметшина Екатерина Степановна, заслуживает присвоения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – «Физическая химия».

кандидат химических наук (специальность - 02.00.04 - физическая химия),
доцент по кафедре химической термодинамики и кинетики института химии
Санкт-Петербургского государственного университета

Самаров Артемий Андреевич
06.08.2024

Самаров

ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет» 199034,
г. Санкт-Петербург, Университетская наб., д.7/9
Тел. (812)-4284052. e-mail: artemy.samarov@spbu.ru

Подпись доцента А.А. Самарова заверяю:

И.о. начальника
отдела кадров № 3
И.И. Константинова

Конст
06.08.2024

Текст документа размещен
в открытом доступе
на сайте СПбГУ по адресу
<http://spbu.ru/science/expert.html>

