

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ

ИНСТИТУТ ХИМИИ И ТЕХНОЛОГИИ
РЕДКИХ ЭЛЕМЕНТОВ И МИНЕРАЛЬНОГО
СЫРЬЯ

им. И.В. Тананаева

КОЛЬСКОГО НАУЧНОГО ЦЕНТРА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИХТРЭМС КНЦ РАН)

Академгородок, 26а, Апатиты, Мурманская обл.
Россия, 184209

Факс (815-55)6-16-58, тел (815-55) 79-5-49, 7-52-95

E-mail office@chemistry.kolasc.net.ru

ОКПО 04694169, ИНН 5101100177, ОГРН 1025100508597

26.05.2016 № 230-2174

На № _____ от _____

Ученому секретарю
диссертационного Совета
Д 212.190.06
к.ф-м.н. Пикулеву В.Б.

ФГБОУ ВО "Петрозаводский
государственный университет"

185910, г. Петрозаводск,
ул. Ленина, 33,
Петрозаводский
государственный университет

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Романова Владимира Владимировича
"МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ N-ОКСИДОВ И ПОИСК УСТОЙЧИВЫХ
ПОЛИМОРФОВ НА ОСНОВЕ КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ",
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния

Настоящая работа посвящена поиску конформеров 4-нитрохинолин-N-оксида и катиона бис(4-хлорхинолин-N-оксид)водорода; проверке возможности перегибридизации атома кислорода N-оксидной группы на примере ряда производных пиридина, хинолина, а также аддукта 4-хлорхинолин-N-оксида с йодом; определению энергетически выгодного положения лигандов относительно порфиринового цикла в аддукте Zn-тетрафенилпорфина с диоксаном. Генерация структур производилась с помощью разработанной автором утилиты, позволяющей варьировать конформационные параметры системы. Расчет энергий исследуемых систем осуществлялся квантовомеханическим методом на основе теории функционала плотности в программе ABINIT.

Актуальность работы не вызывает сомнения. В настоящее время сфера применения гетероароматических N-оксидов и их производных стремительно расширяется. В автореферате Романова В.В. перечислен целый ряд направлений использования соединений данной группы.

Этот ряд можно продолжать и далее, упомянув, к примеру, фармацевтическую и горно-обогатительную промышленность, но и того, что указано в работе, вполне достаточно, чтобы не сомневаться как в актуальности, так и в практической ценности представленных исследований. В то время как методы синтеза гетероароматических N-оксидов и их производных в настоящее время развиты достаточно хорошо, анализ уже синтезированных структур значительно отстает по времени и числу исследованных объектов. Работа Романова В. В. вносит свой вклад в решение этой задачи. Следует также отметить в данной связи, что разработанная автором утилита уже используется на практике, а именно, в учебном процессе.

Полученные Романовым В.В. результаты имеют вполне определенную научную ценность. В частности, теоретически предсказаны ранее неизвестные конформеры некоторых соединений N-оксидов, получены данные, касающиеся положения лигандов относительно порфиринового цикла в аддукте Zn-тетрафенилпорфина с диоксаном, а также произведена проверка гипотез о перегибридизации атома кислорода N-оксидной группы при изменении длины связи N-O и при повороте фрагмента молекулы вокруг связи N-O в молекулах производных пиридина, хинолина и в комплексе 4-хлорхинолин-N-оксида с йодом. Показано, что во всех указанных случаях перегибридизации атома кислорода не наблюдается. Эти результаты могут быть использованы в дальнейшем при интерпретации данных иного рода.

По автореферату диссертации можно высказать следующие замечания:

1. Второй абзац автореферата (стр. 3) начинается с фразы, содержащей выражения "атомы в целом" и "по отдельности". Поскольку атомы не могут состоять из атомов, то под атомами "в целом", очевидно, подразумевается исследуемая система в целом либо структурированный фрагмент системы.
2. На стр. 5 в разделе научно-практической значимости работы имеется упоминание молекулярных комплексов, содержащих до нескольких десятков атомов различных элементов и "*помещенных в модельный объем размером до нескольких десятков ангстрем*". В контексте данной работы последнее требование представляется излишним.
3. Для ориентировки читателя желательно было указать в тексте автореферата базисный набор, который был использован в расчетах.

Отмеченные замечания имеют редакционный характер и не снижают научную и практическую значимость результатов работы.

В целом работа производит хорошее впечатление, отличается систематическим подходом и хорошим методическим уровнем. Автореферат диссертации и опубликованные по ней материалы в полной мере отражают содержание работы.

Диссертация отвечает требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (в редакции постановления Правительства Российской Федерации от 24.09.13 № 842), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Романов В. В. заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Старший науч. сотр., к.х.н. (05.17.11)
лаборатория высокотемпературной
химии и электрохимии
Тел.: 8(815) 55-79129
E-mail: kreme_vg@chemistry.kolasc.net.ru

Кременецкий
Вячеслав
Георгиевич

