

ОТЗЫВ на автореферат диссертации

Зубановой Екатерины Михайловны

«Механизмы реакций комплексов меди с алкильными радикалами»

на соискание ученой степени кандидата химических наук

(специальность 02.00.04 – физическая химия)

Диссертационная работа Зубановой Е.М. посвящена очень важному с точки зрения современного развития науки исследованию – квантово-химическому изучению механизмов реакций комплексов меди с радикалами алкильного типа. Современное развитие квантово-химических методов, подходов в решении поставленной задачи диссертации, усовершенствование функционалов и базисных наборов в настоящее время позволяет грамотно интерпретировать результаты расчетов с возможностью предсказывать как состав продуктов реакции, так и управлять скоростью и направлением реакции.

Перед диссертантом была поставлена непростая задача – построение поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) для ряда реакций, протекающих с различными комплексами меди. Это достаточно не тривиальная работа, поскольку требует от исследователя хорошие знания в различных областях науки: в физике – чтобы выбрать правильную стратегию расчета, в химии – чтобы разобраться в малейших нюансах протекания химической реакции и обладать «химической» интуицией при поиске интермедиатов и переходных состояний на поверхности ППЭ. Зубановой Е.М. была проделана кропотливая работа по поиску особых (критических) точек на поверхности ППЭ – интермедиатов, переходных состояний, аддуктов и продуктов химических реакций моноядерных и биядерных хлоридных комплексов меди (II) с радикалами, ацетатных комплексов меди (II) с радикалами. Стоит отметить, что расчет ППЭ для этих реакций был впервые выполнен диссертантом, а также впервые было подтверждено существование медьорганических соединений, являющихся аддуктами комплексов меди (II), установлена полная схема фотохимических и фотофизических процессов с участием тетрахлоркупратов четвертичного аммония в среде слабополярных растворителей. Не маловажным является и тот факт, что эксперименты по стационарному и импульсному фотолизу были проведены лично диссертантом.

Результаты расчетов наглядно представлены в виде рисунков изучаемых комплексов, в виде срезов поверхности потенциальной энергии и таблиц. Полученные результаты систематизированы и по ним сделаны

выводы о механизме той или иной реакции. Подробно описана методика квантово-химических расчетов, однако не были указаны те программные пакеты, в которых были проведены вычисления.

Несмотря на незначительное замечание, полагаю, что данная работа является самостоятельным и полноценным научным трудом и отвечает всем требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней, принятого ВАК при Минобрнауки РФ, предъявляемых к работам на соискание степени кандидата химических наук и диссертант Зубанова Е.М. заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Старший научный сотрудник
лаборатории спиновой физики
и спиновой химии Казанского
физико-технического института
им. Е.К. Завойского Казанского
научного центра РАН,
к.ф.-м.н.

Савостина Л. И.

(Рабочий адрес: РФ, Республика Татарстан, 420029, г. Казань, ул. Сибирский тракт, д. 10/7,
рабочий телефон: (843)2927614,
e-mail: savostina.kfti@gmail.com,
дата: 31.03.2015)

