

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Тихонова Д.С.

«Исследование структуры и внутренней динамики свободных молекул с плоскими и сферическими ароматическими ядрами методом газовой электронографии», представляемой на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия

Ароматичность молекул представляет собой одну из важных концепций химической науки. В диссертационной работе Тихонова Д.С. исследовано строение шести молекул методами газовой электронографии и квантовой химии, и также использовались данные вращательной, ИК спектроскопии и спектра КР для структурного анализа. В рамках работы диссертантом написана программа LAMPA, разработана методика вычисления вкладов различных видов экспериментальных и теоретических данных в геометрические параметры, с также способ вычитания вклада регуляризации в погрешности определяемых параметров.

При ознакомлении с материалом автореферата диссертации возникли следующие вопросы и замечания:

1. На странице 13 написано, что молекула пиразинамида «оказалась достаточно жесткой». Однако, в автореферате не указана разница энергий двух возможных форм (с водородной связью и без неё), отличающихся поворотом амидной группы.
2. На странице 17 написано, что «Полученный $R_f = 3.1$ % говорит о том, что предположение о составе пара является верным, поэтому были исследованы пути установления таутомерного равновесия в газовой фазе». Однако, на странице 16 на Рис. 6 указан лишь состав пара гистамина при 393К в приближении MP2(fc)/def2-TZVP. Диссертант не указал состав из экспериментальных данных.
3. На странице 13 написано, что «...нитрогруппа достаточно слабо сопряжена с π -системой бензольного кольца», на странице 14 «...амидная группа сильно сопряжена с кольцом пиразина...». Химическая значимость работы была бы выше, если бы был сделан NBO-анализ такого наблюдения.
4. На странице 14 написано, что связь C1–N2, 1.348(3) Å, **существенно** длиннее связи C3–N2, 1.343(3) Å, при этом разница между этими связями составляет лишь 0.005Å, а суммарная погрешность 0.006Å.
5. На странице 14 (строка 6 снизу) написано, что связи C–N2 **увеличиваются**, возможно, из-за *водородной связи*. На странице 16 (строка 4 снизу) написано, что **укорочение** длины связи N1–C5 в конформере ¹G-IVa связано с образованием *водородной связи*. Кроме того, немаловажно сравнить длины экзоциклических связей C–N в конформерах ¹G-IVa и ³G-IVb?
6. На странице 18 указан механизм таутомеризации с образованием димера, но не указана структура димеров.

Указанные замечания ни в коей мере не снижают исключительно положительного впечатления от работы Д.С. Тихонова, которая является глубоким и серьезным научным исследованием.

Считаю, что диссертация Тихонова Д.С. является научно-квалификационной работой и соответствует критериям, установленным п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 в редакции от 21 апреля 2016 г.), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 - Физическая химия.

Доктор химических наук,
доцент,
заведующий кафедрой физической и
коллоидной химии
ФГБОУ ВО «Ивановский государственный
химико-технологический университет»


Шлыков Сергей Александрович

153000, г. Иваново, пр. Шереметевский, 7
Тел: +7 (4932) 35-98-74
Эл. почта: shlykov@isuct.ru

Подпись Шлыкова Сергея Александровича
удостоверяю
Ученый секретарь Ученого совета
ВО «Ивановский государственный
технологический университет»



Хомякова А.А.

153000, г. Иваново, пр. Шереметевский
Телефон: +7 (4923) 32-54-33
Email: Хомякова@mail.ru
Дата: 11 Мая 2017 года