

## О Т З Ы В

на автореферат диссертации Беднякова А.С. «Особенности перемещения протонов в кластерах воды: неэмпирическая модель», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Диссертационная работа Беднякова Александра Сергеевича посвящена квантово-химическому (КХ) анализу возможных молекулярных механизмов многопротонного переноса в нескольких модельных кластерах воды  $(\text{H}_2\text{O})_n$ ,  $n = 4-12$ .

Даже знакомство с этой работой только по автореферату позволяет, по нашему мнению, сделать несомненный вывод о получении в ней ряда интересных результатов. В наиболее краткой форме они связаны, в частности, с концертным характером протонного переноса вдоль найденной обобщенной масс-взвешанной координаты, с возможностью описания процесса переноса как реакции с образованием различных переходных, в том числе некоторых «заряженных» структур, с разумным описанием возможных переходов, инициированных лазерным излучением. Будучи выполненной на современном КХ уровне, полученные в работе результаты выглядят убедительными.

Хотя в работе Беднякова А.С. рассмотрены только водные кластеры, которые логично считать модельными фрагментами жидкости, полученные в ней некоторые выводы, по-видимому, имеют общий характер. К ним относятся, в частности, полученные закономерные изменения структурных параметров мостиковых Н-связей, наблюдаемая в кластерах деформация кислородного каркаса, отсутствие в них образования так называемых «бифуркатных» Н-связей и др. Поэтому представляется, что эта работа заинтересует не только тех, кто занимается структурными и другими свойствами водных систем (жидкофазных или твердотельных), но более широкую аудиторию, интересующуюся другими родственными Н-связанными системами.

Так, она оказалась полезной для нас, занимающихся возможностями применения КХ методов для описания структурных фазовых переходов в Н-связанных сегнетоэлектриках и родственных материалах (с т.н. сильными низкобарьерными Н-связями). В нашем подходе крайне важен, в частности, вопрос о выборе модельных кластеров для нахождения параметров псевдоспинового гамильтониана (изинговских параметров взаимодействия протонов, туннелирования и дальнего действия). Этот вопрос приобретает повышенное значение при попытке (которой мы занимаемся сейчас) создания упрощенного варианта

алгоритма расчета указанных параметров (с целью применения методов более высокого уровня), где основное внимание уделено моделированию водородной подрешетки.

Серьезных замечаний по существу работы (постановка задачи, уровень выполнения, результаты и их трактовка, выводы), которые бы повлияли на положительную оценку работы в целом, у нас нет (небольшое число редакторских неточностей можно не отмечать). Из знакомства с работой только по автореферату, у нас естественно остались вопросы. Так, по нашему мнению, естественен вопрос о причинах отсутствия в переходных структурах среди «заряженных» фрагментов цунделевского аниона  $\text{H}_3\text{O}_2^{\delta-}$ , хотя нужные «заготовки» для него есть. Интересен для нас и вопрос о том, насколько необязательной для изученных «водных» 12-частичных кластеров является наблюдаемая в стабильных твердотельных структурах «тетраэдризация» окружения атома кислорода, подчиняющаяся правилу льда (или же мы неправильно трактуем приведенные картинки, рис.2,3).. Диссертация Беднякова А.С. несомненно провоцирует продолжение работ в этом направлении.

В итоге, представленная работа полностью отвечает, по нашему мнению, тем требованиям, которые предъявляются к кандидатским диссертациям по специальности физическая химия (02.00.04), а ее автор, Бедняков А.С., заслуживает присуждения искомой степени.

Заведующий лабораторией квантовой химии  
ИОНХ РАН, кхн

(Долин С.П.)

Ведущий научный сотрудник лаборатории  
квантовой химии ИОХ РАН, дф-мн, проф.

(Яржемский В.Г.)

Подпись руки тов. *Валентина С.П. Яржемского*

УДОСТОВЕРЯЮ

Зав. канцелярией ИОНХ РАН



27.05.2017

Адрес: 119991, Москва, Ленинский просп., 31  
Телефон: (495) 952-07-87  
e-mail: vgyar@rambler.ru