

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации *Беднякова Александра Сергеевича «Особенности перемещения протонов в кластерах воды: неэмпирическая модель»*, представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия

Диссертация А. С. Беднякова посвящена квантово-химическому расчёту малых (до 12 молекул) кластеров воды, в том числе изучению согласованного переноса протонов в этих системах. Подобные кластеры являются модельными системами при изучении процесса переноса протонов в водных средах, в том числе в биологических системах. В связи с этим, актуальность представленной работы не вызывает сомнения. В работе выявлен ряд особенностей движения мостиковых протонов в малых кластерах воды. В частности, показано, что это движение является согласованным, то есть энергетически выгодным является одновременное перемещение всех мостиковых протонов. Обнаружен значительный ангармонизм колебаний мостиковых протонов. Задача о переносе протона в кластерах воды рассмотрена с позиций квантовой динамики.

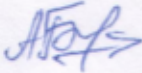
В связи с результатами, представленными в работе, возникает следующий вопрос. Имеются ли аналогии между процессом согласованного переноса протона в кластерах воды, рассмотренным в настоящей диссертации, и процессом переноса электрона в металлах или полупроводниках? Являются ли полученные автором результаты потенциально значимыми для теории электронной проводимости в этих системах, или, в свою очередь, могут ли результаты этой теории быть использованы при интерпретации результатов, полученных автором диссертационной работы?

Следует отметить, что представленная работа представляет собой цельное и завершённое исследование, а её автор проявляет себя как квалифицированный специалист в данной области. Автореферат написан строгим научным языком. Приведенные в автореферате выводы достоверны и адекватно отражают полученные результаты. По материалам диссертации опубликовано 3 статьи в рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК. Результаты работы неоднократно

докладывались на конференциях. Опубликованные статьи достаточно полно отражают отмеченные в автореферате выносимые на защиту положения.

Диссертационная работа Беднякова А. С. соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям (п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. №842, в редакции с изменениями, утвержденными Постановлением Правительства РФ от 21.04.2016 г. №335 «О внесении изменений в положение о присуждении ученых степеней»), а ее автор, Бедняков А. С., заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 — физическая химия.

научный сотрудник кафедры химической кинетики химического факультета ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», кандидат химических наук


Алексей Владимирович
Богданов

Федеральное государственное бюджетное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» (МГУ имени М.В. Ломоносова), Химический факультет.

Адрес: 119991, г. Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3.

Телефон: +7(495) 939-49-00

e-mail: avbgdn@gmail.com

29.05.2017

