

Отзыв научного консультанта

на диссертацию Валиева Рашида Ринатовича
«Ароматичность и ее связь с фотофизикой и электронной спектроскопией
макрогетероциклических соединений: порфириноиды и гетеро[8]циркулены»,
представленную на соискание ученой степени
доктора химических наук
по специальности 02.00.04 – Физическая химия

Диссертация Р. Р. Валиева посвящена разработке алгоритмов вычисления фотофизических свойств, ароматичности и магнитных свойств макрогетероциклических молекул, таких как порфириноиды и гетеро[8]циркулены. Тема диссертации является важной в области физической химии. Результаты диссертации опубликованы в том числе в журналах с высоким импакт-фактором (выше 2,0), а также имеют высокий индекс цитирования, что указывает на то, что они интересны мировому научному сообществу.

Используя оригинальную теоретическую технику вычисления магнитно индуцированных токов в молекулах, автор смог получить фундаментальные и практические знания о связи делокализации π -электроной плотности в молекулах с их спектроскопическими свойствами, такими как магнитно индуцированный момент, магнитно дипольные электронные переходы, а также с фотофизическими свойствами.

Другим существенным вкладом автора является разработка алгоритма расчета констант скоростей электронных переходов из первых принципов на основе методов квантовой химии. С использованием данного алгоритма автору удалось получить новые сведения о фотофизических свойствах молекул, которые используются в различных оптических приложениях (органическая электроника, биофотоника и т.д.). Стоит также отметить, что данный алгоритм позволяет учитывать в расчете электронно-колебательное взаимодействие в модели Герцберга–Теллера, что позволяет рассматривать широкий круг физико-химических свойств молекул.

Следует отметить, что диссертация Р. Р. Валиева содержит новые научные сведения, которые хорошо согласуются с современными представлениями в области физической химии. Диссертация содержит структурированный текст, который изложен логически и последовательно; отвечает всем требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям. Предложенный алгоритм защищен авторским свидетельством о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Р. Р. Валиев работает на кафедре оптики и спектроскопии в должности доцента. Из числа личных качеств соискателя следует отметить его высокую работоспособность, настойчивость в достижении целей, умение работать в коллективе. За годы работы под его руководством были защищены несколько магистерских и бакалаврских дипломов. В настоящее время он руководит научной

работой как минимум троих студентов на кафедре оптики и спектроскопии. Научная работа со студентами отражается, как правило, в публикационной активности в ведущих рецензируемых журналах с высоким импакт-фактором.

Считаю, что Валиев Рашид Ринатович заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Научный консультант
заведующий кафедрой оптики и спектроскопии
федерального государственного автономного
образовательного учреждения высшего образования
«Национальный исследовательский
Томский государственный университет»
(634050, Томск, пр. Ленина, 36; (3822) 52-98-52;
www.tsu.ru; rector@tsu.ru),
доктор физико-математических наук
(01.04.05 – Оптика),
доцент

Черепанов Виктор Николаевич

08.11.2019

