

ОТЗЫВ

официального оппонента Томилина Олега Борисовича
на диссертационную работу Овсянникова Дмитрия Вадимовича
«МЕХАНИЗМ ФОТОХИМИЧЕСКОГО ПЕРЕНОСА АТОМА ВОДОРОДА В
СИСТЕМЕ «АМИН–НИТРОСОЕДИНЕНИЕ»»,
представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук
по специальности 02.00.04 – Физическая химия

Актуальность. Фотохимия нитросоединений — актуальная тема для современных исследований в области экологии и атмосферной химии. Для решения соответствующих задач необходимы сведения о механизмах и скоростях реакций с участием электронно-возбужденных молекул. Моделирование процессов с помощью методов квантовой химии является своевременным и разумным решением. Таким образом, диссертация Овсянникова Д. В. является актуальным исследованием, в котором впервые представлены данные о строении реакционных комплексов возбужденных нитросоединений с некоторыми аминами. Вычислены энергетические барьеры реакции переноса атома водорода от амина к нитросоединению. Примечательно, что эта реакция не реализуется в основном электронном состоянии. В возбужденном триплетном состоянии она протекает безактивационно. Диссертант сравнивает перенос атома водорода от аминогруппы и от метильной группы амина.

Рецензируемая диссертация состоит из введения, литературного обзора, экспериментальной части, обсуждения результатов, заключения, списка использованной литературы и 2 приложений. Диссертация изложена на 110 страницах, включает 13 таблицы и 33 рисунка. Список литературы содержит 142 ссылки.

Во введении автором обоснованы актуальность темы исследования, сформулированы цели и задачи работы, показана научная новизна и практическая значимость, обозначена достоверность результатов исследования, приведены положения, выносимые на защиту, личный вклад автора, данные об апробации результатов, информация о публикациях по теме диссертации, указаны структура и объем диссертации.

Литературный обзор посвящен фотофизике и фотохимии нитросоединений, приведена классификация реакций нитросоединений в возбужденном состоянии. Приведены известные механизмы реакций с участием нитросоединений. В литературном обзоре приведены основы применяемых квантово-химических методов и их применение к разработке проблемы.

На основе анализа литературы цель диссертационной работы была сформулирована следующим образом: установить возможность осуществления радикального механизма в реакции фотохимического переноса атома водорода в системе «нитросоединение – амин». Для достижения этой цели автор решал следующие задачи:

