

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Овсянникова Дмитрия Вадимовича «Механизм фотохимического переноса атома водорода в системе «Амин-нитросоединение», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия

Исследования реакционной способности химических соединений – фундаментальная задача химии, которая будет актуальна всегда, пока люди занимаются химией. В диссертационной работе Овсянникова методами вычислительной квантовой химии исследуется реакционная способность триплетных нитросоединений по отношению к аминам. Фотовозбуждение – мощный инструмент повышения реакционной способности химического вещества, процессы дезактивации протекают быстро, экспериментальное изучение таких процессов затруднено, а иногда и невозможно. Поэтому теоретический подход, использованный автором, оправдан.

В работе Овсянникова получен ряд важных результатов. Показано, что триплетные нитросоединения реагируют с аминами, а также с их Р-, As-аналогами по механизму отрыва Н-атома. Определены квантово-химические методы, оптимальные для исследуемой системы, показано, что использование методов теории функционала плотности нецелесообразно ввиду значительных погрешностей расчета активационных параметров.

Автореферат написан аккуратно, логически выстроен, завершается выводами, соответствующими полученным результатам. Апробация работы вполне достаточна, результаты работы опубликованы в центральных научных изданиях.

При чтении автореферата у меня сформировался ряд замечаний.

1. Научная новизна, п. 5, стр. 6. Неудачная фраза «...методами, основывающимися на волновых функциях». Метод Кона-Шама, используемый автором в DFT расчетах, также использует волновую функцию молекулы, просто ее смысл несколько отличен от хартрифоковской волновой функции.

2. Таблица 2, стр. 13. По-видимому, значения спиновых плотностей ошибочны. Я не понимаю, как в триплетном состоянии суммарная спиновая плотность ( $\alpha-\beta$ ) может быть меньше двух, а у автора она существенно меньше единицы!

3. Стр. 14, конец первого абзаца. Цитирую: «Было сделано предположение о том, что она является водородной связью слабой силы». «Она» относится к межатомному контакту N...O – азота и кислорода! О какой водородной связи идет речь??

В целом Овсянников Д.В. выполнил диссертационную работу на современном теоретическом уровне. Проделана большая теоретическая работа, результаты хорошо осмыслены и обработаны, на этой основе сформулированы корректные выводы.

Оценивая квалификационную работу в целом, могу заключить, что диссертация Овсянникова Дмитрия Вадимовича соответствует требованиям ВАК (п. 9 Положения о присуждении ученых степеней), а автор диссертации заслуживает присвоения ему ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

**Хурсан Сергей Леонидович**, зам. директора УФИХ УФИЦ РАН, заведующий кафедрой химической физики УФИХ УФИЦ РАН, доктор химических наук (специальность 02.00.04 – Физическая химия), профессор (специальность 02.00.04 – Физическая химия), e-mail: [khursansl@anrb.ru](mailto:khursansl@anrb.ru), тел: +79174322426.

Уфимский институт химии – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимский Федеральный исследовательский центр (УФИХ УФИЦ РАН), 450054, г. Уфа, пр. Октября, 71, тел.: +73472355560, сайт организации: [www.chem.anrb.ru](http://www.chem.anrb.ru), e-mail организации: [chemorg@anrb.ru](mailto:chemorg@anrb.ru)

Я, Хурсан Сергей Леонидович, согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета Д 212.166.08, и их дальнейшую обработку.

Хурсан Сергей Леонидович

01.02.2021 г.

Подпись Хурсана С.Л. заверю:  
Ученый секретарь УФИХ УФИЦ РАН  
д.х.н., проф.

Гималова Ф.А.

