

Отзыв

научного руководителя о соискателе ученой степени кандидата химических наук
по специальности 02.00.03 – органическая химия
Семенове Валентине Александровиче

Семенов В.А. поступил в аспирантуру Иркутского института химии им. А.Е. Фаворского СО РАН в 2012 г. после окончания химического факультета Иркутского государственного университета. За время учебы зарекомендовал себя как высококвалифицированный специалист, способный решать сложные расчетные задачи.

Семеновым В.А. проанализированы факторы, влияющие на точность расчета химических сдвигов ЯМР ^{15}N , на основании чего была разработана методология квантово-химического расчета химических сдвигов ЯМР ^{15}N . На широком ряду азотсодержащих гетероциклов показана необходимость учета эффектов сольватации при расчете констант экранирования ^{15}N . Выявлена наиболее эффективная расчетная схема для оптимизации геометрических параметров азотсодержащих соединений и их протонированных форм. Посредством теоретического анализа *NBO* определены характеристичные орбитали, оказывающие наибольшее влияние на величину эффекта смещения значения химического сдвига ЯМР ^{15}N при протонировании атома азота.

Семенов В.А. уверенно работает с научной литературой. Им выполнена большая работа по сбору литературного материала, его критическому анализу и обобщению. Обработанный материал оформлен в виде литературного обзора в диссертации.

Семенов В.А. владеет современными компьютерными программными комплексами, осуществляющих квантово-химический расчет, хорошо разбирается в спектрах ЯМР, работает на компьютере со спектральными данными.

Семенова В.А. отличает большая тщательность в подготовке и проведении теоретических расчетов. К работе он относится добросовестно и ответственно. За время работы над диссертацией он приобрел богатый экспериментальный опыт и хорошую теоретическую подготовку. Все кандидатские экзамены сданы в срок.

Корреляция полученных результатов теоретического квантово-химического расчета была проведена с экспериментальными данными, полученными в ходе выполнения диссертации или доступных из литературных источников. Полученные Семеновым В.А. результаты достоверны, выводы объективны и научно обоснованы. Представленные в диссертации теоретические и экспериментальные исследования выполнены лично автором.

По материалам диссертации опубликовано 16 работ, в том числе 6 статей. Результаты представлены на конкурсе проектов молодых ученых ИрИХ СО РАН в рамках Чтений памяти академика А.Е. Фаворского (Иркутск, 2014, 2015).

Считаю, что Семенов В.А. является высококвалифицированным специалистом и заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук

Научный руководитель
доктор химических наук, профессор,
и.о. директора
ФГБУН Иркутского института химии
им. А.Е. Фаворского СО РАН

17.02.2016



Кривдин Л.Б.