

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Семенова Валентина Александровича «Квантово-химические расчеты химических сдвигов ЯМР ^{15}N в структурных исследованиях азотсодержащих гетероциклов», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.03 – органическая химия

В последние годы органиками-синтетиками все шире используется огромный потенциал квантово-химических методов расчета для понимания реакционной способности и установления структур сложных органических соединений. В ряду этих методов важное место занимают расчеты химических сдвигов ЯМР ^{15}N , точность значения которых позволяют изучать таутомерные превращения, определять сольватационные, конформационные и стереоэлектронные эффекты и т.д. Поэтому поиск новых и точных методов таких расчетов будет способствовать решению многих структурных задач по доказательству строения органических соединений и является **актуальной** задачей.

Автор четко сформулировал **цель работы** – поиск новых эффективных методик высокоточного квантово-химического расчета химических сдвигов ЯМР ^{15}N в целях их использования в структурных исследованиях азотсодержащих гетероциклов.

Для решения поставленных задач Семенов В.А. изучил и оптимизировал множество факторов, влияющих на точность таких расчетов, среди которых: сочетание функционала DFT и базисного набора; стандарт, от которого вычисляется величина химического сдвига; а также учет влияния растворителя в рамках модели РСМ и супермолекулы. В рамках этой работы им также успешно опробован подход локально плотных базисных наборов, позволяющий значительно сократить время, необходимое для проведения таких расчетов.

Важно отметить, что отработанная в ходе выполнения диссертационной работы методики позволяет рассчитывать химические сдвиги ЯМР ^{15}N азотсодержащих гетероциклов с высокой точностью, что существенно облегчает как определение структур целевых соединений, так и процессов, сопровождающих превращения этих соединений..

Так, в рамках этой диссертации показана возможность её практического применения этих методов на примере енамино-иминной таутомерии пуш-пульных и капто-датовных енаминов. Наряду с этим дана и теоретическая интерпретация ЯМР-эффектов протонирования атома азота на языке анализа атомных орбиталей NBO.

Все это дает основание считать, что материалы диссертации имеют высокую степень **научной новизны и практической ценности**.

Имеется следующий вопрос: почему не были реализованы расчеты на неэмпирическом уровне, например МР2?

Считаю, что диссертационная работа «Квантово-химические расчеты химических сдвигов ЯМР ^{15}N в структурных исследованиях азотсодержащих гетероциклов» в целом по своей актуальности, объему, уровню, научной и практической значимости соответствует требованиям п. 9 «Положения о присуждении степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013г. № 842, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а Семенов В.А., несомненно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.03 – органическая химия.

Василевский Сергей Францевич,
доктор химических наук, профессор,
г.н.с., руководитель Группы Спин-меченых
и ацетиленовых соединений Федерального
государственного бюджетного учреждения
науки Институт химической кинетики и
горения им. В.В. Воеводского Сибирского
отделения Российской академии наук.



Адрес: Новосибирск 630090,
ул. Институтская 3, ИХКГ СО РАН.
Тел 8(383) 333 33 47, vasilev@kinetics.nsc.ru

Подпись Василевского С.Ф. удостоверяю

Ученый Секретарь ИХКГ СО РАН,

д.ф.-м.н. Какуткина Н.А.

15.04.16

