

Отзыв

на автореферат диссертационной работы

Кондрашевой Светланы Андреевны

«DFT-расчеты химических сдвигов ЯМР атомов ^{13}C и ^{31}P , непосредственно связанных с Ni: структура и динамика комплексов никеля на основе 1-алкил-1,2-дифосфолов»,

представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – физическая химия.

Актуальность и практическая значимость работы обусловлена прежде всего объектами проведенного исследования - 1-алкил-1,2-дифосфолатами – перспективными исходными к созданию гомогенных катализаторов на основе никеля. Они здесь не вызывают сомнений. Целью работы явилось применение квантово-механических методов расчета химических сдвигов ядер ^{13}C , ^{31}P 1-алкил-1,2-дифосфольных комплексов никеля для описания структуры и динамических свойств в растворе. Показана принципиальная возможность проведения таких расчетов с хорошей точностью, исследованы динамические равновесия в растворах, разработаны эффективные протоколы проведения исследований, исследованы границы применимости предложенного подхода. В ходе проведения работы использованы разнообразные современные одномерные и двумерные методы ЯМР спектроскопии, в том числе, например, были получены спектры на ядрах ^{13}C с синхронной биядерной развязкой ядер ^1H и ^{31}P , спектры в широком диапазоне температур, что иллюстрирует общий высокий технический и экспериментальный уровень работы и обуславливает достоверность полученных данных.

В целом автореферат написан в хорошем содержательном стиле, наглядно демонстрирует основные направления проведенной работы, полученные результаты. Выводы, содержащиеся в автореферате, в полной мере отражают полученные результаты и являются успешным решением поставленных в работе задач. Автореферат содержит рекомендации и дальнейшие перспективы по развитию темы для комплексов других металлов, что также подчеркивает практическую значимость работы. К неоспоримым преимуществам работы Кондрашевой С.А. следует отнести наличие в ней не только теоретического расчетного раздела, но и объемной экспериментальной части по исследованию методами ЯМР спектроскопии динамических свойств в растворах алкил-1,2-дифосфольных комплексов никеля, что придает целостность работе и научную новизну. Следует отметить некоторые несущественные недочеты автореферата: недостаточно полно отражен анализ ситуаций, когда применение используемых расчетов

не дает необходимых ожидаемых результатов – не выделены четкие критерии применимости тех или иных расчетных методов; в тексте автореферата присутствует некоторое количество орфографических и лексических ошибок, что затрудняет понимание материала. Указанные недостатки не являются принципиальными и ни коем образом не влияют на общий уровень работы и полученных в ней результатов.

Результаты работы полностью отражены в виде публикаций, среди которых 4 статьи в рецензируемых российских и международных научных изданиях, рекомендованных ВАК и 3 тезиса докладов.

Считаю, что диссертационная работа на тему **«DFT-расчеты химических сдвигов ЯМР атомов ^{13}C и ^{31}P , непосредственно связанных с Ni: структура и динамика комплексов никеля на основе 1-алкил-1,2-дифосфолов»** по научной новизне, практической значимости, поставленным задачам, уровню их решения и актуальности, а также достоверности результатов и обоснованности выводов, удовлетворяет требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней (утверждено Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842, в действующей редакции), а ее автор Кондрашова Светлана Андреевна безусловно заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – физическая химия.

25.11.2024

Д.х.н., специальность:

1.4.4. – Физическая химия

заведующий лабораторией ЯМР, ведущий научный сотрудник

ФГБУН Институт Элементоорганических Соединений им. А.Н. Несмеянова РАН (ИНЭОС РАН)

Годовиков И.А.

Подпись д.х.н., в.н.с., заведующего лабораторией ЯМР ФГБУН ИНЭОС РАН

Годовикова И.А. заверяю:

Ученый секретарь ФГБУН ИНЭОС РАН

Гулакова Е.Н.

Почтовый адрес:

119443, Российская Федерация,

г. Москва, ул. Вавилова д. 28 стр. 1,

тел: +74991355085,

e-mail: larina@ineos.ac.ru