

Отзыв

на автореферат диссертации Кондрашовой Светланы Андреевны 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», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4-«Физическая химия»

Диссертация Кондрашовой С.А. посвящена проблеме применения и изучению возможности квантово-химического метода DFT при определении химических сдвигов (ХС) атомов ЯМР в комплексах никеля на основе 1-алкил-1,2-дифосфолов в растворе, также для анализа структуры и динамики новых комплексов. Учитывая актуальность применения метода ЯМР в различных областях науки и техники, выявленная научная новизна и практическая значимость работы не вызывают сомнений.

Судя по автореферату, диссертационная работа выполнена на высоком экспериментальном и научно-методическом уровне. Сформулированные в работе методики найдут применение при решении аналогичных задач с другими классами практически важных веществ. Преимуществом представленного метода является то, что его можно быстро и с хорошей точностью применять для изучения новых комплексов с переходными металлами Ni, Pd, Pt и т.д.

Интересно было ознакомиться с результатом, который был обнаружен при изучении доминирующих взаимодействий в комплексах типа η^1 , η^1 и π , которые автор определяет для тетрагональной геометрии степени окисления Ni(0), а также для плоско-квадратного изомера Ni(II). Поэтому можно отметить, что автору удалось не только однозначно идентифицировать все ключевые моменты, но и провести теоретически-экспериментальные исследования в различных условиях. В результате чего были определены зависимости ХС комплексов в различных электронных плотностях.

Интересно было также ознакомиться, что наряду с квантово-химическим методом DFT, особое место в изучении новых комплексов никеля с 1-алкил-1,2-дифосфолами в растворе заняла прикладная корреляционная спектроскопия и ДЯМР на приборах в разных частотах 600, 500, 400 МГц.

Результаты работы опубликованы в интернациональной печати. Сделанные в ней выводы обоснованы теоретически и экспериментально и не вызывают сомнения.

Материалы диссертации могут быть использованы при чтении лекций по курсам “Физическая химия”, “Металлоорганическая химия”, “Конформационный анализ”, “Теоретические основы органической химии”, читаемых в университетах и ВУЗах.

В заключение следует отметить, что диссертационная работа Кондрашовой С.А. представляет собой законченное исследование. В ней демонстрируются основные принципы применения квантово-химического метода DFT и ЯМР-спектроскопии в металлоорганических комплексах.

Автореферат дает ясное представление о проделанной работе, выводы соответствуют полученным результатам и отвечают всем требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

На основании вышеизложенного считаю, что представленная работа удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Кондрашова С.А., заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата химических наук по специальностям 1.4.4- «Физическая химия».

**Заведующий кафедрой «Химии нефти и
химической технологии» Бакинского
Государственного Университета**

профессор Ибрагим Мамедов

