

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

на соискателя ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4-Физическая химия Кондрашову Светлану Андреевну, представившую диссертацию 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".

Кондрашова Светлана Андреевна начала свою научно-исследовательскую работу в лаборатории радиоспектроскопии в 2014 г. будучи студенткой третьего курса Института физики К(П)ФУ. За этот период она успешно защитила курсовую, бакалаврскую и магистерскую работы. Окончила магистратуру по направлению «Радиофизика» (профиль - «Физика магнитных явлений»). После окончания университета в 2018 году она поступила в очную аспирантуру ИОФХ им. А.Е. Арбузова - ОСП ФИЦ КазНЦ РАН. С 2022 года продолжила свою деятельность в лаборатории радиоспектроскопии в должности младшего научного сотрудника.

Тема ее диссертации "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". Данное исследование является органическим продолжением работ нашей лаборатории, направленных на развитие методов исследования структуры и динамики сложных молекулярных систем в растворах. Ранее нам удалось показать, что комплексное использование ЯМР экспериментов и квантово-химических расчетов ЯМР параметров является эффективным инструментом в анализе тонких деталей структуры органических соединений, таких как конформационная, изомерная и таутомерная структура.

В связи с тем, что в Институте широко представлена металлоорганическая химия, то существовала насущная потребность в исследовании таких систем. Однако, при переходе к металлокомплексам возможность использования квантово-химических расчетов для оценки ЯМР параметров, особенно для ядер, непосредственно связанных с металлом, оставалась под вопросом. В литературе имелись лишь единичные примеры на очень ограниченном типе малых комплексов и в большинстве случаев с использованием расчетных приближений на очень высоком уровне теории, которые трудно или невозможно применить для относительно больших систем практического интереса.

Кондрашовой С.А. удалось провести систематический анализ возможностей и ограничений доступных расчетных методов для оценки ЯМР ХС атомов ^{13}C и ^{31}P в диамагнитных комплекса никеля и оптимизировать расчетные протоколы, для оценки этих параметров с хорошей точностью. Далее полученные методические приемы и решения ею были успешно использованы для анализа структуры и динамики новых перспективных комплексов никеля на основе 1-алкил-1,2-дифосфолов в растворе.

За время работы в лаборатории Кондрашовой С.А. был освоен ряд современных методов ЯМР спектроскопии, а так же методы квантово химических расчетов. Она самостоятельно проводит эксперименты и расчеты, умеет работать с литературой. Кондрашова С.А. принимала участие в подготовке к публикации ряда статей, выступала с докладами на ряде конференций, в том числе с устными докладами, касающимися темы ее диссертации: на Итоговой конференции Института, Молодежной конференции ИОХ РАН, Всероссийской школе-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых

«Материалы и технологии XXI века», Научной конференции «Динамические процессы в химии элементоорганических соединений».

Полученный в ходе проведения данной работы опыт и методические решения могут быть полезны при разработке аналогичных подходов в случае комплексов других металлов никелевой группы. Выявленные тонкие детали электронной структуры комплексов Ni с 1-алкил-1,2-дифосфолами могут быть полезны для рационального дизайна катализаторов на их основе. Установленные для них спектра-структурные корреляции могут быть использованы при анализе аналогичных систем.

По результатам диссертационной работы Кондрашовой С.А. в соавторстве были опубликованы 4 статьи в журналах, входящих в перечень, рекомендуемый ВАК. Кроме того, Кондрашова С.А. также принимала участие в ряде совместных работ с лабораториями Института, по результатам которых является соавтором еще 13 статей.

Кондрашова С.А. являлась исполнителем гранта 18-43-160003 "Квантово-химические расчеты ЯМР параметров в комплексах металлов никелевой группы – надежный инструмент в структурном анализе комплексов". В настоящее время она является исполнителем гранта РФФИ 24-23-00288 "ЯМР вокруг платины. Разработка эффективного инструмента для оценки химических сдвигов ЯМР $^{13}\text{C}/^{31}\text{P}/^{195}\text{Pt}$ в диамагнитных комплексах платины".

Объем проделанной экспериментальной и теоретической работы большой, и демонстрирует квалификацию Кондрашовой С.А. как специалиста в области физической химии. Считаю, что Кондрашова С.А. по своей квалификации заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4-Физическая химия.

Научный руководитель,

доктор химических наук

(02.00.03 – Органическая химия,

02.00.04 - Физическая химия),

главный научный сотрудник лаборатории

радиоспектроскопии

ИОФХ им. А.Е. Арбузова - ОСП ФИЦ КазНЦ РАН,

420088, г. Казань, ул. Академика Арбузова, дом 8,

e-mail: lsk@iopc.ru тел.: (843) 273-18-92

/Латыпов Шамиль Камильевич/