

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Макаровой Марии Валентиновны «КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ АСПЕКТОВ ТАУТОМЕРИИ ГИДРОКСИ- И КАРБОНИЛСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия

Диссертационная работа М.В.Макаровой посвящена исследованию расчетными методами теории функционала электронной плотности геометрической структуры и энергетических характеристик органических таутомерных систем и направлена на решение актуальной проблемы физической химии - установление механизмов эволюции и стабилизации таутомерных форм органических соединений в различных средах.

Учитывая, что совокупность возможных таутомерных процессов представляет собой сложное для экспериментального исследования явление, которое зависит от множества физико-химических свойств объектов и среды, то выбор современных расчетных методов на базе теории функционала плотности представляется одним из достоинств работы. Автором впервые реализован комплексный подход к выбору объектов квантово-химического исследования. Действительно, в работе представлены результаты исследования широкого ряда объектов от таутомерных ароматических и хиноидных форм ванилина и антрахинона, цвиттер-ионных таутомеров и таутомерных систем с осциллирующими связями в центральном циклогекса-1,3,5-триеновом фрагменте, до полициклических 1,2,3-оксадиазолов и соответствующих диазокарбонильных таутомеров, а также «вырожденных» таутомерных систем.

Такое сочетание выбранных методов и объектов исследования представляет одно из главных достоинств диссертации.

Впечатляет большой объем проделанной работы. Рассчитано и проанализировано большое количество физико-химических параметров исследуемых систем, таких как структурные параметры, относительные энергии, частоты нормальных колебаний, величины сродства к электрону, потенциалы

ионизации в газовой фазе и средах, дипольные моменты, энергии и силы осцилляторов электронных переходов, поляризуемости и гиперполяризуемости.

Особо следует подчеркнуть как важный и значительный результат установление связи между явлением «вырожденной» таутомерии и оптическим вращением поляризованного света хиральными таутомерами.

В качестве замечания можно отметить, что в автореферате не указано в рамках какого приближения проводились расчеты длин волн и сил осцилляторов разрешенных  $\pi \rightarrow \pi^*$ -переходов в электронных спектрах таутомеров ванилина.

Оценивая автореферат диссертационной работы М.В.Макаровой, считаю, что она представляет собой значимое и законченное научное исследование. Диссертация полностью соответствует требованиям ВАК к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Заведующий кафедрой фотоники СПбГУ,  
доктор физико-математических наук

*Чижов*

Ю.В. Чижов

ПОДПИСЬ РУКОВОДИТЕЛЯ  
ЗАБЕРЯЮЩАЯ НАЧАЛЬНИК  
ОТДЕЛА  
Н.А.ГОР

