

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Макаровой Марии Валентиновны  
«КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ АСПЕКТОВ  
ТАУТОМЕРИИ ГИДРОКСИ- И КАРБОНИЛСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ»,  
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук.

Предметом диссертационной работы является одна из актуальнейших современных задач физической химии, биологии и фармакологии – исследование таутомерных превращений, сопровождаемых изменением структурных и физико-химических характеристик вещества. Исследуемые в работе вещества представляют интерес для различных отраслей промышленности, медицины и органического синтеза. Работа посвящена квантовохимическому исследованию структурных, энергетических и физико-химических характеристик компонентов таутомерных систем в газовой фазе и в растворе.

Огромное значение для дальнейших исследований имеет выполненная М. В. Макаровой методическая работа по уточнению понятия таутомерии.

Безусловный интерес представляют выполненные автором исследования таутомеров ванилина и расчеты их характеристик, как микро, так и макро, вплоть до оптических свойств.

Важным является вывод о некорректности учета сольватационных эффектов по сдвигу орбитальных энергий и о необходимости расчета полных энергий с использованием модели поляризуемого континуума при оценке потенциалов ионизации в растворах.

Интерес представляют исследования, связанные с уточнением понятия «вырожденной» таутомерии.

В работе **впервые** показана возможность осцилляции длин связей в центральном циклогекса-1,3,5-триеновом фрагменте полициклических систем вследствие их таутомерных превращений.

Интерес также представляют выполненные диссертантом расчеты свойств и характеристик большого числа конкретных веществ, имеющие предсказательное значение.

Не очень удачно на мой взгляд сформулированы результаты, выносимые на защиту. Они больше похожи на направления исследований. Результаты работы гораздо весомее, чем это следует из приведенных пунктов.

Из автореферата, к сожалению, не ясна степень влияния модели аквакомплекса на результаты расчета потенциала ионизации ванилина при исследовании эффекта водородной связи.

Полученные соискателем результаты имеют несомненную научную, практическую и методическую ценность. Они широко представлены в литературе, неоднократно обсуждались на конференциях и хорошо известны специалистам. Считаю, что М. В. Макарова безусловно заслуживает присвоения ей степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Горбачев Юрий Евгеньевич  
Руководитель отдела исследований, ООО Коддан Текнолоджис  
с.н.с., д.ф.-м.н.  
197342 С.Петербург, Белоостровская ул., д.22, тел.: +7 812 7407545  
e-mail: yuriy.gorbachev@gmail.com

Мария Макарова 10.02.2015  
Пом. рук-ля ООО "Коддан Текнолоджис"  
Боровина М.Д. 10.02.2015

