

## 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 по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Исследование таутомерных систем является чрезвычайно актуальным как для изучения возможностей управления многими химико-технологическими процессами, особенно в области органического синтеза, так и для изучения таутомерных равновесий, имеющих место в живых организмах.

Проведенное в диссертационной работе Макаровой М. В. исследование структурных, энергетических и физико-химических характеристик таутомерных систем на примере гидрокси- и карбонилсодержащих соединений представляет единый подход к изучению ряда проблем в области химии этих соединений, реализуемый автором в рамках современной квантовой химии, которая включает квантовохимические расчеты как принципиально важный раздел исследования структуры и свойств вещества.

Научная новизна состоит в том, что для большинства исследуемых в диссертационной работе систем квантовохимические расчеты их разнообразных физико-химических характеристик в газовой фазе и в растворах выполнены впервые. Впервые показаны детали некоторых таутомерных превращений, которые проявляется на молекулярном уровне, впервые в качестве характеристик оснований Брэнстеда предложен теоретический квантовохимический критерий сродства к протону.

Практическая значимость проведенного в диссертационной работе исследования состоит в том, что позволило предсказать среди исследуемых систем химические соединения с уникальными свойствами - высокими гиперполяризуемостями, которые являются перспективными для создания нелинейных оптических сред в процессах лазерного излучения.

Проведенное Макаровой М.В. квантовохимическое исследование как в газовой фазе, так и в растворах различной полярности, важно не только с точки

зрения изучения таутомерных систем. Оно является яркой демонстрацией возможностей современных высокопроизводительных квантовохимических расчетов в определении структурных параметров соединений, средства к электрону, энергий ионизации, средства к протону, дипольных моментов, частот нормальных колебаний, энергий и сил осцилляторов электронных переходов, в оценке поляризуемости и гиперполяризуемости, а также в получении относительных энергий молекулярных образований, позволивших автору изучать механизмы таутомерии и исследовать энергетические барьеры взаимопревращений аддуктов в отдельных системах.

Автореферат диссертационной работы соответствует требованиям, предъявляемым к авторефератам на соискание ученой степени кандидата химических наук, а ее автор, Макарова Мария Валентиновна, несомненно, заслуживает присуждения ей искомой ученой степени по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Доцент Санкт-Петербургского  
государственного технологического  
института (технического университета),  
кандидат химических наук,

Панина Н.С.

02.02.2015

