

О Т З Ы В

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

Актуальность выполненного исследования Макаровой М.В. не вызывает сомнений. Таутомерия является одним из важнейших явлений в химии и биологии, поскольку именно таутомерия может быть решающим фактором, определяющим скорость физико-химического процесса и его конечные продукты. Научная новизна работы подчеркивается специфичностью выбранных объектов. Обо всем этом очень ясно и четко изложено в автореферате диссертации.

Цель и задачи работы сформулированы вполне конкретно. Полученные основные результаты работы соответствуют поставленным задачам.

Данное исследование открывает новые перспективы в применении методов определения энергетики и структурных характеристик сложных объектов, основываясь на совокупности современных теоретических методов. Оно является базой для дальнейших исследований в области квантовой химии и компьютерного моделирования новых таутомерных систем и прогнозирования их физико-химических свойств, а также возможности контролируемого изменения этих свойств. Результаты исследований достаточно полно представлены научной печати.

Замечаний принципиального характера нет. Однако следует отметить, что на стр. 15 (последний абзац) автореферата отмечено, что в полярном растворителе доминирует таутомер (XII-b). Если это так, то энергия таутомера XIIa относительно энергии таутомера XIIb должна быть положительной, а в табл. 13 на стр. 16 она отрицательная.

Считаю, что представленная Макаровой Марией Валентиновной работа "Квантовохимическое исследование физико-химических аспектов таутомерии гидрокси- и карбонилсодержащих соединений" соответствует основным квалификационным требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук (п. 9 постановления правительства РФ №842 от 24 сентября 2013 г. «О порядке присуждения ученых степеней»), а ее автор заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Доктор химических наук, профессор,
заведующий кафедрой аналитической химии
ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский
государственный технологический институт
(технический университет)»

190013, г. Санкт-Петербург
Московский просп. 26,
тел.: 8(812)316-2991
zaremba@technolog.edu.ru

Зарембо Виктор Иосифович

