

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ НА ДИССЕРТАЦИЮ
«Квантовохимическое исследование физико-химических аспектов
таутомерии гидрокси- и карбонилсодержащих соединений»
на соискание ученой степени кандидата химических наук
Макаровой Марии Валентиновны

Макарова Мария Валентиновна поступила в аспирантуру СПбГУ в октябре 2011 года сразу после завершения обучения под моим руководством в магистратуре химического факультета. В аспирантуре она освоила программу подготовки научно-педагогических кадров по специальности 02.00.04 – физическая химия, успешно сдала кандидатские экзамены и подготовила диссертацию по утвержденной кафедрой квантовой химии и Ученым советом химического факультета теме «Квантовохимическое исследование физико-химических аспектов таутомерии гидрокси- и карбонилсодержащих соединений».

Результаты научно-исследовательской работы, составляющие диссертацию Макаровой М.В., имеют значение для развития физико-химической теории строения химических соединений и взаимодействия молекул и молекулярных ионов с поляризующейся средой.

Список научных трудов Макаровой М.В. включает 15 статей. Основные научные результаты по теме диссертационной работы опубликованы в российских академических журналах (13 статей, каждая на русском и английском языках). Статья “Effect of microhydration on the electronic structure of the chromophores of the photoactive yellow and green fluorescent proteins” выполненная в соавторстве с научной группой А. Krylov (университет Южной Калифорнии) и опубликованная в Journal of Chemical Physics, а также выходящая за пределы диссертационной темы работа “О спиновых заселенностях и свободных валентностях в возбужденных молекулах и радикалах”, опубликованная в журнале Оптика и спектроскопия, в состав диссертации Макаровой М.В. включены не были.

Полученные Макаровой М.В. результаты по теме диссертационной работы доложены ею на заседаниях кафедры квантовой химии, на научных семинарах кафедр квантовой и физической химии, на всероссийских и международных конференциях.

Еще в магистратуре Макарова М.В. приобрела знания и навыки, достаточные для исследования физико-химических свойств сложных химических соединений на высокопроизводительных многопроцессорных вычислительных комплексах с применением современных лицензионных компьютерных программ квантовой химии, имеющихся в СПбГУ. Поэтому все расчеты, предусмотренные программой диссертационной работы, Макарова М.В. выполнила самостоятельно.

Диссертация состоит из введения, 9 глав, выводов и списка литературы.

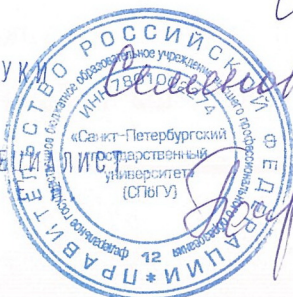
Во введении обоснована актуальность работы и задачи исследования. Первая глава представляет собой литературный обзор. Во второй главе кратко изложены использованные методы и избранный подход к расчету различных физико-химических характеристик. Каждая из следующих за ней глав посвящена некоторой группе родственных таутомерных систем и определенному набору физико-химических свойств, в которых может проявляться таутомерия. Число и относительно большой объем выводов соответствует многообразию исследованных таутомерных систем и свойств таутомерных молекул, а также числу статей, в которых опубликованы результаты диссертационной работы.

Диссертация Макаровой М.В. удовлетворяет критериям, утвержденным постановлением № 842 Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г., и ее автор безусловно заслуживает присуждения степени кандидата химических наук.

27.06.2014

ПОДПИСЬ
ЗАВЕРЯЮ

ВЕДУЩИЙ СПЕЦИАЛИСТ
ПОЛСТЯНОВА



Семенов С.Г.

К.х.н., с.н.с. Семенов С.Г.