

ОТЗЫВ

д.ф.-м.н. Столярова Андрея Владиславовича
на автореферат диссертации М.Н. Химича

**«Динамика внутримолекулярного фотопереноса протона в
аминофенилбензоксазинонах, бензазолиламинохинолинах и
производных антраниловой кислоты»**,

представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по
специальности 02.00.09 - "химия высоких энергий"

Диссертационная работа Михаила Николаевича Химича посвящена одной из наиболее сложных и востребованных на сегодняшний день проблем современной фотохимии: экспериментальному исследованию динамики внутримолекулярного переноса протона в системах с внутримолекулярной водородной связью $>N-H...N<$ и $>N-H...O=C<$ (NH-кислоты).

Актуальность поставленной задачи и объектов исследования не вызывает никаких сомнений, так системы с фотопереносом протона активно используются в качестве люминофоров, лазерных сред, фотостабилизаторов, сенсоров ионов металлов, оптических переключателей и других приложениях. При этом, не смотря на гигантские усилия, направленные на экспериментальное и теоретическое исследование молекул демонстрирующих фотоперенос протона, информация о структуре и динамике их электронно-возбужденных состояний до сих пор крайне скудна и фрагментарна, чтобы сделать однозначные выводы о детальном механизме внутримолекулярных фотопревращений.

В представленной работе выполнено систематическое исследование кинетических закономерностей и механизма фотопереноса протона в ранее не исследованных классов флуорофоров (аминофенилбензоксазинонах, бензазолиламинохинолинах и производных антраниловой кислоты) традиционными методами стационарной спектроскопии поглощения и испускания, а также временной флуоресцентной и абсорбционной спектроскопией обладающей пико- и даже фемтосекундным разрешением. Экспериментальные исследования сопровождались квантово-механическими расчетами высокого уровня сечений поверхности потенциальной энергии в основном и возбужденных электронных состояниях. Используемые современные многоконфигурационные методы квазивырожденной теории возмущений и зависящей от времени теории функционала плотности позволили однозначно установить существование барьера на поверхности потенциальной энергии возбужденных состояний, а также изучить влияние кислотности донора и основности акцептора протона на высоту барьеров.

Результаты работы Михаила Николаевича по теме диссертации опубликованы в ведущих отечественных научных журналах, хорошо

известны специалистам и активно цитируются в литературе. Реферат четко и ясно написан. Однако, теоретические данные, полученные для электронно-возбужденных состояний в рамках временной теории функционала плотности, на мой взгляд, недостаточно полно проиллюстрированы в автореферате, что не позволяет сделать какие-либо выводы об их качестве, по сравнению, например, с данными квазивырожденной теории возмущений. Кроме того, предельно лапидарный стиль изложения содержательной части методики используемых квантово-химических расчетов (см. Главу 6 на стр. 23 автореферата) существенно затрудняет их восприятие.

Сделанные замечания не носят принципиального характера и никак не снижают высокой положительной оценки проведенных М.Н. Химичем исследований, которые по актуальности поставленной задачи, научной новизне, объему и практической значимости полученных результатов полностью соответствуют требованиям п.9 Положения о порядке присуждения ученых степеней (утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842), предъявляемых к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор достоин присуждения искомой научной степени кандидата химических наук по специальности 02.00.09 «Химия высоких энергий».

Заведующий кафедрой лазерной химии
химического факультета МГУ, д.ф.-м.н.

А.В.Столяров

16 сентября 2015 года

avstol@phys.chem.msu.ru

тел. 495-939-28-25

Московский государственный университет

имени М.В.Ломоносова,

химический факультет

кафедра лазерной химии

119991, г. Москва, Ленинские горы, строение 1/3

