

ОТЗЫВ на автореферат
диссертационной работы Рукина Павла Сергеевича
на тему: «Теоретическое моделирование влияния внутри- и межмолекулярных
взаимодействий на спектральные свойства красителей, используемых в оптических
хемосенсорах»,
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических
наук по специальности 02.00.04 – «физическая химия»

Диссертационная работа П.С. Рукина посвящена моделированию оптических свойств красителей, используемых в оптических хемосенсорах. Важность проведенного исследования обусловлена тем, что распространенные методики, основанные на теории функционала электронной плотности, не всегда корректно воспроизводят спектральные характеристики молекул-индикаторов. В работе П.С. Рукина показано, что для объяснения экспериментально наблюдаемых спектров необходимо использовать целый набор вычислительных приемов, включая молекулярно-механическое моделирование окружения и статистический учет его геометрии. Всеми этими приемами диссертант овладел на достаточно высоком уровне.

Выводы и положения диссертационной работы хорошо обоснованы и прямо следуют из представленных результатов расчетов. Используемый уровень теории достаточен для решения рассматриваемых задач. Достоверность вычислений подтверждается сравнением полученных данных с экспериментом и другими расчетами, а также надежностью используемых подходов. Результаты диссертации опубликованы в одном из ведущих журналов в области физической химии Phys. Chem. Chem. Phys. Новизна представленных результатов не вызывает сомнений. Недостаточно обоснована возможность распространения выводов, основанных на исследовании DPAA, ZnTPP, DBMBF₂ и RHO-TAMRA, на другие красители.

Указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. Диссертационная работа Рукина П.С. отвечает критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, а также соответствует паспорту специальности 02.00.04 – «физическая химия» (по физико-математическим наукам). Таким образом, соискатель Рукин Павел Сергеевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Кандидат физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния», доцент, доцент кафедры «Физика конденсированных сред» ФГАОУ ВО Национального Исследовательского Ядерного Университета «МИФИ» (НИЯУ МИФИ), адрес: 115409, г. Москва, Каширское шоссе, 31
Email: KPKatin@yandex.ru Тел. +7(495)788-56-99



Катин Константин
Петрович

Подпись
И. О. ДИРЕКТОРА
ПЕРСОНАЛУ
ЦЫГАНОВ В. Г.

