

## Отзыв

на автореферат диссертации Беднякова Александра Сергеевича на тему «Особенности перемещения протонов в кластерах воды: неэмпирическая модель» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Диссертация Беднякова А.С. посвящена детальному теоретическому исследованию различных путей перемещения протонов в ограниченных фрагментах сетки водородных связей и выявлению условий, при которых возможно появление и достаточно продолжительное существование ионных частиц в кластерах воды. Поскольку перемещение протонов в сетке водородных связей воды играет важную роль во многих биологических и некоторых других процессах, включая кислотно-щелочные реакции и протонный обмен в клетках, актуальность данной работы не вызывает сомнений.

Для проведения исследования автор, прежде всего, выбирает модельные кластеры в виде колец, содержащих от 4-х до 6-и молекул воды, и объемные фрагменты, полученные объединением различного количества колец. Вследствие непрочности водородных связей и связанных с этим особенностей их поведения, он использует для расчетов прецизионные квантово-химические методы, учитывающие энергию электронной корреляции: MP2, CISD, CASSCF, MCQDPT2 и xMCQDPT2. И для большей точности результатов дополняет стандартный базис 6-31G диффузными и поляризационными функциями на всех атомах. Квантово-химические расчеты выполнены по известным программам GAMESS (US) и FireFly.

На основании анализа модельных кластеров и выполненных расчетов была построена модельная одномерная задача, и показано, что движения мостиковых протонов большой амплитуды в молекулярных кольцах не могут рассматриваться не только как гармонические, но и как независимые. В работе получен и ряд других интересных результатов, таких как увеличение потенциального барьера на пути согласованного перемещения мостиковых протонов с ростом числа молекул воды, входящих в кольцо, значительное уменьшение барьера в случае несимметричного окружения кольца и целый ряд других не менее важных результатов. Результаты, полученные в работе, представляются достоверными. Об этом говорит, например, согласие численных оценок времен жизни и характеристических времен возбуждения определенных состояний кластеров воды с экспериментальными оценками времен возбуждения при облучении конденсированной фазы воды лазером с длиной волны 3.31 мкм.

Диссертация прошла весьма серьезную апробацию на научных конференциях. Ее результаты опубликованы в виде девяти печатных работ, из которых три входят в перечень изданий, рекомендованных ВАК. Автореферат четко и достаточно полно отражает содержание работы. На основании всего сказанного считаю, что данная диссертация отвечает требованиям ВАК,



предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения искомой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Ведущий научный сотрудник  
ФГБУН Институт проблем  
химической физики РАН,  
доктор химических наук,  
профессор \_\_\_\_\_



*Bozhenko* Боженко Константин Викторович

Адрес: 142432, Московская область,  
Ногинский район,  
г. Черноголовка,  
пр. акад. Н.Н. Семенова, 1.  
Тел.: 8(49652)21261,  
e-mail: [bogenko@icp.ac.ru](mailto:bogenko@icp.ac.ru)

СОБСТВЕННОРУЧНУЮ ПОДПИСЬ

СОТРУДНИКА *Bozhenko K.V.*

УДОСТОВЕРЯЮ

ЗАВ. КАНЦЕЛЯРИЕЙ *Bozhenko*

18.05.2017