

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ
на выпускную квалификационную работу студента 4-го курса
бакалавриата А.А. Ефимовой «Атом гелия как зонд электронного
строения и кислотно-основных свойств СН-доноров протона»

Работа А.А. Ефимовой лежит в области спектральной диагностики молекул, способных участвовать в образовании водородных связей. Впервые в работе рассматривается возможность использования химического сдвига атома гелия ^3He как зонда электронного строения доноров и акцепторов протона. Основная идея работы полностью оригинальная, а сама работа во многом поисковая. Актуальность постановки задачи подтверждается тем, что в современной литературе в последние годы регулярно появляются работы, в которых для оценки протонодонорных и протоноакцепторных свойств молекул используются тестовые молекулы-партнеры. Однако использование слабозмущающих зондов, таких как атом ^3He , и картирование всего пространства вокруг изучаемых молекул требует значительных вычислительных ресурсов и до сих пор примеры использования такого подхода единичны.

В ходе работы Александра освоила методы и приемы квантово-механических расчетов с использованием программного пакета Gaussian и других вспомогательных программ, написала в программе Matlab набор утилит для обработки и анализа полученных массивов данных. Александрой проведен значительный объем вычислительной работы, получены подробные карты энергии ван-дер-ваальсовых взаимодействий и спектральных параметров для комплекса ^3He с тремя молекулами: $\text{FC}\equiv\text{CH}$, $\text{F}_2\text{C}=\text{CFH}$, CHF_3 .

Результаты работы были доложены на двух международных конференциях: «Science and Progress-2016» и «Менделеев-2017». Также Ефимова является исполнителем в гранте РФФИ.

За время работы над ВКР Александра показала себя как аккуратный и вдумчивый исследователь, продемонстрировала умение работать самостоятельно и критический подход к полученным данным. Стоит также отметить, что за последние два года Александра сдала 16 экзаменов на «отлично» и 3 на «хорошо».

ВКР написана выверенным и доступным языком, текст хорошо структурирован и подробно вычитан. К достоинствам работы можно отнести тщательно продуманный иллюстративный материал. Результаты вычислений подробно обсуждены, выводы взвешены и обоснованы. Работа Ефимовой удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к выпускным квалификационным работам студентов четвертого курса бакалавриата.

Канд. физ.-мат. наук, доцент
Директор РЦ МРМИ

П.М. Толстой