

**ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ**  
**на выпускную квалификационную работу студента 4-го курса бакалавриата**  
**Д.О. Устимчук «Изучение водородной связи и перехода протона в**  
**самоассоциатах фосфиновых и фосфорных кислот методом ЯМР**  
**спектроскопии»**

Работа Дарьи Олеговны Устимчук посвящена, по существу, решению обратной спектральной задачи: нахождению структуры соединения по его спектрам, в данном случае  $^1\text{H}$  и  $^{31}\text{P}$  спектрам ЯМР. В качестве объекта исследования выбраны межмолекулярные комплексы, образованные за счет прочных (коротких) водородных связей типа ОНО между фосфиновыми и фосфорными кислотами, а также их анионами в полярных апротонных растворах. Для регистрации неусредненных спектральных параметров ЯМР таких короткоживущих комплексов и определения их стехиометрии и строения были использованы нетривиальные экспериментальные условия (растворитель – смесь сжиженных газов, температура эксперимента 100 К) и исследовательские приемы (частичное Н/Д замещение мостиковых протонов с анализом числа и знаков возникающих при этом изотопных эффектов на химических сдвигах).

По моему мнению, основные из поставленных в работе задач удалось успешно решить, но, к сожалению, остались и вопросы, связанные с тем, что экспериментальное исследование пришлось фактически остановить в середине марта из-за пандемии коронавирусной инфекции. Тем не менее, за имевшееся в распоряжении Дарьи время методика подготовки образцов и параметры измерений были достаточно хорошо отработаны и я надеюсь, что оставшиеся незавершенными эксперименты удастся провести в начале следующего учебного года. Та часть работы, которая была полностью завершена, вошла в уже опубликованную статью в журнале *Molecules* (IF 3, Q1). В последние месяцы Дарья Олеговна переключилась на квантово-химические расчеты, результаты которых вошли в ВКР в виде отдельной главы, и углубили понимание изучаемых систем, а также, с моей точки зрения, повысили квалификацию Дарьи Олеговны в области физической химии.

При работе над ВКР Дарья Олеговна продемонстрировала достаточно высокую самостоятельность как при подготовке эксперимента (например, она научилась во многом самостоятельно проводить синтез и очитку смеси дейтерированных газов-фреонов), так и при написании текста ВКР (в особенности литературного обзора). Дарья показала готовность к длительному преодолению экспериментальных трудностей и стремление работать до самого последнего момента. Часть трудностей, однако, она создавала самостоятельно из-за невнимательности и недостаточной строгости к самой себе.

Я считаю, что работа Дарьи Устимчук удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к выпускным квалификационным работам студентов бакалавриата, а ее автор заслуживает присуждения ей искомой степени.

к.ф.-м.н., профессор кафедры физической химии Института химии СПбГУ



П.М. Толстой