

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

на выпускную квалификационную работу студента 2-го курса магистратуры Омара Алкхудера «ИК и ^{31}P ЯМР диагностика комплексов с водородной связью с участием фосфиноксидов»

Работа Омара Алкхудера посвящена решению обратной спектральной задачи: оценке прочности межмолекулярной водородной связи по спектрам ЯМР комплекса. В качестве объекта исследования были выбраны комплексы с водородной связью типа ОНО, образованные модельным акцептором протона, трифенилфосфиноксидом ($\text{Ph}_3\text{P}=\text{O}$), выступавшим в качестве основного спектрального зонда, и замещенными фенолами в качестве доноров протона. Фосфиноксиды – довольно распространенный спектральный зонд. Ранее в литературе по изменению химического сдвига фосфора в ^{31}P спектрах ЯМР оценивалась электроноакцепторная способность кислот Льюиса или величина pK_a кислот Брэнстеда. Однако, экспериментальных оценок собственно прочности невалентных комплексов до сих пор опубликовано не было.

В работе Омара сочетаются несколько подходов к решению поставленной задачи: низкотемпературная и обычная жидкостная спектроскопия ЯМР, твердотельная спектроскопия ЯМР, ИК спектроскопия растворов, ИК спектроскопия кристаллов, рентгеноструктурный анализ и квантово-химические расчеты. В каждом случае работа завершалась построением корреляционного соотношения, позволяющего оценивать прочность водородных связей либо по химическим сдвигам в спектрах ЯМР, либо по положению колебательных полос в ИК спектрах. Видна общность результатов: тенденции во всех случаях одинаковые, функционально все предложенные уравнения схожи, но масштабные коэффициенты в них заметно отличаются. По всей видимости, универсальной ЯМР- или ИК-шкалы прочностей для $\text{Ph}_3\text{P}=\text{O}$ не существует, а при смене экспериментальных условий сохраняются только общие тренды изменения спектральных параметров фосфиноксида.

За время работы над магистерской диссертацией Омар Алкхудер приобрел довольно широкий набор навыков пробоподготовки, анализа и интерпретации данных (см. перечень использованных методик выше; кроме работы непосредственно за приборами Научного парка всё делалось Омаром самостоятельно), заметно повысил свое умение критически подходить к полученным результатам. Также необходимо отметить, что Омару пришлось начинать с очень скромного уровня знания и понимания русского языка, но теперь языковой барьер практически не мешает общению на тему магистерской диссертации. Омар очень ответственный и исполнительный студент, всегда старающийся доделать задуманное. Также Омар дружелюбный и хорошо ладит в остальными членами научной группы. Омар Алкхудер будет поступать в аспирантуру в России по линии Россотрудничества. Его приоритетный выбор – СПбГУ. Если это получится, то я согласился быть руководителем и тогда мы начнем с подготовки статьи по мотивам магистерской работы.

Считаю, что работа Омара Алкхудера удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к выпускным квалификационным работам студентов магистратуры, а ее автор заслуживает присуждения ему искомой степени.

д.х.н., профессор кафедры
физической органической химии Института химии

(П.М. Толстой)