

ОТЗЫВ
на автореферат диссертации Артюшенко Полины Владимировны
«Атомная и электронная структуры феромонов в основном и возбуждённом
состояниях», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-
математических наук по специальности
01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Согласно материалам, изложенным в автореферате диссертации Артюшенко П.В., работа посвящена теоретическому изучению физических характеристик феромонов насекомых с применением методов, основанных на теории функционала плотности. Исходя из результатов расчётов, сделаны выводы об устойчивости феромонов к световому и термическому воздействию.

Применение квантово-химических методов исследования для изучения свойств феромонов может послужить ориентиром для дальнейших теоретических и экспериментальных работ, посвящённых разработке методов мониторинга и контроля численности популяций насекомых, в связи с чем актуальность диссертационной работы Артюшенко П.В. не вызывает сомнений.

Значимым результатом работы является расчетное доказательство предположения о том, что на спектр поглощения феромонов влияет наличие, количество и взаимное расположение кратных связей в молекуле, а не наличие и вид кислородсодержащей функциональной группы. Кроме того, проведено исследование изменения конформации для феромонов чешуекрылых насекомых, установлено, что оно приводит в большей степени к изменениям в величинах дипольных моментов и в меньшей степени влияет на сдвиг максимума поглощения и на изменение полной энергии молекул.

Также, интересным является то, что изменение электронной и атомной структуры молекул при действии электромагнитного излучения для непредельных феромонов происходит в области расположения кратных связей, не зависимо от наличия и вида кислородсодержащей функциональной группы, длина двойной связи при поглощении увеличивается в среднем на 0,9 Å. Для бициклических феромонов жестокрылых насекомых, при переходе в возбуждённое состояние наблюдается увеличение длины одной из связей, входящих в оба цикла, в среднем на 1,1 Å что может приводить к раскрытию одного из циклов молекулы и разрушению молекулы феромона.

Таким образом, в работе обосновывается возможность применения феромонных препаратов для модернизации и повышения эффективности методов контроля численности насекомых. Использование квантово-химического подхода является универсальным для разных типов феромонных молекул различных видов насекомых, что весьма важно, учитывая многокомпонентный состав феромонов и видовое разнообразие насекомых-вредителей. Полученные результаты исследования свидетельствуют о несомненной практической значимости работы.

Следует отметить недостаток данной работы. Желательно, чтобы подобные теоретические исследования были более тесно связаны с экспериментальными результатами. Однако, данное замечание не уменьшает значимости работы.

По теме исследования имеется 5 публикаций в российских и зарубежных журналах, результаты работы были изложены на ряде конференций.

Диссертационная работа соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор, Артюшенко Полина Владимировна, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Доцент кафедры ИУС
СибГУ им. М.Ф. Решетнева,
кандидат физико-математических наук



М.В. Сержантова