

ОТЗЫВ НА АВТОРЕФЕРАТ

диссертации Бобкова Александра Сергеевича «Квантовохимическое моделирование механизмов сборки аннелированных гетероциклических систем с пиррольным ядром в суперосновной среде КОН/DMSO», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия

Моделирование механизмов сложных органических реакций современными методами квантовой химии безусловно является актуальной задачей. Коллектив исследователей лаборатории квантовой химии Иркутского государственного университета активно и систематически занимается моделированием свойств суперосновных систем типа гидроксид щелочного металла – диметилсульфоксид (МОН/DMSO) и осуществляемых в суперосновном окружении реакций. Диссертация Бобкова А.С. достойно продолжает эти работы. Можно согласиться с формулировками в автореферате относительно научной новизны, теоретической и практической значимости диссертационной работы.

Автор хорошо представил положения, выносимые на защиту (стр. 6) и выводы работы (стр. 18-20).

Представленная работа является новым, целостным и интересным исследованием. Методы и результаты работы представлены понятно, все заключения, приводимые в автореферате, проиллюстрированы, выводы обоснованы. Широкий набор использованных автором методов свидетельствует о высокой квалификации исследователя. Автореферат написан понятным языком, содержит все необходимые разделы. Результаты исследований автора опубликованы в 5 статьях в авторитетных международных научных рецензируемых изданиях, что указывает на высокий уровень проведенного исследования и актуальность изученной темы.

Критических замечаний к работе нет. Не очень понятно использование термина «легкий» - «легкий транспорт протона в системе» (стр. 8) или «Миграция молекулы воды внутри гидратных комплексов осуществляется легко» (стр. 19). По-видимому, речь идет о небольших энергетических барьерах; но где провести границу между «легкими» и «трудными» молекулярными процессами? На Рис. 1 показаны расстояния (скорее всего, в ангстремах, хотя это не уточняется) между атомами в переходных состояниях с указанием трех знаков после запятой – использованные методы расчета действительно претендуют на такую точность? В подписи к Рис. 1 неплохо было бы объяснить цвета раскраски атомов и почему фиолетовый шар (не исключено, что он относится к катиону калия) такой большой по размеру. Эти мелкие

замечания относятся к оформлению автореферата и не умаляют научной ценности диссертации.

Диссертационная работа Бобкова Александра Сергеевича «Квантовохимическое моделирование механизмов сборки аннелированных гетероциклических систем с пиррольным ядром в суперосновной среде KOH/DMSO», представленная на соискание ученой степени кандидата химических наук, соответствует специальности 02.00.04 «физическая химия» и отвечает требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней.

Профессор кафедры физической химии
химического факультета МГУ,
заведующий лабораторией квантовой химии
и молекулярного моделирования,
д.х.н. по специальности 02.00.04
(физическая химия),
профессор

Немухин Александр Владимирович

«29» апреля 2021 г.

Место работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» (химический факультет Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова); кафедра физической химии.

Почтовый адрес 119991, ГСП-1, Москва Ленинские горы, МГУ имени М.В. Ломоносова, дом 1, строение 3, химический факультет, кафедра физической химии

e-mail anem@lcc.chem.msu.ru

телефон +7 (495) 939-48-40

