

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Дамира Зайнулловича Абсалямова

"Реакции ацетиленов с аминами, имидами и гидразонами в суперосновных средах KOH/DMSO и KO<sup>t</sup>Bu/DMSO: квантово-химическое исследование", представленной на соискание ученой степени химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия.

Каскадные реакции в суперосновных средах, в ходе которых в одну препаративную стадию формируются несколько C–C и C–N связей, и образуются функциональные молекулы, имеют практическую значимость для использования в качестве новых лекарственных препаратов. Изучение таких реакций методами квантовой химии обеспечивает понимание строения суперосновных сред и механизмов превращений в них. Этой проблеме посвящено данное диссертационное исследование.

Диссертант усовершенствовал моносолеватную модель суперосновного центра KOH·DMSO, изучил реакции этинилирования и C-винилирования (E)-N,1-дифенилэтанимина фенилацетиленом в суперосновной среде KO<sup>t</sup>Bu/DMSO и возможность реакции N-винилирования и этинилирования 1-фенил-2-(1-фенилэтилиден)гидразина фенилацетиленом в суперосновной среде KO<sup>t</sup>Bu/DMSO. Методами квантовой химии оценена способность интермедиатов к образованию циклических продуктов и механизмы каскадной сборки N-фенил-2,5-диметилпиррола из анилина и ацетилена в суперосновной среде KOH/DMSO и 3,5-бис(2-хлоранилин)-3-метилпентан-2-она из 2-хлоранилина и ацетилена в суперосновной системе KOH/DMSO.

Полученные результаты являются новыми и представляют научный и практический интерес. Актуальность, практическая значимость, новизна и достоверность полученных результатов диссертационной работы, а также личный вклад автора сомнений не вызывают. Результаты диссертационной работы докладывались на российских и международных конференциях и опубликованы в научных журналах, входящих в список рекомендованный ВАК РФ.

Замечание: Исследование столь сложных химических процессов следовало бы сопровождать оценкой возможных модельных и вычислительных погрешностей.

Эта критика не изменяет моего общего положительного мнения о работе.

Судя по автореферату, диссертация Абсалямова Д.З. "Реакции ацетиленов с аминами, имидами и гидразонами в суперосновных средах KOH/DMSO и KO<sup>t</sup>Bu/DMSO: квантово-химическое исследование" по тематике, объектной базе, содержанию и полученным результатам отвечает всем требованиям пп. 9 – 14 «Положения о порядке присуждения учёных

степеней» (утв. Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 в действующей редакции), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а её автор Дамир Зайнуллович Абсалямов заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия.

Доктор физико-математических наук

(специальность 01.04.17 - химическая физика,  
горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества),  
Заслуженный деятель науки Российской Федерации,  
профессор, заведующий кафедрой квантовой химии  
ФГБОУВО «Российский химико-технологический  
университет им. Д.И. Менделеева»

Цирельсон Владимир Григорьевич

16.04.2024 г.

Адрес:  
ФГБОУВО РХТУ им. Д.И. Менделеева,  
кафедра квантовой химии,  
125047 Москва, Миусская площадь, 9.  
Тел.: +7-499-978-9584  
E-mail: [tsirelson.v.g@muctr.ru](mailto:tsirelson.v.g@muctr.ru)

Подпись проф. В.Г. Цирельсона удостоверяю.

Ученый секретарь РХТУ им. Д.И. Менделеева



Н.А. Макаров