

## ОТЗЫВ

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

Рецензируемая работа Бобкова А.С. посвящена центральной проблеме общей химии и фактически всех ее разделов, и в частности, физической химии, связанной с изучением реакционной способности сложных многоатомных систем. К ним относятся и выбранные авторами работы гетероциклические системы с пиррольным ядром, интересные, в том числе и с точки зрения их практического применения.

Из различных теоретических вариантов рассмотрения указанных задач в качестве подхода при исследовании выбран квантовохимический (КХ) метод переходного состояния, который в настоящее время применяется чаще всего и стал, по сути дела, на сегодня «рабочим» способом изучения подобных задач.

Имея ограниченный опыт в понимании специфики химического поведения непростых органических систем, мы познакомили и обсудили представленные в автореферате результаты этой работы с сотрудниками лаборатории металлокомплексного катализа ИОНХ (зав. лаб. чл.-корр. Гехман А.Е.). Ранее нами совместно была проведена серия КХ расчетов при изучении механизмов реакций окисления ряда органических субстратов (этилен, бензол и более сложные системы) с участием различных окислителей (от перекиси водорода и молекулярного кислорода разной мультиплетности до органических надкислот и пероксикомплексов переходных элементов), т.е. по теме довольно близкой к обсуждаемой в настоящей диссертации. Поэтому настоящий отзыв имеет «коллективный» характер.

Отметим достоинства работы, которые, на наш взгляд, являются бесспорными и определяющими нашу положительную оценку работы в целом.

1. Выполнен и, судя по автореферату, детально проанализирован с оценками различных характеристик, включая свободную энергию Гиббса (при стандартных условиях), большой объем результатов КХ расчетов, проведенных с учетом размеров изученных систем современными методами двух типов DFT и MP2 с предварительной проверкой их надежности путем сопоставления с результатами более строгого подхода в рамках метода CCSD (к сожалению, в автореферате пропущено, на каких системах это проделано).


2. Показан многостадийный характер всех трех подробно изученных реакций (что нас обрадовало, поскольку практически во всех изученных нами реакциях окисления фактически наблюдалась та же картина).
3. При моделировании реакций учтена роль среды (что не так уж часто делается) в виде моно- и дигидратных сольватных комплексов, особенности строения которых были предварительно также детально изучены.

К успешным выводам работы мы склонны отнести дальнейшее продолжение изучения механизмов этих реакций, учитывая найденную в работе неоднозначную роль воды в сольватных комплексах и ее участие в переносе протонов.

Серьезных замечаний, которые бы повлияли на нашу, несомненно, положительную оценку работы, нет.

Насколько можно судить по автореферату, работа полностью отвечает всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в соответствии с Положением о присуждении ученых степеней, утвержденным Правительством Российской Федерации. Подчеркнем соответствие темы диссертации Бобкова А.С. и полученных в ней результатов химической отрасли наук и специальности 02.00.04 – физическая химия, а также соответствие работы п.9 Положения о присуждении ученых степеней. Полагаем, что А.С. Бобков, безусловно, достоин присвоения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Дьячков Павел Николаевич,

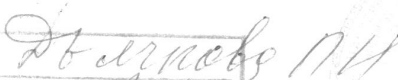
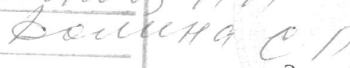
доктор химических наук (02.00.04), профессор, ИОНХ РАН, главный научный сотрудник лаборатории квантовой химии, (8 495 954 22 30). 

Долин Сергей Петрович,

Кандидат химических наук (02.00.04), ИОНХ РАН, заведующий лабораторией квантовой химии, (8 495 955 48 20). 

[dolin@igic.ras.ru](mailto:dolin@igic.ras.ru)

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки – Институт общей и неорганической химии им. Н.С.Курнакова Российской академии наук (ИОНХ РАН). 19991, Москва, Ленинский пр-т д.31.

Подпись руки	
УДОСТОВЕРЯЮ	
Зав. протокольным отд. ИОНХ РАН	

