

ОТЗЫВ

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

Работа выполнена в традиционном русле теоретических исследований, проводящихся в последнее время в лаборатории квантовохимического моделирования ИГУ. В диссертации впервые установлен детальный механизм реакции Трофимова. Исследован суперосновной центр KOH * DMSO; продемонстрирована важность непосредственного учёта молекул воды. Проведено моделирование реакции 1H-пиррол-2-илметанола с пропаргилхлоридом. Получена ценная информация о свободных энергиях активации элементарных стадий исследуемых реакций. В качестве расчетных подходов использованы современные методы квантовой химии: теория функционала плотности, метод связанных кластеров, многочастичная теория возмущений второго порядка. Результаты модельных расчетов активно сопоставляются с экспериментальными данными. Важно отметить, что автору удалось предсказать неизвестный аддукт, ускользавший от внимания экспериментаторов. По автореферату имеются следующие замечания.

1. Не ясно, какие параметры суперосновной среды использовались в расчётах с учетом растворителя в рамках континуальной теории сольватации. В частности, как менялись эти параметры при переходе от равновесных систем к неравновесным (переходным состояниям)? Кроме того, с учётом наличия в среде KOH, более оправданным представляется применение модели COSMO, а не PCM.
2. Не упоминается роль эффектов туннельного переноса атома Н в исследуемых процессах.
3. Не приведены модельные оценки констант скорости в рамках теории переходного состояния и теории Крамерса.
4. Не понятно, на каком этапе расчётов и для чего в работе используется метод MP2.

Разумеется, сделанные замечания не снижают ценности диссертационной работы, оставляющей приятные впечатления. Автором решен ряд научных проблем и сделаны важные заключения. Как следует из автореферата, результаты работы опубликованы в авторитетных журналах с высоким импакт-фактором и прошли серьезную научную апробацию. Считаю, что диссертация Бобкова А.С. заслуживает высокой оценки и удовлетворяет всем требованиям квалификационной работы на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия (п.9 Положения о присуждении ученых степеней).

Доктор хим. наук, профессор кафедры неорганической химии ФГБОУ ВО «Казанский Национальный Исследовательский Технологический Университет»

Назмутдинов Ренат Равильевич
27 мая 2021 г.

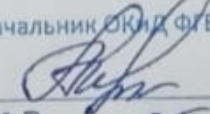
420015 г. Казань, ул. К. Маркса, 68
Тел. +7 (843) 231-89-83; E-mail: nazmutdi@mail.ru

Согласен на обработку персональных данных

Подпись  Р.Р.

удостоверяется.

Начальник ОКНД ФГБОУ ВО «КНИТУ»

 О.А. Перельгина
« 27 » 05 2021 г.

Назмутдинов Р.Р.