

**ОТЗЫВ НА АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ**  
**АБСАЛЯМОВА ДАМИРА ЗАЙНУЛЛОВИЧА**  
**«РЕАКЦИИ АЦЕТИЛЕНОВ С АМИНАМИ, ИМИНАМИ И ГИДРАЗОНАМИ**  
**В СУПЕРОСНОВНЫХ СРЕДАХ КОН/DMSO И КОtBu/DMSO:**  
**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ»,**  
представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук  
по специальности 1.4.4 – физическая химия

**Актуальность.** Моделирование реакций – одно из наиболее актуальных направлений в химических исследованиях. Достаточно высокая производительность современных компьютеров и достигнутый уровень совершенства компьютерных программ прикладной квантовой химии открывают новые возможности для такого моделирования, обеспечивают высокий уровень достоверности результатов расчётов и теоретических выводов, сделанных на их основе. Безусловно, это относится к практически значимой проблеме теоретической интерпретации результатов экспериментального исследования органических реакций в суперосновных средах, которая была выбрана в качестве темы диссертационной работы Д. З. Абсалямова.

**Научная новизна.** В диссертации развита модель суперосновного реакционного центра, включающая явно одну молекулу диметилсульфоксида и в приближении поляризуемого континуума учитывающая все остальные молекулы растворителя. Показано, что новая модель позволяет воспроизвести структуру суперосновного центра, предсказанную в результате более ресурсоёмких расчётов с применением модели, включающей пять соседних молекул диметилсульфоксида. Модификация метода исследования позволила получить новые, ранее недоступные сведения о механизме органических реакций в суперосновных средах. В частности, впервые полностью раскрыт механизм каскадной сборки *N*-фенил-2,5-диметилпиррола и 3,5-бис(2-хлоранилин)-3-метилпентан-2-она из ацетилена и производных анилина.

**Значимость работы.** Детальное описание на молекулярном уровне механизма химических реакций ацетиленов с аминами, имидами и гидрозами в суперосновных средах, содержащих гидроксид или *трет*-бутилат калия в диметилсульфоксиде, имеет значение для планирования органического синтеза, объяснения или предсказания состава продуктов таких реакций.

**Выводы.** Д. З. Абсалямов выполнил интересное и трудоёмкое исследование, которое вносит весомый вклад в теорию элементарных химических процессов, происходящих в

суперосновных средах. Диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне, обладает новизной и практической значимостью. Основные результаты представлены в 6 статьях, которые опубликованы в рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК и индексируемых базой WoS, в том числе в пяти журналах I квартили. Сформулированные диссертантом выводы достаточно обоснованы и заслуживают доверия. Развитые подходы могут оказаться полезными для физико-химических исследований аналогичных физико-химических систем в научных центрах России (Московском, Санкт-Петербургском и Новосибирском государственных университетах, НИЦ «Курчатовский институт»). Считаю, что работа Д. З. Абсалямова удовлетворяет всем требованиям пунктов 9-14 Положения о порядке присуждения учёных степеней, утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 (в последней редакции), предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата химических наук, а её автор заслуживает присуждения искомой степени по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Д.ф.-м.н., руководитель отделения перспективных разработок,  
заведующий отделом квантовой физики и химии  
Федерального государственного бюджетного учреждения  
«Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова»  
НИЦ «Курчатовский институт», г. Гатчина  
рабочий телефон: +7 81371 31055  
эл. почта: titov\_av@pnpi.nrcki.ru

/ А. В. Титов /

15 АПР 2024

Подпись А. В. Титова заверяю  
Учёный секретарь  
Федерального государственного бюджетного учреждения  
«Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова»  
НИЦ «Курчатовский институт», г. Гатчина

/ С. И. Воробьев /

