

## Отзыв

на автореферат диссертации А.С. Бобкова "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.

Представленная к защите диссертационная работа А.С. Бобкова посвящена моделированию реакций сборки аннелированных гетероциклических систем с пиррольным ядром под действием суперосновных систем типа гидроксид щелочного металла – диметилсульфоксид из первых принципов при помощи наиболее эффективных современных методов теории электронной структуры. Актуальность и практическая значимость работы определяется, с одной стороны, исключительными синтетическими перспективами (в том числе связанными с фармакологией) методик, основанных на реакциях ацетилен и его производных в суперосновных системах, с другой стороны – важностью создания теоретических моделей с прогностическими возможностями, необходимых для быстрой и экономичной разработки таких методик. Детальные механизмы функционирования суперосновных центров, в частности, роль их гидратации, оставались в значительной степени невыясненными.

Автором построены детальные модели сложных многостадийных реакций; достаточно упомянуть результаты определения механизма реакции Трофимова путем прямого расчета термодинамических и кинетических параметров элементарных стадий на примере синтеза 4,5,6,7-тетрагидро-1H-индола. Следует отметить выполненное диссертантом исследование механизма реакции 1H-пиррол-2-илметанола с пропаргилхлоридом, результаты которого были подтверждены экспериментально, более того, в конечном итоге совместной с экспериментаторами работы это исследование привело к созданию новой методики синтеза пирроло-оксазиновых ансамблей в суперосновной среде. Полученные данные о строении моногидратных и дигидратных комплексов KOH·5DMSO позволило сделать выводы об особенностях формирования и функционирования суперосновного центра и, несомненно, будет иметь важное значение для разработки широких классов новых синтетических схем с использованием суперосновных сред.

Одним из важнейших результатов работы являются рекомендации по оптимальному выбору комбинаций квантовохимических методов для установления механизмов сложных реакций в конденсированной фазе; при этом сочетание принципиально разных подходов к описанию эффектов электронной корреляции исключает возможность систематических ошибок и гарантирует высокую степень достоверности результатов и выводов диссертанта.

Все существенные результаты работы опубликованы, причем основной материал представлен в очень авторитетных международных изданиях.

Насколько можно судить по представленному автореферату и публикациям, рассматриваемая работа представляет собой цельное научное исследование в области физической химии, выполненное на очень высоком профессиональном уровне, полностью соответствует обозначенной в автореферате специальности 02.00.04 – физическая химия и удовлетворяет требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней. Соответственно, автор

работы, Александр Сергеевич Бобков, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по указанной специальности.

Главный научный сотрудник  
химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова  
доктор физ.-мат. наук

12.05.2021

А.В.Зайцевский



Зайцевский Андрей Вениаминович  
ученая степень: доктор физико-математических наук, 02.00.17 - математическая и квантовая химия  
ученое звание: старший научный сотрудник (доцент по специальности)  
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова  
главный научный сотрудник кафедры лазерной химии химического факультета  
119991, Москва, Ленинские горы, 1, строение 3, ГСП-1, МГУ, химический факультет  
тел. +7 925 858 0940, email: zaitsevskii\_av@pnpi.nrcki.ru