

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

Об Абсаямове Дамире Зайнулловиче, соискателе ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия, представляющем диссертационную работу «Реакции ацетиленов с аминами, имидами и гидрозами в суперосновных средах KOH/DMSO и KO^tBu/DMSO: квантово-химическое исследование»

Дамир Зайнуллович Абсаямов занимается научной работой в лаборатории квантовой химии Иркутского государственного университета, начиная с 2017 г. с 3-го курса бакалавриата химического факультета. Абсаямов Д.З. в 2020 г. с отличием окончил магистратуру химического факультета ИГУ и в этом же году поступил в очную аспирантуру ИГУ. Успехи Абсаямова Д.З. в обучении и в научных исследованиях неоднократно поддержаны стипендиями Правительства РФ (2019 г., 2021 г.) и Губернатора Иркутской области (2019 г., 2022 г.), а также стажировкой в университете г. Канадзава, Япония (2019 г.).

Абсаямов Д.З. активно занимается научными исследованиями, его диссертационная работа является составной частью научного направления ФГБОУ ВО «ИГУ» «Разработка и применение неэмпирических методов и моделей квантовой химии для исследования строения, свойств и реакционной способности молекул в основном и возбужденных состояниях», выполняемого в лаборатории квантовохимического моделирования молекулярных систем ИГУ. Абсаямов Дамир был исполнителем грантов РФФИ и РФН и является исполнителем грантов Минобрнауки.

Актуальность представленной диссертационной работы обусловлена двумя обстоятельствами. Во-первых, она вносит вклад в развитие квантово-химических подходов к моделированию химических реакций в суперосновных средах. Во-вторых, на основании этих подходов теоретически исследованы механизмы конкурирующих реакций этилирования и винилирования иминов и гидрозиев фенилацетиленом в суперосновной среде KO^tBu/DMSO, а также предложены и изучены механизмы каскадных сборок *N*-арил-2,5-диметилпиррола и 3,5-бис(ариламин)-3-метилпентан-2-она из ариламинов и ацетилена в суперосновной среде KOH/DMSO. Интерес к механизмам образования таких сложных соединений связан с их высокой синтетической и фармацевтической значимостью.

В диссертации на объектах, заявленных в работе, усовершенствована моносольватная модель описания суперосновного центра KOH(KO^tBu)·DMSO, предложенная ранее сотрудниками лаборатории квантовой химии, показано, что только при оптимизации структурных

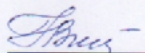
параметров моносольватных комплексов в рамках IEF PCM возможно передавать расположение реагентов относительно суперосновного центра и свободные энергии активации Гиббса, согласующиеся с данными пентасольватной модели $\text{KOH}(\text{KO}^i\text{Bu})\cdot 5\text{DMSO}$. Проанализированные кинетические (барьеры активации) и термодинамические (энергии образования) характеристики позволили не только детально изучить механизмы уже существующих реакций и каскадных сборок, но и предположить ещё неизученные взаимодействия, способные конкурировать с основным направлением. Эти результаты имеют самостоятельную ценность для дальнейшего рассмотрения механизмов исследуемых реакций ацетилен.

За время выполнения работы Абсалямов Д.З. проявил большую настойчивость в достижении поставленных целей, заинтересованность, способность самостоятельно формулировать задачи исследования, планировать и проводить квантово-химические расчеты, находить решения и интерпретировать полученные результаты. Абсалямов Д.З. всегда и во всем имеет свою точку зрения и умеет ее отстаивать. Профессионально владеет средствами современной вычислительной техники и методами квантовой химии. Результаты работы Абсалямова Д.З. вошли в материалы 7 статей (6 из них стали основой диссертации) в международных журналах, входящих в перечень рецензируемых научных изданий ВАК и индексируемых базой Web of Science (из них 6 – в журнале K1, 1 – в журнале K2). Абсалямов Д.З. регулярно принимает участие в конференциях различного уровня, доклады были неоднократно отмечены дипломами на конференциях. Опубликовано 16 тезисов докладов, 14 из которых также включены в диссертацию.

Данное диссертационное исследование выполнено тщательно, на высоком и современном научном уровне, полученные результаты являются новыми и достоверными. Дамир Зайнуллович Абсалямов является квалифицированным специалистом в области теоретической физической и органической химии.

Считаю, что по своей научной квалификации, личному вкладу в проведенные научные исследования и совокупности опубликованных научных трудов Абсалямов Д.З. заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Научный руководитель:
д-р. хим. наук, профессор



/Н.М. Витковская/

Отзыв д-ра хим. наук,
проф. Витковской Н.М. заверяю:
Учёный секретарь ФГБОУ ВО «ИГУ»



/Н.Г. Кузьмина/

