

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

о Бобкове Александре Сергеевиче, соискателе ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, представляющем диссертационную работу «Квантовохимическое моделирование механизмов сборки аннелированных гетероциклических систем с пиррольным ядром в суперосновной среде КОH/DMSO»»

Александр Сергеевич Бобков занимается научной работой в лаборатории квантовой химии Иркутского государственного университета, начиная с 2014г. со 2-го курса бакалавриата химического факультета. Бобков А.С. в 2018 г. с отличием окончил магистратуру химического факультета ИГУ и в этом же году поступил в очную аспирантуру ИГУ. Успехи Бобкова А.С. в обучении и в научных исследованиях неоднократно поддержаны стипендиями Президента РФ (2017 г., 2019 г., 2020 г.), Правительства РФ (2017 г., 2019 г., 2020 г.), Губернатора Иркутской области (2019 г.) и мэра г. Иркутска (2017 г.).

Бобков А.С. активно занимается научными исследованиями, и 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», выполняемом в лаборатории квантовой химии ИГУ и лаборатории квантовохимического моделирования молекулярных систем ИГУ. Александр Сергеевич был и является сейчас исполнителем грантов Минобрнауки, РФФИ и РНФ.

Актуальность представленной диссертационной работы обусловлена двумя моментами. Во-первых, она вносит вклад в развитие квантовохимических подходов к моделированию химических реакций. Во-вторых, на основании этих подходов теоретически доказаны механизмы основно-промотируемых сборок аннелированных циклических систем с пиррольным ядром, проявляющих выраженную биологическую активность и использующихся в качестве основы ряда лекарственных препаратов.

В диссертации на объектах, заявленных в работе, усовершенствованы и применены модели описания суперосновного центра, предложенные ранее сотрудниками лаборатории квантовой химии – анионная модель и модель с явным включением в расчет недиссоциированной молекулы щелочи и молекул растворителя КОH·*n*DMSO, *n*=1,5, а также оценена роль молекулы воды в реакциях винилирования. Проанализированные тепловые эффекты и активационные барьеры позволили не только представить, описать

