

**ОТЗЫВ  
РЕЦЕНЗЕНТА  
О ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЕ**

Студент: Абсалямов Дамир Зайнуллович

Тема: Квантовохимические методы и модели суперосновной среды при описании механизмов реакций ацетиленов с азот-содержащими реагентами

Факультет/институт: химический факультет

Кафедра: физической и коллоидной химии

Рецензент Ларионова Елена Юрьевна, начальник кафедры информационно-правовых дисциплин Восточно-Сибирского института МВД России, доцент, доктор химических наук

(Ф. И. О., место работы, должность, ученое звание, степень)

**ОЦЕНКА ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ**

№ п/п	Показатели	Оценки				
		5	4	3	2	*
1.	Актуальность тематики работы	+				
2.	Корректность постановки цели и задач исследования	+				
3.	Степень полноты обзора состояния вопроса		+			
4.	Уровень и корректность использования в работе методов исследований, математического моделирования, расчетов	+				
5.	Степень комплексности работы, применение в ней знаний общепрофессиональных и специальных дисциплин	+				
6.	Ясность, четкость, последовательность и обоснованность изложения, владение профессиональной терминологией и языком научного исследования	+				
7.	Логичность и полнота обсуждения результатов исследования	+				
8.	Качество оформления ВКР (общий уровень грамотности, стиль изложения, качество иллюстраций, соответствие требованиям к ВКР)		+			
9.	Объем и качество выполнения иллюстративного материала, его соответствие тексту					
10.	Обоснованность и доказательность выводов работы	+				
11.	Оригинальность и новизна полученных результатов, научно-исследовательских или производственно-технологических решений	+				

\*- не оценивается (трудно оценить)

Основная цель выпускной квалификационной работы Абсалямова Дамира Зайнулловича заключается в установлении методами квантовой химии механизмов реакций первичных аминов, кетиминов и гидразонов с ацетиленами в суперосновных средах  $\text{KOH}(\text{KOBu}^t)/\text{DMSO}$ .

**Актуальность** представленной на рецензию работы определяется перспективностью исследуемых сложных органических циклических и ациклических молекул, включающих в свой состав гетероатом, имеющих высокую биологическую активность. Такие соединения являются прекурсорами для построения химических соединений, обладающих антибактериальной, противовоспалительной, противогрибковой, противовирусной, противораковой и антиоксидантной функцией.

Исследование выполнено **при поддержке ряда грантов и финансовой поддержке** Минобрнауки РФ:

- проектной части государственного задания №4.1671.2017/4.6 Министерства образования и науки РФ;
- грантом Министерства науки и высшего образования №FZZE–2020–0025;
- гранта РФФИ № 18-03-00573а;
- финансовой поддержке ИрИХ СО РАН в рамках конкурса молодых учёных.

Согласно представленному содержанию, работа состоит из введения, основной части, включающей литературный обзор и обсуждения результатов исследований, выводов и списка использованных источников. Работа изложена на 82 страницах машинописного текста, содержит 40 рисунков, 40 схем и 5 таблиц. Список использованных источников включает 62 наименования.

В литературном обзоре очень кратко рассмотрен вопрос об особенностях протекания изучаемых реакций в присутствии супероснований, и основное внимание уделено квантовохимическим методам и подходам. Основные результаты работы представлены в п.2 основной части работы.

Наиболее **значимыми результатами**, которые несомненно относятся к **достоинствам** выпускной квалификационной работы, являются:

- установлено, что отсутствие продуктов *C*-винилирования кетиминов фенилацетиленом связано с высокой кислотностью фенилацетилена в суперосновной среде, а также низкой устойчивостью карбаниона кетимина, который должен запускать реакцию;
- показано, что при взаимодействии гидразона с фенилацетиленом реакция этинилирования затруднена из-за высокого барьера активации и низкой устойчивости продукта реакции, при этом предпочтительной оказывается реакция *N*-винилирования ввиду образования термодинамически выгодного аниона гидразона;
- установлен механизм каскадной самосборки *N*-фенил-2,5-диметилпиррола из трех молекул ацетилена и одной молекулы анилина, в котором наиболее вероятным маршрутом образования искомого пиррола оказывается последовательное взаимодействие трёх молекул ацетилена с молекулой анилина;
- показано, что реакция запускается взаимодействием анилина с ацетиленом, а лимитирующим оказывается этинилирование *N*-бут-3-ин-2-ил-анилина этинид-ионом.

**Замечания:**

- в представленном литературном обзоре в большей степени обсуждаются квантовохимические подходы, и совсем не рассматриваются результаты экспериментальных и теоретических исследований заявленных в работе реакций взаимодействия первичных аминов, кетиминов и гидразонов с ацетиленами в суперосновных средах  $\text{KOH}(\text{KOBu}^t)/\text{DMSO}$ ;
- имеются незначительные ошибки с качеством оформления ВКР.

**Вопросы по выпускной квалификационной работе.**

Вывод: Проведённые квантовохимические исследования показывают значимость теоретических изысканий в проблемах органической химии. Для полноты понимания хи-

мических процессов, являющихся одnoreакторными, атом-экономными, ресурсо- и энергосберегающими, необходимо детальное исследование механизмов реакций, осуществляющихся в этих процессах. Использование современных технологий позволяет не только объяснить уже полученные экспериментальные данные, но и предсказать направление ещё не осуществленных реакций.

**Вопрос:** Какие результаты расчетов впоследствии получили экспериментальное подтверждение?

**Вывод:** Осуществлено моделирование моносольватной модели MONO<sub>PCSM</sub>, которая включает в себя явный учёт одной молекулы щёлочи и одной молекулы растворителя. Показано, что оптимизация структурных параметров в рамках IEFPCSM находится в согласии с более полной моделью PENTA<sub>GAS</sub>.

**Вопрос:** Что Вы понимаете под более полной моделью PENTA<sub>GAS</sub>, и чем она отличается от традиционной?

Материал выпускной квалификационной работы изложен грамотным научным языком. Материалы работы представлены подробно и наглядно. Общие выводы обоснованы и логичны.

Выпускная квалификационная работа работы Абсалямова Дамира Зайнулловича на тему «Квантовохимические методы и модели суперосновной среды при описании механизмов реакций ацетилена с азот-содержащими реагентами» является научно-исследовательским трудом, выполненным на высоком научном уровне, заслуживает оценки «отлично», а её автор присуждения квалификации магистра по направлению «Химия».

Рецензент д-р хим. наук, доц.



Ларионова Е.Ю.

«15» июня 2020 г.