

Отзыв на автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук Тугульдуровой Веры Петровны на тему «Теоретическое и экспериментальное определение механизмов реакций моно- и дикарбонильных соединений с аммиаком»

Диссертационная работа Тугульдуровой В.П. посвящена исследованию механизмов трехкомпонентной реакции аммиака с альдегидами и глиоксалем, приводящей к замещенным имидазолам. Несмотря на простоту исходных веществ и продуктов, механизм этой реакции до сих пор остается недостаточно изученным, и нет однозначного мнения о ее промежуточных продуктах. Вместе с тем, замещенные имидазолы играют важную роль в производстве фармацевтических препаратов и современных материалов. Детальное описание механизма реакции позволило бы управлять селективностью процесса, обоснованно выбирать оптимальные условия его проведения. В связи с этим работа Тугульдуровой Веры Петровны, посвященная теоретическому и экспериментальному изучению реакции синтеза имидазолов, является актуальной.

Автором работы путем анализа ППЭ конденсации аммиака с альдегидами и глиоксалем были выявлены преобладающие пути образования замещенных имидазолов. Впервые было установлено, что более вероятными интермедиатами данной реакции являются аминные, а не иминные соединения.

Достоверность полученных результатов подтверждается согласованностью теоретических и экспериментальных данных.

По содержанию автореферата имеются **замечания**:

1. В автореферате приводится выбранный уровень теории V3LYP-D3/6-311G(d,p), хотелось бы увидеть аргументы в пользу выбранного функционала и базисного набора, проводилось ли сравнение разных моделей. В частности, добавление диффузионных функций могло бы улучшить точность расчетов, поскольку в рассматриваемых реакциях играют роль неподеленные пары электронов на атомах азота.

2. На рисунке 4 приводятся барьеры превращений, однако в автореферате нет никакой информации о переходных состояниях, которые этим барьерам соответствуют.

Указанные замечания не ставят под сомнение достоверность полученных результатов и сделанных выводов. Диссертация отвечает требованиям пп. 9-11, 13, 14 Положения о присуждении ученых степеней (утверждено Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842 в действующей редакции), а ее автор, Тугульдурова Вера Петровна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

доктор химических наук, доцент
ведущий научный сотрудник лаборатории
металл-органических координационных полимеров
ФГБУН «Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева» Сибирского отделения
Российской академии наук

Потапов Андрей Сергеевич

4.09.2022

630090 г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 3
Тел. +7-381-45, e-mail: av@niic.nsc.ru

Подпись А.С. Потапова заверяю
Ученый секретарь ИНХ СО РАН, д.х.н.

О.А. Герасько

