

**Отзыв на автореферат диссертации  
Ахметьяновой Альбины Ильшатовны**

на тему «Теоретико-графовый подход моделирования гомодесмотических реакций для расчета стандартной энтальпии образования органических соединений», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия

Наилучшее решение для разработки химико-технических процессов возможно только при наличии достоверной информации о физико-химических и термодинамических свойствах химических соединений. Анализируя автореферат Ахметьяновой А.И. ясно, что диссертант избрал актуальную тему, связанную с расчетом стандартной энтальпии образования органических соединений с теоретико-графовой интерпретацией моделирования гомодесмотических реакций, которая является принципиально новым решением задач определения термодинамических свойств органических соединений.

Актуальной задачей является разработка теоретических методов расчета и прогнозирования свойств химических соединений, позволяющих самостоятельно оценивать энергосодержание вещества, выявлять недостоверные данные и определять тепловые эффекты химических реакций.

В данное время актуален вопрос экономии ресурсов, поскольку проведение экспериментов для нахождения энергетических характеристик химических соединений является довольно затратным.

Разработанный Ахметьяновой Альбиной Ильшатовной метод конструирования базиса гомодесмотических реакций органических соединений на основе теоретико-графовой интерпретации, а также реляционная база данных, содержащая информацию о строении молекул, энергетических характеристиках органических соединений и квантово-химических методах расчета представляют ценность проведенного исследования.

Очевидным преимуществом предложенного метода является проделанный сравнительный анализ квантово-химических методов расчета стандартной энтальпии образования органических соединений, что позволяет преодолеть неоднозначность при выборе гомодесмотических реакций. Сконструирован алгоритм нахождения базиса гомодесмотических реакций. Предложенный автором алгоритм конструирования базисного набора гомодесмотических реакций основан на анализе графа связи внутренних групп исследуемого химического соединения. Автором отмечено, что для циклических соединений применены квантово-химические методы более высокой точности для оценки стандартной энтальпии образования G3 и G4.

Результатом диссертационной работы является математическое и программное обеспечение задачи определения базиса гомодесмотических реакций (ГДР) для органических соединений. Определение базиса ГДР позволяет осуществлять независимые оценки, проверять воспроизводимость расчетной величины, отсеивать недостоверные данные и, в конечном счете, повышать надежность теоретического определения энергетических характеристик. Несомненным плюсом программного обеспечения является возможность добавления новых квантово-химических методов, возможность дополнения новым органическим соединением для исследований.

Результаты диссертационной работы Ахметьяновой Альбины Ильшатовны апробированы. По теме диссертации автором опубликовано 43 научные публикации, из которых 5 статей в международных базах данных Web of Science и Scopus, 2 статьи в

рецензируемых научных журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссии Российской Федерации, 2 статьи в отечественном издании, которое входит в международные реферативные базы данных и системы цитирования (RSCI), 4 статьи в журналах, входящих в РИНЦ; а также 5 свидетельств о регистрации электронных ресурсов, 25 работ в трудах международных и всероссийских конференций.

В целом положительно оценивая большой объем проделанной соискателем работы, следует выделить небольшие недостатки: На странице 8 указано, что количество всех гомодесмотических реакций рассчитывается по формуле (1), но не описан алгоритм появления данной формулы. Для молекул 4-метилциклопентена и 1-метилциклопентена не приведены результаты расчета стандартной энтальпии образования по всем гомодесмотическим реакциям.

Отмеченные замечания не затрагивают основные выводы работы. Работа, проведенная Ахметьяновой Альбиной Ильшатовной является хорошо структурированной, целостной.

На основании анализа автореферата диссертации считаю, что диссертация Ахметьяновой Альбиной Ильшатовной «Теоретико-графовый подход моделирования гомодесмотических реакций для расчета стандартной энтальпии образования органических соединений» представляет собой актуальную, обоснованную по научным результатам и выводам научно-квалификационную работу, соответствует требованиям пп. 9 – 14 Положения «О порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 и Высшей аттестационной комиссии Российской Федерации, а автор диссертации – Ахметьянова Альбина Ильшатовна – заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.

Доктор химических наук по специальности  
02.00.03 – органическая химия, профессор,  
Член-корреспондент Академии наук  
Республики Башкортостан  
Академик-секретарь отделения химических  
технологий и новых материалов  
Академии наук Республики Башкортостан

Почтовый адрес:  
450008, Россия, г. Уфа, ул. Кирова, д. 15  
Телефон: +7(347) 272-78-47  
E-mail: [dokichev@anrb.ru](mailto:dokichev@anrb.ru)

Даю согласие на обработку персональных данных.

**Почтовый адрес:**

450008, Россия, г. Уфа, улица Кирова, дом 15;  
телефон: +7(347) 272-78-47; e-mail: [dokichev@anrb.ru](mailto:dokichev@anrb.ru)

  
Владимир Анатольевич



Подпись *Докичева В. А.*

Заверяю: *И. С. Степанова ИИ РБ*  
*Самматов А. Ф.*  
24.11.2023