

**ОТЗЫВ**  
**научного руководителя, доцента, кандидата химических наук**  
**Севостьяновой Надежды Тенгизовны**  
**на диссертационную работу Демерлия Антона Михайловича**  
**на тему: «Кинетические закономерности и моделирование реакций**  
**гидрокарбометоксилирования алкенов»,**  
**представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по**  
**специальности 02.00.04 – Физическая химия**

Диссертационная работа Демерлия Антона Михайловича посвящена исследованию кинетических закономерностей гидрокарбометоксилирования циклогексена и октена-1. Гидрокарбалкокислирование представляет практический интерес, поскольку позволяет получать разнообразные сложные эфиры одностадийным синтезом из ненасыщенных соединений, оксида углерода (II) и спиртов. Образующиеся сложные эфиры имеют широкие области применения – как полупродукты в синтезе лекарственных субстанций, агрохимические препараты, добавки к полимерам и присадки к различным видам топлив. В этой связи тема диссертации Демерлия А.М. является актуальной. Использование палладиевых катализаторов, промотированных свободными органофосфинами и сильными протонными кислотами, позволяет проводить гидрокарбалкокислирование алкенов в мягких условиях с высокими выходами и селективностью. На сегодняшний день опубликовано большое количество работ по гидрокарбалкокислированию ненасыщенных соединений. Описанные исследования были посвящены главным образом проблеме увеличения выхода целевого продукта гидрокарбалкокислирования, изучению механизма реакций и каталитических интермедиатов. Однако системы гидрокарбалкокислирования алкенов чрезвычайно сложны и по составу, и по характеру протекающих в них реакций, имеющих зачастую обратимый характер. Такие системы характеризуются большим разнообразием присутствующих в них палладиевых комплексов, в том числе «балластных», не выполняющих каталитической функции. Детальных исследований реакций гидрокарбалкокислирования, сопровождающихся определением активационных параметров и на их основе – термодинамических характеристик реакций образования «балластных» форм катализатора практически не проводилось. Описания кинетических моделей гидрокарбалкокислирования алкенов в литературе единичны, а описание моделей селективности вообще отсутствует. Однако моделирование процессов крайне необходимо для последующей разработки технологии получения химических продуктов. В диссертационной работе Демерлия А.М. поставлена цель – получить новые данные о закономерностях гидрокарбометоксилирования алкенов и термодинамической стабильности «балластных» форм палладия в условиях реакции, разработать кинетическую модель и модель селективности гидрокарбометоксилирования как необходимой основы для технологии одностадийного синтеза метилциклогексанкарбоксилата и метилпеларгоната в мягких условиях. Анализ большого массива литературных данных позволил А.М. Демерлию сформулировать задачи исследований по рассматриваемой теме.

Демерлий Антон Михайлович в 2010 году окончил государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого по специальности 050101 «Химия». С 2010 по 2013 год обучался в аспирантуре на базе Тульского государственного педагогического университета им. Л.Н. Толстого. С 2013 года А.М. Демерлий работает в ФБУ Тульская лаборатория судебной экспертизы Министерства юстиции РФ, являясь в настоящее время заведующим отделом криминалистической экспертизы материалов, веществ и изделий.

Диссертация Демерлия А.М. является законченной самостоятельной научно-исследовательской работой, содержащей результаты систематических исследований



закономерностей протекания гидрокарбалкоксилирования циклогексена и октена-1. В работе получена кинетическая модель гидрокарбометоксилирования циклогексена, работающая на всем протяжении реакции и обладающая прогностической функцией, оценены относительные энтальпии образования ряда «балластных» палладиевых форм в условиях гидрокарбометоксилирования, получена модель селективности гидрокарбометоксилирования октена-1 и разработан селективный синтез метилшелларгоната в мягких условиях.

Работа выполнена с привлечением физико-химических методов исследования и статистических методов обработки полученных данных, что позволило оценить точность и воспроизводимость результатов, доверительные интервалы рассчитанных констант и энергий активации и на этой основе сформулировать обоснованные выводы.

При выполнении исследований Демерлий А.М. проявил глубокие теоретические знания в области кинетики и термодинамики химических процессов, высокий уровень практических навыков проведения химического эксперимента и измерений с использованием физико-химических методов анализа, математической обработки данных и интерпретации установленных закономерностей на основании современных литературных данных. Работу Антона Михайловича отличали тщательность, внимание к деталям и аккуратность. Все перечисленные качества позволили ему разобраться в сложных вопросах кинетических закономерностей реакций гидрокарбометоксилирования циклогексена и октена-1.

Диссертационная работа Демерлия А.М. свидетельствует о том, что автор обладает аналитическим мышлением, системным подходом к решению многофакторных задач и способен самостоятельно планировать и осуществлять глубокие научные исследования. Это позволило ему успешно решить поставленные задачи, получить новые интересные и нетривиальные результаты, нашедшие свое выражение в опубликованных им работах, а также в их апробации на всероссийских и международных научных и научно-практических конференциях.

Считаю, что по уровню теоретической подготовки, умению давать обоснованную интерпретацию полученных результатов и владению техникой физико-химического эксперимента Демерлий А.М. заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Научный руководитель:  
старший научный сотрудник  
научно-производственного центра  
«Химреактивдиагностика»  
Федерального государственного бюджетного  
образовательного учреждения высшего образования  
«Тульский государственный педагогический  
университет им. Л.Н. Толстого»,  
кандидат химических наук, доцент

Почтовый адрес: 300026, г. Тула, пр. Ленина, 125.  
E-mail: sevostyanova\_nt@tspu.tula.ru; тел.: (4872)355906 доб. 2166



Н.Т. Севостьянова

07.12.2016г.

Севостьяновой Н.Т.  
заверяю. Начальник отдела  
делопроизводства и связи

В.И.И.