

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Логиновой Юлии Дмитриевны** «Квантово-химические расчеты реакций радикального присоединения к арилизонитрилам и изучение стереоэлектронных взаимодействий в стереохимически нежестких системах», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.3 (02.00.03) Органическая химия, 1.4.4 (02.00.04) Физическая химия

Изучение механизмов химических реакций является одной из ключевых задач современной химической науки. Важное значение имеет исследование радикальных процессов с участием гетероатомных ненасыщенных систем, открывающих подходы к получению ценных гетероциклических производных, моделирующих процессы, протекающие в живых системах.

В связи с этим, актуальность диссертационной работы Логиновой Ю.Д., посвященной изучению механизма радикального присоединения к арилизонитрилам с использованием методов квантово-химического моделирования, не вызывает сомнений. Об актуальности работы свидетельствует также поддержка исследований грантами РФФИ и РНФ.

Судя по автореферату, работа является хорошим примером торжества теоретической органической химии при объяснении стереоэлектронных закономерностей сложных радикальных процессов с участием гетероатомных радикалов и изонитрилов в сопоставлении с ацетиленовыми системами.

Автором описаны и изучены новые примеры влияния «стереоэлектронных хамелеонов» - заместителей, электронные эффекты которых зависят от их пространственного расположения. Объяснена способность изонитрильной группы выступать в роли как донора, так и акцептора электронной плотности. Полученные закономерности позволяют описывать, объяснять и предсказывать реакционную способность разнообразных органических и элементоорганических соединений.

Исследования выполнены с использованием современной методологии на самом высоком научном уровне, и, таким образом, представленные результаты не вызывают сомнений.

Без сомнения, автором проделана хорошая и достойная уважения работа, в результате которой проведен детальный анализ стереоэлектронных особенностей, определяющих ход взаимодействия арилизонитрилов с радикалами, детально изучены стереоэлектронные эффекты, описывающие динамическое поведение молекул, содержащих амидные, метоксильные группы и атомы галогенов, рассмотрены

межмолекулярные взаимодействия галогенарилсодержащих биспиридиновых лигандов с биологическими мишенями.

Работа в достаточной мере представлена в печати. По материалам диссертации опубликовано 3 статьи в ведущих международных журналах, в том числе с высочайшим импакт-фактором, сделано 7 докладов на конференциях высокого, в том числе международного, уровня. Автореферат красочно оформлен.

После ознакомления с материалами, представленными в автореферате, принципиальных замечаний, достойных упоминания в отзыве, не сформулировано.

Таким образом, диссертационная работа Логиновой Юлии Дмитриевны «Квантово-химические расчеты реакций радикального присоединения к арилизонитрилам и изучение стереоэлектронных взаимодействий в стереохимически нежестких системах» удовлетворяет всем требованиям Положения о совете по защите диссертаций и Положения о присуждении ученых степеней в ФГБОУ ВО РХТУ им. Д.И. Менделеева. Представляемая работа соответствует специальностям 1.4.3 Органическая химия и 1.4.4 Физическая химия, а ее автор **Логинова Юлия Дмитриевна**, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по указанным специальностям.

«17» марта 2022 г

Отзыв составил:

доктор химических наук по специальности 02.00.03 Органическая химия,
доцент по специальности 02.00.03 Органическая химия,
заместитель директора по научной работе,
заведующий лабораторией галогенорганических соединений,
«Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Иркутский институт химии
им А.Е. Фаворского Сибирского отделения Российской академии наук

Почтовый адрес:

664033, г. Иркутск, ул. Фаворского, 1
ФГБУН ИрИХ им. А.Е. Фаворского СО РАН
Рабочий телефон: +7 (3952) 511434
Сотовый телефон +79500839870
e-mail: i_roz@iriokh.irk.ru

Розенцвейг Игорь Борисович

