

## 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 учёной степени кандидата химических наук  
по специальностям 1.4.3 – органическая химия и 1.4.4 – физическая химия

В последние годы все большее значение для органической химии приобретают квантово-химические расчёты структур и свойств реагирующих молекул. Полученные в ходе этих расчётов данные для рядов соединений различного строения позволяют не только объяснить тот или иной синтетический результат, но и выявить общие закономерности «структура – свойство», что имеет важное прогностическое значение. Одной из весьма интересных и важных как с теоретической, так и с практической точек зрения задач является выявление причин двойственной реакционной способности некоторых типов молекулярных систем и дихотомии электронных эффектов многих функциональных групп. Достаточно большое число функциональных групп, являющихся «донорными» либо «акцепторными» в рамках традиционных представлений, могут менять свои электронные свойства при изменении строения молекулы, в частности, при изменении конформации и конфигурации. Надо отметить, что этот факт весьма редко учитывается в литературе, несмотря на его фундаментальное значение. В последние годы необходимость глубокого понимания стереоэлектронных эффектов в планировании путей синтеза соединений с заранее определенными свойствами получила общее признание, и число публикаций в этой области быстро растет. Однако до сих пор общие принципы анализа таких эффектов при исследовании гетероатомных систем все ещё недостаточно развиты.

Исследование Логиновой Ю.Д. посвящено применению методов квантово-химического моделирования для изучения одного из важных путей синтеза *N*-гетероциклических соединений – реакции радикального присоединения к арилизонитрилам, а также выявлению влияния стереоэлектронных факторов и взаимодействий на кинетику, устойчивость, реакционную способность и межмолекулярное связывание конформационно нежестких соединений, содержащих такие фрагменты, как метокси-группа, галогены, амидные и аминокленильные заместители. Учитывая практическую значимость азотсодержащих гетероциклов, их важность для медицинской химии и органического материаловедения, а также растущую необходимость в создании новых методов их синтеза и более глубоком понимании существующих подходов, диссертационная работа Логиновой Ю.Д., безусловна, выполнена в весьма **актуальной области науки**.

Принципиальных вопросов к существу работы по прочтении автореферата диссертации Логиновой Ю.Д. не возникает. Тем не менее, имеются незначительные замечания:

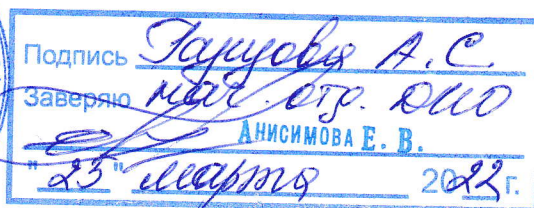
- 1) На стр. 11 автореферата, при обсуждении взаимодействия изонитрилов с различными радикалами, автор отмечает, что «Энергетические барьеры для радикалов типа  $\text{XMe}_3$  оказались заметно ниже, чем для *t*-Bu». К сожалению, при этом не приводятся какие-либо численные данные, позволяющие оценить величину этого снижения.
- 2) Чуть раньше, на стр. 10, отмечается что в случае *трет*-бутильного радикала «присоединение протекает быстрее всего». На мой взгляд, выражение «имеет самый низкий энергетический барьер» было бы более корректным, поскольку о кинетических экспериментах в автореферате речи не идёт.

Вышеуказанные замечания не влияют на общее благоприятное впечатление от работы. Диссертация Логиновой Юлии Дмитриевны «Квантово-химические расчеты реакций

радикального присоединения к арилизонитрилам и изучение стереоэлектронных взаимодействий в стереохимически нежестких системах» представляет собой законченное исследование, выполненное на высоком экспериментальном и теоретическом уровне. Автором опубликовано 3 статьи по теме диссертации в ведущих профильных журналах, работа прошла апробацию на научных конференциях, в том числе и международного уровня. Считаю, что представленная работа полностью соответствует требованиям п.2 «Положения о порядке присуждения ученых степеней в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева» (утвержденном Приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева № 1523ст от 17.09.2021) а её автор, Логинова Юлия Дмитриевна, вне всякого сомнения заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальностям 1.4.3 – органическая химия и 1.4.4 – физическая химия.

Ведущий научный сотрудник лаборатории элементоорганического синтеза им А.Н. Пудовика Института органической и физической химии им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук», доктор химических наук, 02.00.03 – органическая химия

Газизов Альмир Сабинович



Газизов Альмир Сабинович, доктор химических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории Элементоорганического синтеза им. А.Н. Пудовика Института органической и физической химии им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук», 420088, г. Казань, ул. Академика Арбузова, 8, e-mail: agazizov@iopc.ru, тел.: (843)272-73-24