

## 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 специальностям 02.00.03 – органическая химия и 02.00.04 – физическая химия

Диссертация Логиновой Ю.Д. посвящена квантово-химическим расчетам методом теории функционала плотности (DFT) конформаций, энергий, а также электронных и орбитальных характеристик различных свободнорадикальных интермедиатов и молекул, содержащих заместители с противоположными электронными донорно-акцепторными свойствами. Основная цель таких расчетов – найти объяснение различного донорно-акцепторного характера заместителей в зависимости от конформации или удаленности заместителя от реакционного центра.

Главное достижение работы заключается в найденной дихотомии функциональных групп и заместителей, проявляющих в одних реакциях электронодонорные свойства, а в других электроноакцепторные. Это такие группы, как метоксильная, трфторметилокси, галогены, амидная, аминоалкенильная. Логинова Ю.Д. называет их стереоэлектронными хамелеонами. С помощью DFT расчетов показано, что электронный эффект таких групп может меняться в зависимости от их конформации, это – конформационные хамелеоны. Или от места расположения группы относительно реакционного центра, это – трансляционные хамелеоны.

Следует признать, что данная работа вносит весомый вклад в физическую органическую химию. Результаты работы существенно расширяют представления о донорах и акцепторах, с учетом электронных и орбитальных свойств отдельных атомов и групп атомов, входящих в состав тех или иных заместителей и молекул.

Работа прошла серьезную апробацию: опубликовано 3 статьи в международных научных химических журналах. Результаты исследований доложены в виде 7 докладов на всероссийских и международных конференциях.

По автореферату диссертации имеется следующее замечание. Видимо, не весь полученный автором диссертации материал представлен в автореферате. В ряде мест в автореферате указано, что в тексте диссертации рассмотрено ещё то-то и то-то, например, на стр. 14 автореферата в конце 2-го абзаца. Нужно было полнее представить в автореферате результаты полученные в этой работе.

Сделанное замечание ни в коей мере не умаляет достоинства этой актуальной, интересной и объемной диссертации. Автор работы, Логинова Юлия Дмитриевна, безусловно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.03 – органическая химия и 02.00.04 – физическая химия.

Директор института химической переработки биомассы дерева и техносферной безопасности Санкт-Петербургского государственного лесотехнического университета, профессор, доктор химических наук по специальности 02.00.03 – органическая химия

СПбГЛТУ, 194021, Санкт-Петербург, Институтский пер., д. 5;  
телефон: +7(812) 6709352; e-mail: aleksvasil@mail.ru

