

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы 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 02.00.03 (1.4.3) Органическая химия, 02.00.04 (1.4.4) Физическая
химия.

Теоретическое описание стереоэлектронных свойств гетероатомных соединений с привлечением современных методов квантовой химии и компьютерного моделирования, безусловно, является актуальным направлением научных исследований, поскольку позволяет не только объяснить поведение молекул в ходе химических реакций, но и заранее предсказать пути осуществления химических превращений.

Научная новизна диссертационного исследования Логиновой Ю.Д. заключается во всестороннем анализе и выявлении сложных зависимостей между особенностями строения, как электронными, так и геометрическими, молекулы - «стереоэлектронного хамелеона», слабыми межмолекулярными взаимодействиями и путями протекания процессов радикального типа, что определяет и несомненную практическую значимость работы.

Задачи, поставленные в диссертации, были полностью выполнены, что позволило получить ценные фундаментальные научные результаты в области синтеза органических и элементоорганических соединений, представленные в научных журналах высокого уровня (3 статьи), а также на всероссийских и международных конференциях.

Представленная в автореферате диссертационная работа Логиновой Юлии Дмитриевны является самостоятельной, законченной научно-квалификационной работой, выполненной с помощью современных методов исследований и имеющей важное научно-практическое значение для органической и физической химии. Диссертационная работа Логиновой Юлии Дмитриевны «Квантово-химические расчеты реакций радикального присоединения к арилизонитрилам и изучение стереоэлектронных взаимодействий в стереохимически нежестких системах» является завершённой научно-квалификационной работой и соответствует всем требованиям п. 2 «Положения о порядке присуждения учёных 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 ее автор, Логинова Юлия Дмитриевна, безусловно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.03 (1.4.3) – Органическая химия и 02.00.04 (1.4.4) – Физическая химия

Демина Надежда Сергеевна,
кандидат химических наук по специальности 1.4.3. Органическая химия
младший научный сотрудник лаборатории перспективных органических материалов
ФГБУН «Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН»

Адрес: 620108, г. Екатеринбург, ул. Софьи К
Телефон: +7 (343) 369-30-58
E-mail: nsd@ios.uran.ru

«21» марта 2022

Подп
Завед
Учен
к.т.н

Демина Надежда Сергеевна

д. 22/20

ИОС УрО РАН,
О.В. Красникова

22