

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Семенова Валентина Александровича «Квантово-химические расчеты химических сдвигов ЯМР ^{15}N в структурных исследованиях азотсодержащих гетероциклов», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.03 – органическая химия.

Спектроскопия ЯМР в сочетании с современными высокоточными квантово-химическими расчетами составляет важнейшую часть комплекса физико-химических методов исследования пространственного и электронного строения органических и биоорганических молекул.

Диссертационная работа В.А. Семенова посвящена исследованию стереоэлектронного строения, таутомерии и протонирования азотсодержащих гетероциклов современными методами спектроскопии ЯМР на ядрах ^{15}N и квантовой химии, а также разработке эффективных методик высокоточного квантово-химического расчета химических сдвигов ЯМР ^{15}N в целях их использования в структурных исследованиях азотсодержащих гетероциклов.

Актуальность работы заключается, в частности, в том, что точные знания о химических сдвигах ЯМР ^{15}N позволяют приблизиться к пониманию особенностей внутри- и межмолекулярных взаимодействий с участием атомов азота в востребованных в фармакологии азотсодержащих соединениях.

Автором проведен максимально полный анализ факторов, влияющих на точность квантово-химических расчетов, где значительное внимание посвящено вопросу учета эффектов специфической и неспецифической сольватации на масштабной статистической выборке азотсодержащих гетероциклов (27 соединений, в 10 растворителях каждое). Кроме того, особое внимание в работе уделено изучению эффектов протонирования атомов азота в химических сдвигах ЯМР ^{15}N , а также исследованию енамино-иминной таутомерии методами спектроскопии ЯМР ^{15}N и квантово-химических расчетов. Решение поставленных задач Семеновым В.А. проведено на высоком теоретическом уровне, квантово-химические расчеты выполнены на современных компьютерных вычислительных комплексах.

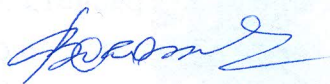
Научная обоснованность и достоверность результатов работы подтверждаются хорошим согласием полученных результатов теоретического квантово-химического расчета с экспериментальными данными.

Результаты исследований Семенова В.А. опубликованы в авторитетных научных журналах и доложены на Международных и Всероссийских научных конференциях. Полученные выводы диссертационной работы Семенова В.А. полностью соответствуют поставленным задачам. Все результаты новые, не имеющие аналогов в мировой литературе.

Считаю, что диссертационная работа Семенова Валентина Александровича как по объему проведенных исследований, так и ценности полученных научных результатов соответствует требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, несомненно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.03 – органическая химия.

Ведущий научный сотрудник
лаборатории ЯМР спектроскопии Института физики

д.х.н., профессор



Клочков Владимир Васильевич

ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет»,
420008, г. Казань, ул. Кремлевская, 18.
тел. (8-843)-233-70-12,
e-mail: Vladimir.Klovchov@kpfu.ru

11 апреля 2016 г.

Подпись Клокова В.В.
Спец. по 11

