

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

Азотсодержащие органические соединения по праву можно считать основополагающими веществами, которые определяют существование жизни на Земле. В жизненных процессах особое место принадлежит азотсодержащим гетероциклическим соединениям. Не случайно огромное число фармацевтических препаратов содержат в своем составе азотистые гетероциклы. Постоянно расширяется и техническое применение многих производных пиридина, пиррола и других соединений. Однако разработка новых лекарственных препаратов и средств химизации сельского хозяйства на базе азотистых гетероциклов требует детального определения структуры применяемых соединений, что возможно только при проведении комплексных исследований. Следует учитывать, что последние десятилетия характеризуются широким проникновением квантово-химических расчетов в структурные исследования. Таким образом, учитывая, с одной стороны, важность проведения исследований молекулярной структуры азотистых гетероциклов и, с другой стороны, широкие возможности квантово-химических расчетов, следует считать представленную работу Семенова В.А. актуальной и своевременной. Это подтверждается поддержкой исследований в данном направлении грантами РФФИ и Российского научного фонда.

Автором удачно выбраны как молекулярные объекты исследования, так и эффективные методы расчета химических сдвигов. При этом выбор необходимых функционалов и базисных наборов был осуществлен путем тестирования большого числа функционалов в сочетании с различными базисными наборами.

На наш взгляд, ключевым моментом диссертации Семенова В.А. является учет сольватационных эффектов, то есть учет влияния растворителя на экранирование ядер азота в спектрах ЯМР ^{15}N . Применяемые до исследований Семенова В.А. модели учета влияния растворителя на точность квантово-химических расчетов, например, при оценке реакционной способности, не могут быть однозначно перенесены на расчет параметров спектров ЯМР. Поэтому автором было проведено исследование, которое включает и рассмотрение расчетных подходов и моделей учета сольватации. Сделанный автором вывод о применимости предлагаемых подходов хорошо обоснован. Следует учитывать также тот факт, что конкретно для своих соединений автор детально рассматривает вопросы специфической сольватации. Ясно, что эта проблема касается не только квантово-химических расчетов параметров спектра, но и применима при расчете других характеристик молекул.

Важным разделом диссертации является изучение процессов протонирования азотистых соединений с различной гибридизацией атома азота. Конечно, большой интерес представляет сдвиг сигнала протонированного азота пиридина в сильное поле. Этот факт получил надежную интерпретацию, в которой учитывается экранирующее влияние неподеленной пары атома азота.

Полученные результаты и выводы хорошо обоснованы с учетом большого и экспериментального, и расчетного материала. Результаты широко представлены в научной печати в журналах высокого уровня.

Существенных замечаний по работе Семенова В.А. не обнаружено. Можно лишь отметить, что термин «супермолекула» для полисольватированной структуры не совсем удачный, так как термин «молекула» применим к конкретным соединениям, большинство из которых подчиняется закону постоянства состава. На наш взгляд может быть более удачным употребление термина «суперсольват» или «суперкомплекс».

Подводя итог отзыву, можно однозначно сказать, что диссертация Семенова В.А. по актуальности, научной новизне и практической значимости полученных результатов, по их достоверности и представлению в научной печати соответствует требованиям пункта 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Автор работы достоин присуждения ученой степени к.х.н. по специальности 02.00.03–органическая химия.

Профессор кафедры «Техносферная безопасность»
доктор химических наук, доцент

Руссавская
Наталья
Владимировна

ФГБОУ ВО «Иркутский государственный университет
путей сообщения», ул. Чернышевского, 15, Иркутск,
664074

тел. (3952)31-66-41

e-mail: rusnatali64@yandex.ru

14 апреля 2016 г.

