

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

комиссии диссертационного совета Д 003.052.01 по предварительному рассмотрению диссертации Семенова Валентина Александровича на тему "Квантово-химические расчеты химических сдвигов ЯМР  $^{15}\text{N}$  в структурных исследованиях азотсодержащих гетероциклов", представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.03 - органическая химия

Комиссия диссертационного совета Д 003.052.01 на своем заседании от 26 февраля 2016 г. рассмотрела диссертацию Семенова Валентина Александровича на тему "Квантово-химические расчеты химических сдвигов ЯМР  $^{15}\text{N}$  в структурных исследованиях азотсодержащих гетероциклов" и пришла к выводу, что:

1) тема диссертации и ее содержание соответствуют специальности 02.00.03 - органическая химия (химические науки);

2) материалы диссертации достаточно полно изложены в 16 работах автора, в том числе в 6 статьях в рецензируемых научных журналах:

1. Чернышев К.А., Семенов В.А., Кривдин Л.Б. Квантовохимические расчеты химических сдвигов ЯМР органических молекул. VIII. Эффекты сольватации в значениях химических сдвигов  $^{15}\text{N}$  азотистых гетероциклов // Журн. орг. хим. – 2013. – Т. 49, Вып. 3. – С. 392-397.

2. Samultsev D.O., Semenov V.A., Krivdin L.B. On the accuracy of the GIAO-DFT calculation of  $^{15}\text{N}$  NMR chemical shifts of the nitrogen-containing heterocycles – a gateway to better agreement with experiment at lower computational cost // Magn. Reson. Chem. – 2014. – V. 52, № 5. – P. 222-230.

3. Семенов В.А., Самульцев Д.О., Кривдин Л.Б. Квантовохимические расчеты химических сдвигов ЯМР органических молекул. XIII. К вопросу о точности расчета химических сдвигов ЯМР  $^{15}\text{N}$  с учетом эффекта сольватации // Журн. орг. хим. – 2014. – Т. 50, Вып. 3. – С. 392-399.

4. Semenov V.A., Samultsev D.O., Krivdin L.B. Solvent effects in the GIAO-DFT calculations of the  $^{15}\text{N}$  NMR chemical shifts of azoles and azines // Magn. Reson. Chem. – 2014. – V. 52, № 11. – P. 686-693.

5. Semenov V.A., Samultsev D.O., Krivdin L.B. Theoretical and experimental study of  $^{15}\text{N}$  NMR protonation shifts // Magn. Reson. Chem. – 2015. – V. 53, № 6. – P. 433-441.

6. Semenov V.A., Samultsev D.O., Rulev A.Yu., Krivdin L.B. Theoretical and experimental  $^{15}\text{N}$  NMR study of enamine–imine tautomerism of 4-trifluoromethyl- [b]benzo-1,4-diazepine system // Magn. Reson. Chem. – 2015. – V. 53, № 12. – P. 1031-1034.

3) публикации основных научных результатов диссертации соответствуют требованиям пунктов 11 и 13 "Положения о присуждении ученых степеней", утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г.

4) диссертация отвечает требованиям пункта 14 "Положения о присуждении ученых степеней", утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., и не содержит заимствованных материалов и результатов без ссылок на авторов и источник заимствования. В диссертации отмечен факт использования научных работ, выполненных Семеновым В.А. в соавторстве с Кривдиным Л.Б., Самульцевым Д.О., Чернышевым К.А., Рулевым А.Ю. и др.

На основании вышеизложенного комиссия рекомендует диссертационному совету Д 003.052.01 принять к защите диссертацию Семенова Валентина Александровича на тему "Квантово-химические расчеты химических сдвигов ЯМР  $^{15}\text{N}$  в структурных исследованиях азотсодержащих гетероциклов" на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.03 - органическая химия (химические науки).

Председатель комиссии  
д.х.н., профессор



Афонин А.В.

член комиссии  
д.х.н., профессор



Шаинян Б.А.

член комиссии  
д.х.н.



Шмидт Е.Ю.