

О Т З Ы В

на автореферат диссертации В. А. Семенова
"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 соединения входят в состав большого числа природных и синтетических соединений, обладающих фармакологической активностью. Естественно, что в органической химии достаточно актуальными являются вопросы изучения строения и стереохимических свойств гетероциклических соединений с различными функциональными группами, выявление основных межмолекулярных закономерностей «спектр-структура». прогнозировать спектральное поведение соединений при целенаправленном синтезе. В этом плане расчет химических сдвигов в спектрах ЯМР является достаточно актуальной задачей.

Целью диссертационной работы явилось систематическое исследование и разработка методики квантово-химического расчета химического сдвига в растворах с привлечением самых современных функционалов и базисных наборов.

Выбор ЯМР-спектроскопии в качестве основного метода исследования представляется удачным, так как химические сдвиги в значительной степени зависят от эффекта среды.

Основные научные и практические результаты диссертационной работы можно свести к следующим обобщениям.

Автором впервые разработана новая методология расчета химических сдвигов для серии гетероциклических соединений. При этом в рамках теории функционала плотности использованы ЯМР-ориентированные функционалы, применен локально плотный базисный набор, выбрано оптимальное эталонное соединение CH_3NO_2 . Систематизированы спектроскопические результаты, дающие возможность интерпретировать стереохимические особенности гетероциклических соединений и прогнозировать спектральное поведение полифункциональных соединений.

Впечатляет квалифицированное применение квантово-химических расчетов, в частности использование функционала Кила-Тозера в сочетании с базисными наборами Йенсена. Представляет значительный интерес учет влияния растворителя в сольватной модели супермолекулы.

Необходимо отметить, что стандартный расчет химических сдвигов в ЯМР-спектроскопии основан на функционале B3LYP и базисе 6-311+G(2d,p). Однако расчете химических

сдвигов гетероциклических соединений приводит к 50% и более погрешности с учетом реакционной среды.

Материалы диссертационной работы публиковались в изданиях, доступных специалистам и известны (особенно это относится к блестящим публикациям в журнале *Magnetic Resonance in Chemistry*), а также докладывались на российских и международных конференциях.

Судя по автореферату, диссертационная работа является законченным исследованием, вносит фундаментальный вклад в квантовую, органическую химию и спектроскопию ЯМР.

Считаю, что научная и практическая значимость работы, новизна и объем проведенных исследований позволяют считать, что диссертация Семенова В. А. соответствует требованиям ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а её автор заслуживает присуждения ему степени кандидата химических наук по специальности органическая химия.

Профессор кафедры химии и методики
обучения химии Томского
государственного педагогического
университета, доктор химических наук,
проф., Академик РАЕ

О. Х. Полещук

Подпись удостоверяю



ЗАМЕСТИТЕЛЬ НАЧАЛЬНИКА
УПРАВЛЕНИЯ КАДРОВ

М.А. ХАУСТОВА

12.04.16г