

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Бородиной Ольги Сергеевны «Теоретическая оценка стереоселективности реакций с участием хиральных подандов на основе 4-гидроксипролина», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия

Работа Бородиной О.С. посвящена теоретической разработке вопросов, связанных с изучением асимметрических синтезов и исследованию стереоселективности стадий реакций с использованием методов квантовой химии и молекулярной динамики. Актуальность работы тесно связана с запросами современной фармакологической химии к энантимерно чистым веществам. Изучение факторов стереоселективности важно и с фундаментальной, и с практической точки зрения. Поставленные в работе задачи непосредственно направлены на поиск стереодифференцирующих факторов реакции Биджинелли с участием хиральных индукторов на основе 4-гидроксипролина.

В ходе исследования произведен конформационный анализ молекул хиральных подандов, разработана методика моделирования образования предреакционных состояний в растворе, рассмотрена реакционная способность участников реакции и оценены барьеры реакции для стереоизомеров. В работе представлено теоретическое обоснование соотношения вкладов разных стадий реакции в итоговый энантиомерный состав продуктов. Автореферат диссертации написан четко и ясно, содержит информативный иллюстрационный материал.

Диссертационная работа Бородиной О.С. «Теоретическая оценка стереоселективности реакций с участием хиральных подандов на основе 4-гидроксипролина» отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, ее содержание соответствует специальности 1.4.4 – физическая химия. Диссертационная работа Бородиной О.С. соответствует требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г., в ред. от 18.03.2023, а её автор, Бородина Ольга Сергеевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Профессор кафедры физической химии химического факультета МГУ,
профессор РАН, доктор физико-математических наук
(02.00.17 – математическая и квантовая химия)

Хренова Мария Григорьевна

02.09.2024

ФГБОУВО «Московский государственный университет
имени М.В.Ломоносова»

Адрес: 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1

Тел: +7(495)9328824

E-mail: khrenovamg@my.msu.ru



Паланская В. В.