

Отзыв на автореферат диссертации на соискание степени кандидата химических наук Бородиной Ольги Сергеевны на тему «Теоретическая оценка стереоселективности реакций с участием хиральных подандов на основе 4-гидроксипролина»

Азотсодержащие гетероциклы активно применяются для дизайна новых лекарственных препаратов. В этом контексте производные пиримидина представляют особый интерес, так как они могут обладать самыми разными фармакологическими свойствами, такими как противоопухолевая, антибактериальная, противовирусная, антигипертензивная и антиаритмическая активности и многими другими. Однако, важно понимать, что для медицинского применения должны быть разработаны экономически целесообразные подходы для синтеза целевых гетероциклических соединений с высокими энантиомерным избытком.

Работа Ольги Сергеевны Бородиной посвящена исследованию реакций получения хиральных дигидропиримидинонов (реакция Биджинелли) с использованием разнообразного инструментария современной теоретической химии. К наиболее важным результатам, полученным Ольгой Сергеевной, стоит отнести следующие. Во-первых, это демонстрация стереонаправляющей роли водородных связей, образованных между подандом и бензальдегидом. Во-вторых, обнаружение закономерностей между структурой поданда и механизмом реакции.

Автореферат хорошо структурирован и оформлен, что позволило создать полное впечатление о работе Ольги Сергеевны. Проведённое Ольгой Сергеевной исследование отличается оригинальностью в постановке задачи и выборе методов. Стоит отдельно отметить основательный подход автора к анализу полученных результатов. Таким образом, можно заключить, что диссертационное исследование Ольги Сергеевны представляет собой завершённую научную работу высокого уровня. Это подтверждается наличием у автора пяти публикаций в журналах WOS\Scopus, а также многочисленными выступлениями на конференциях всероссийского и международного уровней.

В качестве замечания могу лишь отметить необходимость более детально пояснить вопрос о выборе наиболее вероятных конформаций подандов посредством сравнения рассчитанных химических сдвигов на ядрах ^1H с экспериментальными. Этот комментарий связан с тем, что наблюдаемые методами спектроскопии ЯМР параметры являются усреднёнными по колебательным и вращательным степеням свободы, а также по ансамблю возможных конформеров. При этом рассчитанные структуры являются оптимизированными изолированными системами (с неявным учётом влияния растворителя) из набора возможных конформеров, сгенерированных посредством метадинамического моделирования. Иными словами, выборка наиболее вероятного конформера производится как-

будто на основе сравнения химического сдвига ^1H конкретной теоретической конфигурации системы и статистически усреднённого значения химического сдвига ^1H полученного экспериментально. Однако этот комментарий призван лишь обратить внимание на этот факт, но ни в коем случае не влияет на оценку работу Ольги Сергеевны.

Таким образом, работа Бородиной Ольги Сергеевны представляет собой самостоятельное завершённое исследование, которое обладает несомненной практической значимостью, а также отвечает всем требованиям ВАК, предъявляемым к диссертационным исследованиям на соискание ученой степени кандидата химических наук. Её автор, Бородина Ольга Сергеевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Доцент кафедры
физической органической химии
Института химии
Санкт-Петербургского
Государственного Университета,
кандидат физико-математических наук,
e.tupikina@spbu.ru
+7 904 641 9847

Тупикина Елена Юрьевна

4.09.2024



Личную подпись
Е.Ю. Тупикиной
заверяю
И.О. начальника отдела кадров №3
А.И. Константинова