

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

Диссертационная работа Бородиной Ольги Сергеевны «Теоретическая оценка стереоселективности реакций с участием хиральных подандов на основе 4-гидроксипролина» посвящена молекулярно-динамическому и квантово-химическому моделированию реакционных смесей с участием хиральных индукторов, а также исследованию структурных и электронных особенностей образования предреакционных комплексов различной конфигурации. Для изготовления смесей использовались молекулы гидроксипролинсодержащих подандов с различной длиной оксиэтиленовой цепи. Был проведен конформационный анализ данных молекул, а также квантово-топологический анализ их электронной плотности для сравнения найденных конформационных состояний с экспериментальными ^1H ЯМР спектрами подандов. Также проведена оценка энергетических барьеров реакции гидроксипролиновых хиральных индукторов при их взаимодействии с разными энантиотопными сторонами бензальдегида.

Фундаментальное значение работы заключается в том, что проведенная в ней оценка энергетических параметров на основе электронного строения молекул и их нековалентных связей позволяет понять зависимость стереоселективности реакции от свойств взаимодействий между молекулами. Вместе с тем работа имеет и практическое значение, поскольку в ней предложен способ повышения энантиомерного избытка фармакологически значимых веществ в асимметрических синтезах. Основные результаты и выводы соответствуют поставленным задачам и отражают новизну и актуальность выполненных диссертантом исследований.

Таким образом, по своему объему, актуальности, научной новизне и практической значимости диссертационная работа соответствует критериям, определенным п. 9 в соответствии с пунктом 28 "Положения о присуждении ученых степеней", утвержденного постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г., в ред. от 18.03.2023, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Она является актуальной, завершённой диссертационной работой, выполненной на высоком профессиональном уровне, а её автор, Бородина Ольга Сергеевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Волошин Владимир Петрович,
к.ф.-м.н., снс лаборатории молекулярной
динамики и структуры

Адрес: 630090, г.Новосибирск, ул. Институтская, 3,
Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН
E-mail: voloshin@kinetics.nsc.ru, тел.: +7(383) 333-28-54

Согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.

«29» июля 2024 г.

Подпись заверяю:



Волошин

Волошина В.П. *Волошина В.П. одобряю.*
Заместитель директора
ИХКГ СО РАН
по научной работе, к.х.н.
Валиулин С.В.