

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 теоретическому исследованию асимметрических синтезов и стереоселективности синтезов продуктов реакции Биджинелли. Актуальность работы отвечает запросам фармакологической химии к энантиомерно чистым веществам. Используются методы квантовой химии и молекулярной динамики. Теоретически спрогнозированы данные о соотношении вкладов разных стадий реакции в итоговый энантиомерный избыток продукта, предложена методология визуальной оценки доминирующего стереоизомера с помощью наглядных энергетических карт, разработано соответствующее программное обеспечение.

Объем, сложность и обстоятельность выполненных расчетов, а также разнообразие изученных систем свидетельствует о фундаментальности работы и заметном вкладе автора в современную стереохимию. Достоинством работы является создание автором собственных инструментов визуализации результатов диссертационной работы: корреляционные пиктограммы конформеров, энергетические и стерические карты, градиентные линии электронной плотности и границы атомных бассейнов, изображенные на трехмерной структуре исследованных систем.

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.

кандидат химических наук,
заместитель директора по научной работе –
начальник научного отдела
филиала ФГАОУ ВО «Северный (Арктический) федеральный университет
имени М.В. Ломоносова» в г. Северодвинске
Шишкина Анастасия Васильевна
10.09.2024

