

Отзыв научного руководителя
о работе **Бородиной Ольги Сергеевны** над диссертацией на тему «Теоретическая оценка стереоселективности реакций с участием хиральных подандов на основе 4-гидроксипролина», выполненной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Бородина Ольга Сергеевна в 2024 г. заканчивает третий курс аспирантуры ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)» по направлению подготовки 05.16.08 – Нанотехнологии и наноматериалы. За время обучения в аспирантуре Бородина О.С. успешноправлялась со всеми дисциплинами, с опережением выполняла задачи индивидуального плана работы аспиранта, проявляла себя как очень трудолюбивый и талантливый исследователь. Активно участвовала в конкурсах и имеет дипломы 43-го Международного конкурса научно-исследовательских работ, XI Международного турнира естественных наук.

Тема диссертации Бородиной О.С. сформировалась на основе продуктивного научного сотрудничества с Институтом органического синтеза УрО РАН, которое позволило состояться научно-исследовательской работе, в которой задачи моделирования, квантово-химические расчеты, анализ стерических, энергетических и электронных факторов и взаимосвязи «структура - свойство» проводились непосредственно докторантом, а экспериментальные данные об условиях реакций, выходах, характеристики спектров ЯМР предоставлялись коллегами из Института органического синтеза. Такой подход позволил объяснить причины повышения энантиомерной чистоты продуктов реакции в зависимости от структурных особенностей участвующих в ней подандов. При работе над диссертационным исследованием Ольга Сергеевна успешно освоила ряд классических методов моделирования; на стадии обработки и анализа большого массива данных ею была проявлена инициатива по разработке новых, уникальных инструментов визуального представления результатов, которые годятся для работы с озерами данных и могут быть использованы в технологиях цифровых двойников химических соединений и материалов. Реализовать всё это Ольге Сергеевне позволило владение языками программирования и знания основ хемоинформатики, полученные в магистратуре.

Работая младшим научным сотрудником в НИЛ Многомасштабного моделирования многокомпонентных функциональных материалов ЮУрГУ, Бородина О.С. участвовала в проектах РНФ и выполнении государственного задания. Задачи всегда выполнялись добросовестно и своевременно. Бородина О.С. активно

участвовала в 6-ти научных конференциях разных уровней с устными докладами. Основные результаты научной работы изложены в 7-ми статьях, 5 из которых индексируются в Scopus и Web of Science, 3 в журналах из списка ВАК.

Уровень теоретической и практической подготовки позволил Бородиной О.С. самостоятельно вести научную работу со студентами, она показала свою готовность к педагогической деятельности в вузе. Таким образом, Ольга Сергеевна сформировалась как перспективный ученый, ориентированный на получение научных результатов с использованием новых инструментов, позволяющих добиваться высокой эффективности на стыке физической химии и информационных технологий.

Диссертационное исследование Бородиной О.С. «Теоретическая оценка стереоселективности реакций с участием хиральных подандов на основе 4-гидроксипролина» представляет собой законченную квалификационную работу, соответствующую всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям. Автор диссертации, Бородина О.С., заслуживает присуждения степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Д.х.н. (02.00.04 – Физическая химия), доцент, профессор каф.

Теоретической и прикладной химии, в.н.с., зав. НИЛ

Многомасштабного моделирования многокомпонентных
функциональных материалов ЮУрГУ

Барташевич Екатерина Владимировна

тел. +79123137705; e-mail: bartashevichev@susu.ru

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования «Южно-Уральский
государственный университет (национальный исследовательский
университет)», 454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 76.

8 мая

16.05.2024

ПОДПИСЬ УДОСТОВЕРЯЮ

