

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Колчиной Галины Юрьевны «Закономерности «структура-свойство» для анализа функциональных свойств S,N,O-гетероорганических систем», представленной на соискание ученой степени доктора технических наук по специальности 1.4.3. «Органическая химия»

Одной из ключевых комплексных задач в современной органической химии является изучение структуры органических соединений, анализ их реакционной способности и предсказание свойств. В настоящее время значительная часть научных исследований осуществляется при помощи методов вычислительной химии, которые играют существенную роль в данной диссертационной работе.

В данном исследовании были изучены геометрические и электронные характеристики дитио- и дитиоселенсодержащих соединений, имеющих в своем составе  $\alpha$ -метилбензильные группы, а также производные алкил- и арилсульфидов и дисульфидов с замещенными эфирами, содержащими алициклические кольца с гетероатомами, а также биомаркерные молекулы нафталанской нефти. Это было достигнуто с помощью теоретических расчетов и экспериментальных методов исследования. В результате были обнаружены корреляционные зависимости между изменениями антиокислительной, биологической, антикоррозионной, противоизносной и антимикробной активности S,N,O-гетероорганических соединений, их структурой и особыми свойствами.

С научной точки зрения, это исследование представляет собой новаторский подход в двух аспектах. Во-первых, разработаны теоретические методы, позволяющие описать структурные особенности и реакционную способность S,N,O-гетероорганических соединений и установить связи с их проявляемыми свойствами. Во-вторых, осуществлено решение конкретных научных задач и исследование функциональных свойств S,N,O-гетероорганических соединений, которые включают антиокислительную,

биологическую, противоизносную, антикоррозионную и антимикробную активности. Это позволило достичь научной новизны и уникальности исследования.

Результаты, полученные в данном исследовании в области органической химии, являются, безусловно, новаторскими с определенной точки зрения и имеют высокую научную значимость. Изучение S,N,O-гетероорганических систем, применение комплексного подхода и эффективное использование методов вычислительной химии являются главными преимуществами данной работы, соответствующими современному мировому уровню в данной области.

Автореферат свидетельствует о том, что научные положения и выводы имеют практическую ценность. Разработанный экспериментально-теоретический подход позволяет прогнозировать функциональные свойства S,N,O-гетероорганических соединений и проводить направленный синтез органических веществ. Представленный автором комплексный подход и полученные результаты имеют высокую ценность как для науки, так и для практического применения.

По автореферату имеются некоторые замечания:

На стр. 22 автореферата указано, что значения констант скоростей реакций соединений с кумилпероксидными радикалами являются достаточно высокими. Однако нет уточнения, относительно какого значения данное сравнение проводится.

В разделе 7, по результатам расчетов параметров триазинов, установлено, что наибольшей стабильностью обладает анион под номером 6. При этом нет указаний на возможное практическое применение указанного соединения.

Было бы интересно проанализировать корреляцию между параметрами ароматичности и относительной энергией представленных -S-S- и -S-Se-S- содержащих пространственно затрудненных фенолов.

Указанные замечания не снижают научной и практической значимости выполненной автором работы. Автореферат диссертации логично изложен и

материал в целом структурирован. Стратегия и практика диссертационного исследования выбрана правильно. Общая характеристика исследования, основное содержание работы, теоретические и практические части автореферата диссертационной работы в целом сбалансированы.

Считаю, что диссертационная работа Колчиной Г.Ю. «Закономерности «структура-свойство» для анализа функциональных свойств S,N,O-гетероорганических систем» выполнена на высоком научном и методическом уровне. По актуальности, новизне, теоретической и практической значимости соответствует критериям пункта 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора технических наук по специальности 1.4.3. «Органическая химия», а ее автор – Колчина Галина Юрьевна заслуживает присуждения ученой степени доктора технических наук.

Даю свое согласие на обработку персональных данных, включение в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

**Анаников Валентин Павлович**

Академик РАН, доктор химических наук по специальности 02.00.03 – Органическая химия, заведующий лабораторией Металлокомплексных и наноразмерных катализаторов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН

Анаников Валентин Павлович

« 25 » мая 2023г.

Почтовый адрес: 119991, г. Москва, Ленинский проспект, 47

Телефон: +7 (499) 137-29-44

Адрес электронной почты: val@ioc.ac.ru

Подпись В.П. Ананикова заверяю.

Ученый секретарь ИОХ РАН, к.х.н.



 И.К.Коршевец