

Отзыв

на автореферат диссертационной работы **Тугульдуровой Веры Петровны** «Теоретическое и экспериментальное определение механизмов реакций моно- и дикарбонильных соединений с аммиаком», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия

Целью исследования Тугульдуровой В. П. является детальное изучение механизма взаимодействия аммиака с уксусным альдегидом, глиоксалем и их смесью. *Актуальность* тематики очевидна, так как использование подобных систем позволяет получить из относительно простых веществ биологически важные гетероциклические соединения, которые являются важными для многих других направлений практического применения.

Новизна работы выражена в том, что автором предложена новая интерпретация путей рассматриваемых реакций на основании результатов квантово-химических расчетов состояний молекул и систем. ИК- и ЯМР-спектры, полученные в рамках расчетов, показали хорошее сходство с реальными. Такой подход и скрупулезная проработка расчетных и экспериментальных данных при их сопоставлении позволили автору выбрать наиболее вероятные пути реакции и скорректировать методику синтеза целевого продукта.

Достоверность результатов исследования подтверждается использованием для квантово-химических расчетов современных программ и вычислительного оборудования. Эксперименты выполнены на самом высоком уровне благодаря тщательно продуманной методике и использованию современного инструментария, необходимого для корректного проведения практических работ и идентификации полученных соединений.

Работа Тугульдуровой В. П. изложена хорошим научным языком, материал подан логично, обоснованно, со всей полнотой, с достаточным количеством иллюстраций. Результаты исследований были показаны широкой научной общественности на разного уровня научных конференциях и опубликованы в четырех весьма представительных научных журналах, два из которых англоязычные.

Вместе с тем, хотелось бы получить разъяснения по некоторым вопросам:

- 1). Какая структура триазинового кольца рассматривалась при проведении квантово-химических расчетов? Возможно ли, учитывая геометрию, чтобы кристаллизационные «три молекулы воды располагались в шестичленный цикл, образуя водородные связи между собой и с атомами азота тримера» (рис. 1). Чем объяснить наблюдаемое различие экспериментальных и расчетных ИК-спектров ТГТ, где по значению волнового числа, где по соотношению интенсивностей (рис. 2)?
- 2). Какова по существу причина, что молекулы аммиака стремятся в первую очередь связываться с молекулами глиоксаля, а не с ацетальдегидом?

Получено ИХХТ СО РАН
23 марта 2022
Фзод № 2878-23-08/14

- 3). Чем отличается электронное строение PreIm и 2MI , вследствие чего, собственно, и происходит переход одного соединения в более устойчивый другой?
- 4). На рис.5 энергетический барьер перехода $1a$ в $2a$ показан со знаком «минус». Так ли?
- 5). В какой мере можно считать, что метод ЯМР *in situ* применен для кинетических исследований впервые в данной работе?

Наличие вопросов несколько не умаляет значимость работы Тугульдуровой В. П. в целом. В работе продемонстрирована высокая степень научной эрудиции автора. Теоретический уровень поставленных вопросов достаточно глубок. Проведенная автором интерпретация результатов экспериментов и теоретических расчетов позволила ранжировать интермедиаты и обосновать наиболее вероятный ряд превращений от исходных веществ до конечного продукта во всех трех изученных системах.

Автором представлены результаты исследований, которые вносят значимый вклад в теорию и практику получения одного из важных гетероциклических диазинов. В целом, рассматриваемая работа полностью соответствует требованиям Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Автор исследования Тугульдурова В. П. заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Согласна на обработку моих персональных данных, связанных с защитой диссертации и оформлением диссертационного дела Тугульдуровой В. П.

Профессор Химического отделения Института естественных наук ФГАОУ ВО Северо-восточного федерального университета им. М. К. Аммосова (главный научный сотрудник Института мерзлотоведения им. П. И. Мельникова СО РАН)

Доктор химических наук (02.00.04 – Физическая химия, 25.00.09 – Геохимия. Геохимические методы поисков), ст. научн. сотр.

_____ Федосеева Валентина Ивановна

677000, г. Якутск, ул. Белинского, 58. Тел.: +7(4112) 35-20-90.

Факс: +7 (4112) 32-13-14. E-mail: rector@s-vfu.ru [http: www.s-vfu.ru](http://www.s-vfu.ru)

22 марта 2022 г.

Подпись Федосеевой В. И. заверяю

Начальник учебно-методического отдела
Института естественных наук СВФУ



А. И. Аммосова