

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.192.02
НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО
УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ НОВОСИБИРСКОГО ИНСТИТУТА
ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ ИМ. Н.Н. ВОРОЖЦОВА СИБИРСКОГО
ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК ПО ДИССЕРТАЦИИ
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК
аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 17 января 2025 № 1

О присуждении Александровой Надежде Владимировне, гражданке РФ, учёной степени кандидата химических наук. Диссертация «Исследование ази-до-тетразольной таутомерии в ряду замещенных азидопиримидинов», по специальности 1.4.4 – Физическая химия принята к защите 23 октября 2024 года (протокол заседания №24) диссертационным советом 24.1.192.02 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Новосибирского института органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН), 630090, г. Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 9, Приказ № 2128 от 27 ноября 2023 года.

Соискатель Александрова Надежда Владимировна работает в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Новосибирском институте органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН) в Лаборатории магнитной радиоспектроскопии в должности научного сотрудника с 17 декабря 2024 г. по настоящее время; ранее в Лаборатории магнитной радиоспектроскопии в должности младшего научного сотрудника с марта 2016 г. по декабрь 2024 г., в Лаборатории физических методов исследования в должности младшего научного сотрудника с декабря 2015 г. по март 2016 г., в Лаборатории физических методов исследования в должности инженера-исследователя с сентября 2015 г. по декабрь 2015 г., в

Лаборатории физических методов исследования в должности инженера с августа 2013 г. по сентябрь 2015 г.

В июне 2013 года Александрова Надежда Владимировна окончила магистратуру Факультета естественных наук Новосибирского национального исследовательского государственного университета по специальности 04.04.02 «Химия» (кафедра физической химии). С сентября 2015 года по настоящее время обучается в очной аспирантуре Федерального государственного бюджетного учреждения науки Новосибирского института органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук по направлению 04.06.01 Химические науки (специальность 1.4.4 (02.00.04) «Физическая химия», приказ о зачислении № 475-к от «01» сентября 2015 г.), с апреля 2018 г. (приказ № 30х от «06» апреля 2018 г.) по август 2023 пребывала в академическом отпуске. Приказом №34-асп от 21.08.2023 возобновила обучение с переводом на программу подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре, реализуемым в соответствии с федеральными государственными требованиями (ФГТ) по научной специальности 1.4.4 «Физическая химия» (химические науки).

Экзамен по специальности (физическая химия) сдан 20 июня 2014 г. с оценкой «хорошо», по истории и философии науки – 9 июня 2015 г. с оценкой «отлично», по иностранному языку (английский) – 1 июня 2015 г. с оценкой «отлично».

Диссертация выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Новосибирском институте органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН).

Научный руководитель: Маматюк Виктор Ильич, кандидат химических наук, ведущий научный сотрудник Лаборатории магнитной радиоспектроскопии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Новосибирского института органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН).

Официальные оппоненты:

1. Кривдин Леонид Борисович – доктор химических наук, главный научный сотрудник Лаборатории ядерного магнитного резонанса ФГБУН Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского Сибирского отделения Российской академии наук, г. Иркутск.
2. Ельцов Илья Владимирович – кандидат химических наук, доцент, доцент кафедры общей химии Факультета естественных наук Новосибирского государственного университета, г. Новосибирск.

дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского Сибирского Отделения Российской академии наук, г. Новосибирск [заключение составлено заведующим Лабораторией магнитных явлений ИХКГ СО РАН, д.х.н. по специальности 01.04.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» Поляковым Николаем Эдуардовичем], в своем положительном заключении отметила, что диссертационная работа является самостоятельным завершенным научным исследованием, которое расширяет научные знания в области азидо-тетразольной таутомерии и химии тетразолопиримидинов.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации определяется тем, что Кривдин Л.Б., Ельцов И.В. и Поляков Н.Э. являются специалистами в области физической органической химии и спектроскопии ядерного магнитного резонанса – основного метода исследования, используемого в диссертационной работе.

Соискатель имеет 5 научных статей, опубликованных по теме диссертации в научном журнале, включённом в перечень международных рецензируемых научных журналов и изданий для опубликования основных научных ре-

зультатов диссертаций; 4 тезиса докладов опубликовано в материалах международных и российских конференций.

Вклад соискателя в данное исследование включает в себя изучение литературы по теме диссертации, регистрацию спектров ЯМР, их обработку и определение структур таутомеров, а также выполнение расчетов и анализ параметров исследуемых процессов. Автором были выявлены новые химические трансформации 2-азидо-6-фенил-4-хлорпиримидин-5-карбальдегида в ДМСО. Также предложен предполагаемый механизм наблюдаемой перегруппировки и метод для его подтверждения. Автор принимал непосредственное участие в интерпретации полученных результатов и подготовке научного материала к публикации.

Список работ, опубликованных по теме диссертации:

1. **Плешкова* Н. В.**, Николаенкова Е.Б., Кривопапов В. П., Маматюк В. И. 2,6-Дизамещенные 4-азидопиримидины: синтез и исследование кинетики и термодинамики азидо-тетразольной перегруппировки методами спектроскопии ЯМР // Изв. АН. Сер. хим. — 2017. — № 11. — С. 2095-2102. — DOI:10.1007/s11172-017-1986-2.
2. Николаенкова Е. Б., **Александрова Н. В.**, Маматюк В. И., Кривопапов В. П. Синтез и исследование азидо-тетразольной таутомерии 2-азидо-4-(трифторметил)-6-R-пиримидинов (R = H, 4-ClC₆H₄) // Изв. АН. Сер. хим. — 2018. — № 5. — С. 893-901. — DOI: 10.1007/s11172-018-2154-z.
3. **Александрова Н. В.**, Николаенкова Е.Б., Гатилов Ю.В., Половяненко Д.Н., Маматюк В. И., Кривопапов В. П. Синтез и исследование азидо-тетразольной таутомерии 2-азидо-6-фенилпиримидин-4(3H)-она и 2-азидо-4-фенил-6-хлорпиримидина // Изв. АН. Сер. хим. — 2022. — № 6. — С. 1266 -1272. — DOI: 10.1007/s11172-022-3529-8.

* Фамилия «Плешкова» изменена на «Александрова»

4. **Александрова Н. В.**, Николаенкова Е.Б., Гатилов Ю.В., Маматюк В. И., Кривопапов В. П. Синтез 2-азидо-4-хлор-6-фенилпиримидин-5-карбальдегида и его превращения в ДМСО // Изв. АН. Сер. хим. — 2024. — № 7. — С. 2014-2022. — DOI: 10.1007/s11172-024-4321-8.
5. **Александрова Н. В.**, Николаенкова Е. Б., Маматюк В. И., Кривопапов В. П. Кинетические и термодинамические характеристики азидотетразольной перегруппировки в ряду 4,6-замещенных 2-азидопиримидинов // Изв. АН. Сер. хим. — 2024. — № 9. — С. 2616-2623. — DOI: 10.1007/s11172-024-4372-х.

На автореферат диссертации поступило 6 положительных отзывов с высокой оценкой работы:

1. Отзыв профессора кафедры химической технологии энергонасыщенных материалов и изделий Бийского технологического института (филиала) АлтГТУ им. И.И. Ползунова, д.х.н., профессора Верещагина Александра Леонидовича.
2. Отзыв профессора кафедры химии и технологии органических соединений азота ФГБОУ ВО Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета), д.х.н., профессора Островского Владимира Ароновича.
3. Отзыв профессора кафедры биологии, химии и методики обучения КГПУ им. В.П. Астафьева, д.х.н., профессора Горностаева Леонида Михайловича.
4. Отзыв старшего научного сотрудника Лаборатории малотоннажной химии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем химико-энергетических технологий Сибирского отделения Российской академии наук, к.х.н. Кулагиной Дарьи Александровны.
5. Отзыв доцента кафедры органической и биомолекулярной химии ФГАОУ ВО «Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», к.х.н. Деева Сергея Леонидовича.
6. Отзыв ведущего научного сотрудника, заведующего Лабораторией струк-

турных исследований ФГБУН ФИЦ Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН, к.х.н. Смирнова Владимира Ильича.

Диссертационный совет отмечает, что в результате выполнения диссертационного исследования соискателем впервые были установлены кинетические параметры азидо-тетразольного равновесия для пяти 2,6-замещенных 4-азидопиримидинов и десяти 4,6-замещенных 2-азидопиримидинов. Показано, что добавление CH_3 – группы в позицию 2 кольца 4-азидопиримидина замедляет превращение тетразольной формы в азидную, в то время как введение фенильного заместителя в ту же позицию, напротив, ускоряет этот процесс. Роль заместителя в позиции 6 кольца 4-азидопиримидина практически не сказывается на скорости химических реакций. В то же время, присутствие фенильных заместителей в позициях 4 или 6 кольца 2-азидопиримидина способствует увеличению скорости этих превращений.

При выполнении исследования диссертант продемонстрировал, что структура 7-фенилтетразоло[1,5-*a*]пиримидин-5(4*H*)-она в кристаллической фазе зависит от способа выделения. При выделении этого соединения из слабокислого раствора сразу после растворения в DMSO-d_6 наблюдается трехкомпонентное равновесие, а после перекристаллизации из этанола – двухкомпонентное.

В рамках работы диссертантом было установлено, что 2-азидо-4-хлор-6-фенилпиримидин-5-карбальдегид в среде ДМСО сначала преобразуется в 7-оксо-5-фенил-4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидин-6-карбальдегид, который затем проходит перегруппировку путем рециклизации, образуя 6-бензоилтетразоло[1,5-*a*]пиримидин-7(4*H*)-он. С использованием соединений, меченых изотопом углерода-13, был изучен механизм данной перегруппировки.

В своей работе диссертант применял современные физико-химические методы для количественного и структурного анализа. Анализ полученных результатов опирался на надежную научную основу. В ряде случаев структурные данные были подтверждены с помощью рентгено-структурного анализа. Резуль-

таты опубликованы в рецензируемом научном журнале и были представлены на четырех конференциях. Таким образом, достоверность полученных данных не вызывает сомнений.

Соискателем внесен существенный вклад в научное исследование азидотетразольной таутомерии и химию тетразолопиримидинов. Осуществлены поиск, анализ и обобщение научной литературы по теме диссертации, планирование и проведение экспериментов. Автор диссертации показал исключительные возможности методов ядерного магнитного резонанса в исследовании механизмов химических реакций и в получении количественной кинетической информации.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается последовательным изложением материала и взаимосвязью выводов с поставленными задачами.

На заседании 17.01.2025 г. диссертационный совет принял решение присудить Александровой Надежде Владимировне ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 23 человек, участвовавших в заседании, из них 6 докторов наук по специальности «1.4.4 – Физическая химия», из 27 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение учёной степени 23 человек, против присуждения учёной степени 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель диссертационного совета
д.х.н., профессор РАН


Волчо К.П.

Ученый секретарь диссертационного совета

к.х.н.


Патрушев С.С.

17.01.2025

