

Отзыв научного руководителя

о диссертационной работе Александровой Надежды Владимировны
«Исследование азидо-тетразольной таутомерии в ряду замещенных азидопиримидинов»

Александрова Надежда Владимировна начала работу по теме диссертации еще в магистратуре Новосибирского государственного университета, которую окончила в 2013 году. Затем продолжила работу, будучи инженером Лаборатории физических методов исследования с 2013 по 2015 годы и аспирантом НИОХ СО РАН с 2015 года по настоящее время. В период с 2018 по 2023 годы Надежда Владимировна пребывала в академическом отпуске по уходу за детьми.

Диссертационная работа Александровой Надежды Владимировны посвящена азидопиримидинам и их таутомерным превращениям в тетразолопиримидины. В процессе научной деятельности Надеждой Владимировной определено строение таутомеров исследуемых азидопиримидинов и вычислены термодинамические и кинетические характеристики азидо-тетразольной таутомерии в широком ряду замещенных 2- и 4-азидопиримидинов, что позволило выявить закономерность во влиянии заместителей на эти параметры. Соискателем было установлено, что наличие фенильного заместителя в α -положении к реакционному центру в тетразолопиримидинах приводит к ускорению раскрытия тетразольного цикла. Наличие донорных групп приводит к обратному эффекту. Основным методом исследования была спектроскопия ЯМР, которым успешно владеет соискатель. Хотелось бы отметить, что вычисление констант скорости таких таутомерных превращений представляет довольно сложную задачу. Однако она была успешно решена соискателем с помощью двумерной обменной спектроскопии ЯМР.

Также в ходе исследования азидо-тетразольной таутомерии в ряду 2-азидопиримидинов, Надежда Владимировна обнаружила происходящую в ампуле ЯМР очень интересную каскадную реакцию. Эта реакция заключалась в замещение атома хлора в 2-азидо-6-фенил-4-хлорпиримидин-5-карбальдегиде на гидроксигруппу с образованием 7-оксо-5-фенил-4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидин-6-карбальдегида и дальнейшую изомеризационную рециклизацию последнего в 6-бензоилтетразоло[1,5-*a*]пиримидин-7(4*H*)-он в неабсолютном $\text{DMSO-}d_6$. Механизм рециклизации был изучен ^{13}C -меткой. Найденные химические трансформации имеют не только теоретический, но и практический интерес. Они позволяют достаточно легко химически модифицировать тетразоло[1,5-*a*]пиримидины, являющиеся структурными блоками биологически активных соединений. Работа по исследованию каскадной реакции 2-азидо-6-фенил-4-

хлорпиримидин-5-карбальдегида была поддержана грантом РФФИ, что подтверждает её научную ценность.

За время работы над диссертацией Надежда Владимировна стала соавтором 9 опубликованных статей, из которых по результатам диссертации 5 печатных работ в журнале «Известия академии наук. Серия химическая», также результаты диссертационной работы представлялись на 4 конференциях. Следует также отметить, что Александрова Н.В. являлась руководителем и исполнителем грантов РФФИ. Это всё характеризует её как самостоятельного и квалифицированного учёного.

Считаю, что диссертация Александровой Н.В. на тему «Исследование азидотетразольной таутомерии в ряду замещенных азидопиримидинов» представляет собой завершённую исследовательскую работу, соответствующую требованиям ВАК и специальности 1.4.4 «физическая химия», а Надежда Владимировна несомненно заслуживает присуждение степени кандидата химических наук.

Научный руководитель:

к.х.н., ведущий научный сотрудник Лаборатории магнитной радиоспектроскопии
Федерального государственного бюджетного учреждения науки Новосибирского
института органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского Отделения
Российской академии наук

«16» сентября 2024г.

 Маматюк В. И.

Подпись Маматюка В. И. удостоверяю

Ученый секретарь НИОХ СО РАН



 Бредихин Р. А.
16.09.2024