



Федеральное государственное
бюджетное учреждение науки
**Институт проблем химико-
энергетических технологий
Сибирского отделения**

Российской академии наук

659322, г.Бийск Алтайского края, ул Социалистическая 1
ф (3854) 303043, т. (3854)303062, e-mail: admin@ipcet.ru
ОКПО 10018691, ОГРН 1022200571051, ИНН 2204008820,
КПП 220401001

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Александровой Надежды Владимировне
«Исследование азидо-тетразольной таутомерии в ряду замещенных азидопиримидинов»
по специальности 1.4.4 – физическая химия
на соискание ученой степени кандидата химических наук

Актуальность темы диссертации

Азидо-тетразольная таутомерия как метод селективного получения целевого продукта с высоким выходом часто используется на практике. Такие реакции характеризуются необычным сочетанием сильных термодинамических движущихся сил и последовательных, хорошо контролируемых путей реакции, которые надёжно зависят как от условий проведения реакции, так и от используемого субстрата. Несмотря на наличие значительного объема литературы, посвященной азидо-тетразольной таутомерии, кинетические характеристики данного процесса в настоящее время практически не исследованы. Эта ситуация подчеркивает важность изучения активационных параметров таутомерных превращений среди замещенных азидопиримидинов.

В связи с этим актуальным является научно-практический интерес к определению термодинамических и кинетических параметров азидо-тетразольной таутомерии, а также изучение влияния субстрата и природы заместителей на эти характеристики.

Цель работы – Определение термодинамических и кинетических параметров азидо-тетразольной таутомерии 2- и 4-азидопиримидинов, а также изучение влияния природы заместителей на эти характеристики. Кроме того, цель данной работы заключается в исследовании обнаруженной каскадной химической реакции 2-азидо-6-фенил-4-хлорпиримидин-5-карбальдегида, который теоретически может проявлять азидо-тетразольную таутомерию.

Научная новизна

Впервые проведены кинетические измерения таутомерных превращений в ряду 2- и 4-азидопиримидинов при различных температурах с применением обменной спектроскопии (NOESY/EXSY). Получены активационные параметры этих превращений и исследовано влияние заместителей на эти величины.

Впервые было установлено, что 2-азидо-6-фенил-4-хлорпиримидин-5-карбальдегид в неосушенном ДМСО неустойчив и подвергается каскадной реакции. Он превращается в 7-оксо-5-фенил-4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидин-6-карбальдегид с последующей изомеризационной рециклизацией в 6-бензоилтетразоло[1,5-*a*]пиримидин-7(4*H*)-он. С применением изотопномеченных (¹³C) соединений исследован механизм перегруппировки 7-оксо-5-фенил-4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидин-6-карбальдегида, предшественником которого является 2-азидо-6-фенил-4-хлорпиримидин-5-карбальдегид.

Обоснованность и достоверность полученных результатов, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации

Работа выполнена с применением современных методов исследования и идентификации органических соединений, в том числе спектроскопии ЯМР высокого разрешения, включая двумерную корреляционную спектроскопию HMBC (Heteronuclear Multiple Bond Correlation) и HSQC (Heteronuclear Single-Quantum Coherence) на различных ядрах. Константы скоростей 5 были рассчитаны из спектров NOESY/EXSY и методом ДЯМР. В ходе работы также применялись физические методы исследования: инфракрасная спектроскопия (ИК-спектроскопия), масс-спектрометрия высокого разрешения, рентгеноструктурный анализ (РСА). Достоверность и обоснованность научных положений и выводов, сформулированных в автореферате, обеспечиваются внутренней непротиворечивостью результатов исследования, их соответствием теоретическим положениям органической и физической химии.

Практическая ценность полученных результатов

Диссертационная работа является фундаментальным трудом, а результаты, полученные в ходе исследований, представляют собой научные знания, которые, несомненно, внесли свой вклад в развитие теории и практики органической и физической химии, в части исследования механизма таутомерных превращений в ряду 2- и 4-азидопиримидинов.

Заключение

Считаем, что по своей актуальности, научной новизне, практической значимости, достоверности результатов и обоснованности выводов диссертация «Исследование азидотетразольной таутомерии в ряду замещенных азидопиримидинов» отвечает требованиям,

предъявляемым ВАК Министерства науки и высшего образования РФ к кандидатским диссертациям, изложенным в п. 9 Постановления Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения ученых степеней». Диссертация является законченной научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи, имеющей значение для развития соответствующей отрасли знаний, а Александрова Надежда Владимировна заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

к.х.н. (1.4.3-Органическая химия) Кулагина Дарья Александровна

с.н.с. Лаборатории малотоннажной химии

Федерального государственного бюджетного учреждения науки

Институт проблем химико-энергетических технологий

Сибирского отделения Российской академии наук (ИПХЭТ СО РАН)

Адрес: 659322, Россия, Алтайский край, г. Бийск, ул. Социалистическая, 1.

27.12.2024

Телефон/факс: (3854) 30-17-25

e-mail: admin@ipcet.ru

Подпись Кулагиной Д.А. заверяю.

Ученый секретарь ИПХЭТ СО РАН, к.х.н.



А.Г. Суханова