

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Мещеряковой Екатерины Сергеевны на тему «Молекулярная и кристаллическая структура ряда α,ω -алкан-дитиолов, 1,5,3-дитиазепанов и 1,2-бензо-1,5,3-дитиазепинов», на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Актуальность. Установление строения гетероциклических соединения является основой для их дальнейшего использования в различных отраслях народного хозяйства. В настоящее время применение современных физико-химических методов анализа позволяет с максимальной степенью достоверности установить молекулярную и кристаллическую структуру гетероциклических соединений различного строения. Однако остается не достаточно изученным пространственное строение молекул, в частности, их конформации. Установление зависимости кристаллической структуры соединений, содержащих 1,2-дитиоловый фрагмент, от конформационных особенностей строения исходных веществ, представляется перспективным направлением для изучения и моделирования различных биохимических процессов, в том числе в фундаментальной медицине. Таким образом, тема диссертационной работы Мещеряковой Е.С. посвящена актуальной проблеме органической и физической химии.

Научная новизна. Важным аспектом диссертационного исследования является систематический анализ и установление молекулярного и кристаллического строения восьми новых производных 1,5,3-дитиазепана с аминокислотными фрагментами. Впервые установлено, что в зеркально-симметричных 1,5,3-дитиазепановых циклах проявления стереоэлектронных эффектов наблюдаются в двух N-C-S фрагментах, а в 1,5,3-дитиазепанах с несимметричным строением, только на одном из N-C-S участков.

Теоретическая и практическая значимость. В результате проведенных диссертантом исследований получены новые научные результаты, имеющие теоретическое и практическое значение. Определенные закономерности пространственного строения α,ω -бис-сульфанилалканов, 1,5,3-дитиазепанов, бензо-1,5,3-дитиазепинов, а также обнаруженные и изученные стереоэлектронные эффекты ряда гетероциклических соединений позволят установить закономерности «структура-активность» для целенаправленного синтеза эффективных соединений с заданными свойствами.

Диссертационная работа выполнена на достаточном по количеству материале с применением современных методов исследований и интерпретации полученных результатов, в том числе, на основе квантово-химических расчетов и программ обработки данных.

Опубликованные по результатам диссертационного исследования 8 научных трудов, в том числе 6 статей в журналах, входящих в перечень рецензируемых научных изданий, рекомендованных ВАК при Минобрнауки России и включенных в реферативные базы Scopus и Web of Science, отражают основное содержание работы. Материалы исследования

доложены на 2 научных конференциях, в том числе с международным участием.

Таким образом, диссертационная работа Мещеряковой Екатерины Сергеевны на тему «Молекулярная и кристаллическая структура ряда α,ω -алкан-дитиолов, 1,5,3-дитиазепанов и 1,2-бензо-1,5,3-дитиазепинов», представленная на соискание ученой степени кандидата химических наук, является самостоятельной, законченной научно-квалификационной работой, по своей актуальности, научной новизне, теоретической и практической значимости, объему проведенных исследований соответствует п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г. (в ред. от 28.08.2017 г.), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Мещерякова Екатерина Сергеевна заслуживает ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Согласен на сбор, обработку, хранение и размещение в сети «Интернет» моих персональных данных, необходимых для работы диссертационного совета Д 002.198.02.

Заведующий кафедрой фармации института
дополнительного профессионального образования
федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего образования
«Башкирский государственный медицинский университет»
Министерства здравоохранения Российской Федерации,
доктор фармацевтических наук
(14.04.02. – фармацевтическая химия, фармакогнозия),
профессор



Катаев Валерий Алексеевич

3.06.2019 г.

450008, г. Уфа, ул. Ленина, д.3
Тел.: (347)272-41-73, факс: (347)272-37-51
Официальный сайт: <http://www.bashgmu.ru>
E-mail: centreles@mail.ru

Подпись: В. А. Катаев
Заверяю:
Ученый секретарь ФГБОУ ВО Башкирский государственный медицинский университет
Минздрава России

