

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Бикмухаметова Камиля Шамиловича «Молекулярная и кристаллическая структура производных 1,2,4,5,7-тетраоксазоканов и тетраоксаспирододекан диаминов», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Повышенный интерес исследователей к циклическим органическим пероксидам вызван перспективой их широкого использования в качестве нового класса препаратов с повышенной биохимической активностью для нужд медицины и агрохимии. Для понимания и прогнозирования реакционной способности перекисных соединений необходимы сведения о их пространственном и электронном строении. В этой связи диссертационная работа Бикмухаметова К.Ш., направленная на выявление закономерностей пространственного строения производных тетраоксазоканов и тетраоксаспирододекан диаминов и проявления стереоэлектронных взаимодействий в кристаллическом состоянии, является **актуальной**.

Наиболее существенные результаты, полученные соискателем и представляющие **научную новизну** исследований, заключаются в следующем:

1. Впервые установлено пространственное строение тринадцати новых производных тетраоксазоканов и четырех новых производных тетраоксаспирододекан диаминов в кристаллическом состоянии. Показано, что тетраоксазокановый цикл в производных спироадамантан и спиро-циклоалкан тетраоксазоканов принимает конформацию *твист-ванна-кресло*, тогда как в галогенфенильных производных 1-изопропил-4-метил-тетраоксазаспиро тридеканов – *кресло-кресло*, а в 1-изопропил-4-метил- метилизооксазол-тетраокса-азаспиро тридекане – *ванна-кресло*;

2. Выполнен анализ стереоэлектронного взаимодействия неподеленной электронной пары атома кислорода с σ^* -разрыхляющей орбиталью на участках N–C–O, O–C–O и O–O–C. Показано, что энергия стереоэлектронного взаимодействия $n_O \rightarrow \sigma^*_{C-N}$ в тетраоксазоканах больше по сравнению с тетраоксаспирододекан диаминами, вследствие эффективного перекрытия неподеленной электронной пары атома кислорода и C–N связи, достигаемого благодаря их *анти*-ориентации в тетраоксазоканах, тогда как в тетраоксаспирододекан диаминах неподеленная электронная пара атома кислорода и C–N связь находятся в *гош* положении;

3. Методами компьютерного моделирования конформационных превращений с применением квантово-химических расчетов в рамках метода B3LYP/6-31G(d,p) выявлены энергетически наиболее выгодные конформеры для производных тетраоксазоканов, которые соответствуют конформациям, наблюдаемым в кристаллах. Найдено, что реализуемая в кристаллах конформация цикла 2-метоксифенил-спироадамантан тетраоксазокана (*твист-ванна-кресло*) и 4-метилизооксазол-тетраоксаазаспиротридекана (*ванна-кресло*) отличается от теоретически рассчитанной конформации *кресло-кресло* за счет влияния межмолекулярных взаимодействий.

4. Установлена определяющая роль слабых C–H...O внутримолекулярных водородных связей и H–H взаимодействий на амплитуду складчатости оксазоканового и оксепанового циклов.

Теоретическая и практическая значимость работы состоит в том, что установленные закономерности пространственного и электронного строения соединений

ряда новых производных тетраоксазоканов и тетраоксаспирододекан диаминов будут способствовать выявлению взаимосвязи «структура–активность» при разработке новых препаратов для медицины и агрохимии. Рентгеноструктурные данные по новым циклическим пероксидам депонированы в базу данных КБСД.

Выводы по диссертационной работе в полной мере **соответствуют цели и задачам**, поставленным перед соискателем.

Основные результаты диссертационной работы достаточно **полно отражены в 4-х публикациях** в международных журналах, индексируемых Web of Science и SCOPUS и рекомендованных ВАК РФ.

Замечаний по работе не имеется.

Заключение:

В работе соискателя решены на высоком профессиональном уровне важные задачи в области физической химии, а именно - установлены закономерности пространственного строения производных тетраоксазоканов и тетраоксаспирододекан диаминов и стереоэлектронных взаимодействий в кристаллическом состоянии. Представленная работа по своей актуальности, научной значимости и полученным результатам соответствует требованиям пп. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением правительства РФ №842 от 24.09.2013 г. (в редакции от 20.03.2021 г.), а ее автор Бикмухаметов Камиль Шамилович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Я, Сараев Виталий Васильевич, согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета 24.1.218.02, и их дальнейшую обработку.

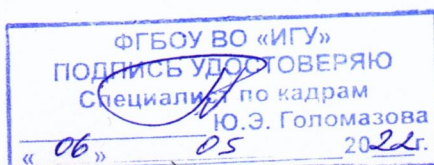
Тел.: +7(3952) 521-048

E-mail: saraev@chem.isu.ru

Доктор химических наук

(специальность 02.00.04 – физическая химия)

Профессор



Сараев Виталий Васильевич

Место работы: федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Иркутский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ИГУ», ИГУ)

Должность: профессор кафедры теоретической и прикладной органической химии и полимеризационных процессов

Адрес места работы: 664003, Сибирский федеральный округ, Иркутская область, г. Иркутск, ул. Карла Маркса, д. 1

Тел.: +7 (3952) 521-900

E-mail: rector@isu.ru

«06» мая 2022 года

Визов Е. Х. Н., профессор
заверяю: ученой секретарь ИГУ
ИГУ