

Отзыв на автореферат диссертации Петунина Павла Васильевича
«Мультиспиновые системы на основе вердазильных радикалов: синтез, структура и свойства» по специальности 02.00.03 – «Органическая химия»

В автореферате диссертационной работы описано изучение вердазильных радикалов. Автор предложил улучшения существующих методов получения этих соединений и расширил ряд известных производных. С галоген-содержащими арильными заместителями вердазильного фрагмента была проведена реакция Соногаширы с получением этинильных производных. Через реакцию амидирования вердазильные радикалы были связаны с нитроксильными с образованием мультиспиновых соединений. Некоторые свойства полученных соединений были моделированы квантово-химическими расчетами, результаты сравнивались с экспериментальными данными.

Некоторые утверждения в автореферате вызывают вопросы при прочтении. Так, во введении автор говорит: «делокализации спиновой плотности... подразумевает термодинамическую стабильность – нахождение радикала в локальном минимуме на поверхности потенциальной энергии». Но любой, даже самый нестабильный интермедиат, находится в локальном минимуме на ППЭ по определению и, соответственно, какое отношение это имеет к стабильности свободных радикалов в частности, не представляется очевидным.

Другое спорное утверждение: «не существует единой теории стабилизации и, тем более, количественных показателей, позволяющих выстроить радикалы в ряд по стабильности». Тем не менее, термодинамическая стабилизация радикалов не представляет загадок и даже предсказывается расчетными методами (см., например, *Org & Biomol Chem*, 2015, 13, pp 157-169). Общепринятым количественным показателем выступает энергия гомолитической диссоциации связи R–H (BDE) (*Acc. Chem. Res.* 2003, 36, pp 255-263). Не понятно, почему в работе не фигурирует упоминания этого понятия и объяснения, почему он не используется как показатель термодинамической стабильности для исследуемых систем. Здесь же можно отметить, что в конце работы упоминается попытка корреляции расчетных параметров и экспериментально наблюдаемой стабильности изучаемых радикалов. Однако, нет объяснения, как определялась экспериментальная стабильность для исследуемых систем.

В целом, после рассмотрения автореферата можно заключить, что диссертация «Синтез новых нитрозо- и аминопиразолов, исследование их строения, свойств и поиск областей применения» отвечает требованиям п. 8 и 9 «Порядка присуждения ученых степеней в Национальном исследовательском Томском политехническом университете (Приказ № 93/од от 06.12.2018)». Диссертационная работа соответствует паспорту специальности 02.00.03 – органическая химия: п.1 «Выделение и очистка новых соединений», п.3 «Развитие рациональных путей синтеза сложных молекул», п.8. «Моделирование структур и свойств биологически активных веществ», а её автор — Петунин Павел Васильевич — заслуживает присуждения искомой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.03 – органическая химия.

Зав. лабораторией функциональных
органических соединений ИОХ РАН

д.х.н. по специальности

02.00.03 – «Органическая химия»

10.06.19

Дильман Александр Давидович

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук (ИОХ РАН). 119991, г. Москва, Ленинский проспект, 47, E-mail: dilman@ioc.ac.ru. Тел: +7-910-405-69-88

Подпись А.Д. Дильмана заверяю.

Ученый секретарь ИОХ РАН

к.х.н.

Коршевец Ирина Константиновна