

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Станишевского Владислава Витальевича
«Актуальные проблемы спектроскопии ЯМР ^{15}N », представленной на соискание ученой
степени кандидата химических наук по специальности 1.4.3 – органическая химия

Работа Станишевского В.В. посвящена поиску путей эффективного введения изотопных меток ^{15}N и синтезу ряда модельных изотопно-обогащенных соединений с целью получения структурно значимой информации из параметров спектров ЯМР (химических сдвигов ^{15}N , КССВ $^nJ_{^{13}\text{C},^{15}\text{N}}$ и $^nJ_{^1\text{H},^{15}\text{N}}$, изотопных эффектов химических сдвигов ядер ^{13}C , вызванных заменой ^{14}N на ^{15}N), а также изучению взаимосвязи этих параметров со структурой и динамикой молекулярных систем, и построению соответствующей теоретической модели, основанной на современных методах квантовой химии.

Автор разработал оптимальные схемы синтеза и успешно синтезировал ряд модельных ^{15}N изотопно-обогащенных соединений, подобрал оптимальные условия регистрации одномерных и двумерных экспериментов ЯМР на ядрах ^1H , ^{13}C , ^{15}N , осуществил регистрацию, расшифровку (выполнил отнесение сигналов) и анализ тонкой мультиплетной структуры экспериментальных мультиядерных одномерных и двумерных спектров. Используя метод динамического ЯМР, установил параметры внутреннего вращения ^{15}N -бензамида. Для построения теоретической модели взаимосвязи параметров спектров ЯМР со структурой и динамикой молекул были проведены серии аккуратных квантово-химических расчётов параметров спектров ЯМР и, при сопоставлении теоретических и экспериментальных данных, получены двумерные корреляционные зависимости. На основании величин $^nJ_{^{13}\text{C},^{15}\text{N}}$ охарактеризовал параметры кислотно-основного молекулярного переключения в производных ^{15}N -бензилиденанилина и ^{15}N -бензиланилина.

Следует отметить, что в формуле хлоральгидрата (схема 1) автор допустил ошибку; на стр. 9 вместо обозначения $\Delta\text{N}(\text{D})$ следовало бы использовать $\Delta\delta^{15}\text{N}(^2\text{H}/^1\text{H})$; программный комплекс LCN6DP включить в список использованных программ в разделе «Методология диссертационного исследования».

Несмотря на мелкие недостатки, считаю, что диссертационная работа «Актуальные проблемы спектроскопии ЯМР ^{15}N » полностью соответствует требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова к кандидатским диссертациям, содержание диссертации соответствует паспорту специальности 1.4.3. – «Органическая химия» (химические науки), а также критериям, определенным п.п. 2.1. – 2.5. Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете М.В. Ломоносова, а также оформлена, согласно приложениям № 5,6 Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, а ее автор Станишевский Владислав Витальевич, достоин присуждаемой ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.3. Органическая химия.

Я, Чешков Дмитрий Александрович, даю согласие на использование и обработку моих персональных данных на нужды, связанные с работой диссертационного совета МГУ.014.1.

Чешков Дмитрий Александрович
кандидат физико-математических наук
специальность 02.00.04 – физическая химия
ведущий научный сотрудник лаборатории
физико-химических методов анализа
Государственный научно-исследовательский институт
химии и технологии элементоорганических соединений
(АО ГНИИХТЭОС)
105118, Россия, г.Москва, Шоссе энтузиастов, д. 38,
Тел. +7(495)673-59-70
Электронная почта: dcheshkov@gmail.com
18.10.2024

Подпись к.ф.-м.н. Чешкова Д.А. заверяю
Ученый секретарь АО ГНИИХТЭОС, к.х.н.
18.10.2024

Кирилина Н.И.