

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Мартыновой Юлии Зайнитдиновны «Связь «структура-свойство» в ряду некоторых азот-, кислород- и серосодержащих ингибиторов окислительных процессов», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

В диссертационной работе установлены количественные связи «структура-свойство» в ряду азот-, кислород- и серосодержащих соединений в качестве перспективных биологически активных веществ, обладающих антиокислительными и противовоспалительными свойствами, с помощью метода QSAR/QSPR-моделирования и молекулярного докинга. Рассчитаны и оценены термодинамические характеристики связывания лигандов, отобранных на основе QSAR/QSPR-моделей, с активными центрами 15-липоксиогеназы и циклооксигеназы-2.

На основе прогнозных значений кинетических параметров предложены производные 6-гидроксихромена с выраженными антиокислительными свойствами. Антиокислительная активность этих веществ подтверждена результатами кинетических испытаний.

Кинетическое исследование процесса поглощения кислорода при окислении 1,4-диоксана в отсутствие и присутствии добавок АОII и АОIII, показало что введение добавок способствует появлению четкого периода индукции, что свидетельствует о выраженном антиокислительном действии исследуемых веществ.

По автореферату диссертации возникли следующие замечания и вопросы:

1) В схеме инициированного окисления 1,4-диоксана по радикально-цепному механизму на рис. 6 автореферата диссертации рассмотрено шесть последовательно-параллельных стадий. Однако не приводятся значения всех кинетических параметров данных стадий.

2) Кинетические кривые поглощения кислорода при окислении 1,4-диоксана в отсутствие и присутствии добавок АОII и АОIII получены только при температуре 348 К. Дополнительные исследования по другим температурам позволили бы определить температурные кинетические зависимости процесса.

Данные замечания не снижают научной значимости работы.

По актуальности, объему выполненных исследований, достоверности результатов, научной новизне и практической значимости выводов диссертационная работа «Связь «структура-свойство» в ряду некоторых азот-, кислород- и серосо-

держащих ингибиторов окислительных процессов», представленная на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия соответствует п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней» правительства РФ от 24.09.2013 № 842.

Автор диссертационной работы Мартынова Юлия Зайнитдиновна достойна присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Старший научный сотрудник лаборатории математической химии Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук», д.ф.-м.н., доцент



К.Ф. Коледина

Дата « 06 » 02 2024 г.

Коледина Камила Феликсовна – доктор физико-математических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия, старший научный сотрудник лаборатории математической химии Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук».

Даю согласие на обработку персональных данных.

Почтовый адрес: 450075, Республика Башкортостан, г. Уфа, проспект Октября, 141.

Тел.: +79872558710

E-mail: koledinakamila@mail.ru

Подпись Колединой К.Ф. заверяю
Первый зам. директора Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Уфимский федеральный исследовательский центр РАН», кандидат химических наук



И.С. Шепелевич

