УТВЕРЖДАЮ

Директор Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук»

чл.-корр. РАН _____ А.А. Калачев

«24» 02 2026 года

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук»

Диссертация Нефедовой Анны Александровны «Молекулярное редактирование 2,3-дигидро-5*H*-тиазоло[3,2-*a*]пиримидин-3-оновой платформы: синтез спиро- и конденсированных гетероциклов» выполнена в лаборатории химии каликсаренов Института органической и физической химии им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук» (ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН).

В период подготовки диссертации и по настоящее время соискатель Нефедова А.А. является младшим научным сотрудником лаборатории химии каликсаренов ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН.

В 2022 г. Нефедова А.А. окончила Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет» по направлению 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия».

Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана в 2025 году ФИЦ КазНЦ РАН.

Научный руководитель – к.х.н. Агарков Артем Сергеевич, старший научный сотрудник лаборатории химии каликсаренов ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН.

Диссертационная работа Нефедовой А.А. обсуждалась на заседании расширенного научного семинара ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН по направлению «Органическая химия и химия биологически активных соединений» 27 января 2026 г. (протокол № 15 от 27.01.2026). На заседании присутствовали 39 сотрудников Института, в их числе члены диссертационного совета 24.1.225.01: д.х.н., проф., чл.-корр. РАН Антипин И.С.; д.х.н., доц. Семенов В.Э.; д.х.н., доц. Соловьева С.Е., д.х.н., доц. Мусина Э.И., д.х.н. Калинин А.А., д.х.н., профессор РАН Газизов А.Р., д.х.н., профессор Мамедов В.А., к.х.н., ученый секретарь Торопчина А.В.

В ходе обсуждения диссертации соискателю были заданы следующие вопросы:

д.х.н. Калинин А.А.: Что такое термин «молекулярное конструирование»? Нельзя ли его заменить, учитывая Вашу работу, на «синтез определенных структур»?

д.х.н., профессор Катаев В.Е.: В актуальности работы Вы рассматриваете два пути редактирования гетероциклических производных – базовые скелетные модификации и периферийное конструирование. К какому типу из них относится реакция, приводящая к триазолопиримидинам при восстановлении боргидридом натрия в присутствии оксида ванадия? Каков механизм этого взаимодействия?

д.х.н., профессор РАН Газизов А.Р.: В цели работы было указано, что планируются к синтезу производные, являющиеся перспективными с точки зрения биологической активности. Какая активность подразумевается?

д.х.н., доцент Мусина Э.И.: В работе рассмотрен дизайн хиральных цепочек в кристаллической фазе именно галогенсодержащих производных тиазолопиримидина. Можно ли предсказать поведение таких производных, содержащих другие функциональные группы или не содержащие вовсе?

д.х.н., профессор Катаев В.Е.: В работе представлены обширные данные по рентгеноструктурному анализу синтезированных производных, что является основной целью работы – синтез или кристаллическая структура?

д.х.н. Калинин А.А.: В протонном спектре синтезированных 2-арилметилиденовых производных тиазолопиримидина Вы акцентируете внимание на химические сдвиги экзоциклических метиновых протонов. Является ли протонный спектр единственным доказательством структуры именно Z-изомера? В какой области проявлялись бы сигналы, если образовывался бы Е-изомер?

д.х.н., профессор Катаев В.Е.: Что такое Е- и Z-изомеры? Можно ли применить к данным структурам терминологию *цис*/*транс*-изомерия?

д.х.н., доцент Семенов В.Э.: При описании механизма диполярного циклоприсоединения с Вашими структурами Вы применили термин «σ-дырочный эффект». Объясните, что Вы имели в виду. Это образование халькогенной связи?

д.х.н., профессор РАН Газизов А.Р.: Образование илидов – достаточно известный процесс. Зачем рассчитывать его образование при использовании квантово-химического подхода?

д.х.н. Калинин А.А.: На слайде 34 насколько было полезно использование микроволнового излучения? Как оптимизировали условия проведения реакции?

д.х.н., профессор Мамедов В.А.: Возможен ли переход цвиттер-иона А сразу в спиропроизводное Г в механизме перегруппировки 2-арилгидразоновых производных в триазолопиримидины? Возможно метанол никаким образом не участвует в механизме реакции.

На все поставленные вопросы соискатель дал исчерпывающие ответы.

С рецензией на работу выступила д.х.н. Чугунова Е.А.

Диссертационная работа Нефедовой Анны Александровны посвящена актуальной проблеме современной органической химии — разработке стереоселективных и экологичных методов синтеза сложных полигетероциклических

систем на основе тиазоло[3,2-*a*]пиримидина. Данные структуры представляют значительный интерес как перспективные платформы для создания новых биологически активных соединений и функциональных материалов. Исследование направлено на изучение малоизученной реакционной способности 2-замещенных производных тиазолопиримидина, в частности их участия в реакциях 1,3-диполярного циклоприсоединения и скелетных перегруппировках, что соответствует современным тенденциям «зеленой химии» и молекулярного дизайна.

Целью диссертационной работы является разработка эффективных и селективных методов синтеза поли(спиро)гетероциклических систем производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидина заданной стереохимии реакциями 1,3-диполярного циклоприсоединения 2-арилметилиденовых производных и циклизации 2-арилгидразонов тиазоло[3,2-*a*]пиримидина как перспективных биологически активных структур.

Структура диссертации. Диссертационная работа изложена на 173 страницах печатного текста и содержит 43 схемы, 44 рисунка, 25 таблиц и состоит из введения, литературного обзора, обсуждения результатов, экспериментальной части, заключения и списка литературы, включающего 166 ссылок на отечественные и зарубежные работы.

В первой главе диссертации представлен обзор литературы, посвященный рассмотрению химических превращений, протекающих по экзоциклическим двойным связям C=C и C=N на гетероциклических платформах.

Во второй главе (обсуждение результатов) описаны методики синтеза целевых соединений; детально изучены реакции [3+2]-диполярного циклоприсоединения 2-арилметилиденовых производных с различными азометинилидами; исследована новая перегруппировка 2-арилгидразонов в триазолопиримидины под действием микроволновой активации; проведен комплексный структурный анализ, включая установление стереохимии и изучение супрамолекулярной организации в кристаллической фазе; дана оценка биологической активности синтезированных соединений.

Третья глава содержит исчерпывающее описание экспериментальной части, включающее методики синтеза всех соединений, условия проведения реакций, спектральные и кристаллографические данные.

Диссертационная работа обладает высокой степенью ***новизны и практической значимости.***

Научная новизна проведенного исследования заключается в следующем: разработан отвечающий принципам «зеленой химии» one-pot метод диастереоселективного синтеза новых диспирогетероциклов на основе арилметилиденовых производных тиазолопиримидина реакцией 1,3-диполярного циклоприсоединения с азометинилидами; впервые установлена диастереоселективность реакции циклоприсоединения азометинилидов к 2-арилметилиденовым производным тиазоло[3,2-*a*]пиримидина и показано, что предпочтительным является образование продуктов *анти*-*эндо*-конфигурации; впервые обнаружена новая скелетная перегруппировка 2-арилгидразонов тиазоло[3,2-*a*]пиримидина в дигидро[1,2,4]триазоло[4,3-*a*]пиримидины, индуцируемая действием метанола и пиридина в условиях микроволновой активации; синтезирована и охарактеризована комплексом физико-химических методов библиотека из 82 новых 2-арилметилиденовых, 2-арилгидразоновых и диспироциклических производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидина и дигидро[1,2,4]триазоло[4,3-*a*]пиримидинов; установлены ключевые структурные факторы, влияющие на кристаллическую упаковку 2-арилметилиденовых производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидина; выявлена определяющая роль галогенной связи в формировании супрамолекулярных ансамблей в кристаллической фазе 2-арилметилиденовых, 2-арилгидразоновых и диспироциклических производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидина, содержащих атом галогена в 3- или 4-положениях ароматических фрагментов при 2 и 5 атомах углерода тиазоло[3,2-*a*]пиримидинового каркаса; впервые получены галогенсвязанные гомохиральные цепочки в кристаллах *пара*- и *мета*-замещенных 2-арилметилиденовых производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидина, что создает предпосылки для хиральной дискриминации и энантиоселективного разделения рацемических смесей.

Теоретическая и практическая значимость работы заключается в разработке новых путей синтеза гетероциклических производных: предложены регио- и диастереоселективные методы синтеза спиросочлененных тиазоло[3,2-*a*]пиримидинов с пирролидиновым или пирролизидиновым фрагментом на основе 1,3-диполярного циклоприсоединения азометинилидов к 2-арилметилиденовым производным

тиазоло[3,2-*a*]пиримидина, обнаружена новая перегруппировка в тиазолопиримидиновом ряду в условиях микроволновой активации, приводящая к образованию дигидро[1,2,4]триазоло[4,3-*a*]пиримидинов. Полученные в ходе выполнения диссертационной работы результаты служат фундаментальной основой для дальнейшей разработки перспективных синтетических платформ, направленных на создание новых подходов к синтезу ранее труднодоступных гетероциклических структур.

Полученные автором данные грамотно и четко описаны и доказаны. В работе был получен ряд новых соединений, структуры которых были подтверждены с использованием современных методов исследования, что обеспечило ***достоверность*** результатов исследований и их ***надежность***.

Выводы диссертации обоснованы, представляют собой логичный, достоверный материал, базирующийся на собственных экспериментальных данных. Работа написана доступным научным языком, единый стиль изложения материала не нарушен, текст построен последовательно, с подробным объяснением.

Основные результаты работы опубликованы в 5 статьях в изданиях, рекомендованных ВАК, а также имеются 8 тезисов докладов в материалах симпозиумов и конференций российского и международного уровня.

Принципиальных вопросов, затрагивающих суть работы и ее основное содержание, после прочтения представленной диссертации не возникает. Тем не менее, имеются следующие замечания и вопросы:

1. Автор диссертации в научной новизне пишет, что «Синтезирована и охарактеризована комплексом физико-химических методов библиотека из 82 новых производных ...», в экспериментальной части приведено описание только 80 новых соединений. При этом только для 21 соединения приведены данные ЯМР ^{13}C спектроскопии (всего 25% соединений) и только для 4 соединений - данные ИК-спектроскопии (5%). При этом часть данных уже содержится в опубликованных автором статьях, так для соединения **8.17** описание ИК спектра приведено в статье в *Organics*, для соединений **8.5**, **8.8** и **8.19** в статье в журнале *Russian Chemical Bulletin* приведено полное описание и ИК и ^{13}C ЯМР спектров. Для соединений **6** в обсуждении на стр. 79 написано, что «с целью получения дополнительных данных о стереохимическом строении полученных

производных были выполнены двумерные эксперименты NOESY ЯМР-спектроскопии», однако ни для одного из этих соединений в экспериментальной части не приводятся данные ЯМР ^{13}C спектроскопии. Необходимо синхронизировать недостающие данные со статей, а также дополнить для большинства соединений описание данными ИК- и ЯМР ^{13}C спектроскопии.

2. Проанализировав результаты скрининга биологической активности, я считаю, что целесообразно исключить данный раздел из диссертационной работы. Исследование цитотоксического действия было выполнено для ограниченной выборки синтезированных соединений. Наблюдаемая активность была зафиксирована лишь у одного производного, причем оно не обладало селективностью действия в отношении опухолевых клеточных линий. Полученные данные антимикробной активности не выявили выраженного ингибирующего или бактерицидного эффекта для изученных соединений. Таким образом, включение в диссертацию раздела с отрицательными и неселективными результатами нецелесообразно и может вызвать лишние вопросы по поводу заявляемых потенциальных биологических свойств соединений.
3. На стр. 61 приводится описание квантово-химического анализа профиля реакции изатина с саркозином и 2-арилметилиденового производного тиазоло[3,2-*a*]пиримидина. Однако, полностью отсутствует описание выбранного приближения и вычислительного метода расчета. Как следствие, отсутствует критическое обоснование выбора конкретного вычислительного метода, базисного набора и учтенных приближений. Не приведены аргументы, почему выбранный уровень теории адекватен для описания именно изучаемых систем, не описана сама процедура моделирования: использованные программные пакеты, детали геометрической оптимизации структур (реагентов, продуктов, интермедиатов, переходных состояний), проводились ли расчеты для подтверждения характера стационарных точек (минимумы, переходные состояния), подходы к поиску и верификации переходных состояний. Таким образом, данный раздел требует существенного расширения и углубления.

4. В разделе «Перегруппировка 2-арилгидразоновых производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидина в условиях микроволновой активации» перегруппировка происходит в присутствии пиридина. Проводились ли эксперименты по использованию других вторичных (например, пиперидин, морфолин) или третичных аминов (кроме упомянутого в работе триэтиламина) в данной реакции?
5. Для соединений **9** рекомендуется усилить доказательную базу, дополнив обсуждение описанием РСА, тем более они приведены в экспериментальной части.
6. Как осуществлялся контроль протекания реакций и на основании чего выбирались оптимальные условия? Если контроль за ходом реакции и чистотой полученных продуктов осуществляли с помощью ТСХ, необходимо прописать используемый элюент в каждом случае. Также в общем описании экспериментальной части указано, что диссертант в работе использовал колоночную хроматографию, однако ни для одного соединения в экспериментальной и в обсуждении не было описано ее применение.
7. На основании анализа содержания публикаций соискателя установлено, что статья "Synthesis and Structure of 6-Acetyl-2-Arylhydrazone Derivatives of Thiazolo[3,2-*a*]Pyrimidine", опубликованная в журнале «Organics», посвящена синтезу и изучению свойств 6□ацетильных производных тиазоло[3,2□*a*]пиримидина. В то же время, в диссертационной работе основное внимание уделено исследованиям 6□этоксикарбонильных производных данных гетероциклов. Таким образом, считаю, что данная публикация не относится к теме диссертационного исследования и предлагаю исключить данную статью из списка работ, отражающих научные результаты диссертации.

Замечания по оформлению и опечатки:

• Спектры углерода следует привести к единому стилю и округлить до десятичного знака, как это общепринято.

• В разделе "Экспериментальная часть" необходимо добавить информацию о приборе, на котором проводился элементный анализ. В тексте должно быть четко указано, что прибор не определяет содержание кислорода напрямую, а его содержание рассчитывается по разности до 100%, либо лучше вообще брать кислород из

вычисленных и найденных значений, так как он не определялся. В общем описании методов ЯМР спектроскопии следует добавить краткий абзац, поясняющий условия снятия двумерных спектров.

• Опечатка в таблице 2.2 для соединения 3.16 (стр. 43): значение 3.12 вместо 6.16

• Стр. 142 – опечатки для масс-спектра и элементного анализа для соединения 8.17.

• Для соединения 4.7 сигналы метильных протонов при атоме углерода C_{10} в обсуждении диссертации (стр. 55) описаны в виде триплетов в области 3.43-3.81 м.д., в то же время в описании, приведенном в экспериментальный части (стр. 117) - в виде мультиплета.

• В описании спектра ЯМР ^{13}C для соединения 4.7 на стр. 117 пропущен сигнал 131.3.

• Таблица 2.14 – исправить нумерацию соединений.

• Отсутствует список сокращений и условных обозначений, несмотря на то что указан в оглавлении.

Научная новизна, практическая значимость и достоверность полученных результатов экспериментов соответствуют критериям, предъявляемым ВАК РФ к квалификационным работам на соискание ученой степени кандидата наук.

Считаю, что диссертационная работа Нефедовой Анны Александровны соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, и может быть представлена в диссертационный совет по специальности 1.4.3. Органическая химия.

С поддержкой работы выступили д.х.н., чл.-корр. РАН, проф. Антипин И.С., д.х.н., доц. Семенов В.Э.

По итогам обсуждения принято следующее **Заключение**.

Работа актуальна.

Поиск новых гетероциклических структур - перспективных платформ для создания лекарственных препаратов и функциональных материалов - вызывает в настоящее время большой интерес исследователей. Особый интерес представляют хиральные молекулы, поскольку их стереохимия напрямую влияет на биологическую активность и физико-химические свойства. Среди таких гетероциклических

производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидины обладают структурным разнообразием и высокой реакционной способностью, что делает их исключительно привлекательными объектами для конструирования сложных молекулярных архитектур. Их производные проявляют широкий спектр биологической активности, описанной в литературе, включая противоопухолевую, антиоксидантную, противомикробную, противотуберкулезную, гипотензивную, противовоспалительную, антибактериальную, снотворную и т.д. Такое разнообразие видов биоактивности является перспективным для применения производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидинов в качестве основы для создания новых лекарственных средств. Способность к модификации и наличие сопряженных π-систем позволяют также рассматривать их как перспективные платформы для создания органических люминофоров, сенсоров или функциональных материалов для органической электроники.

Удобными реакционными центрами для направленного конструирования гетероциклических производных являются экзоциклические двойные связи, которыми обладают 2-арилметилиденовые производные (C=C) и 2-арилгидразоны (C=N) тиазоло[3,2-*a*]пиримидина. За счет сопряжения с карбонильной группой тиазольного фрагмента, C=C или C=N связи являются электронодефицитными и, следовательно, привлекательными для реакций с нуклеофилами - присоединению по Михаэлю, нуклеофильном присоединении к гидразонам, а также в качестве диполярофила в реакциях с 1,3-диполями. Применение атом-экономных реакций нуклеофильного присоединения, [3+2]-циклоприсоединения, не просто повышает экологичность процессов, но и открывает доступ к новым химическим превращениям, трудноосуществимым классическими методами.

Реакции [3+2]-циклоприсоединения являются мощным инструментом разработки эффективных и стереоселективных методов синтеза сложных гетероциклических систем с несколькими стереоцентрами. Азометинилиды, генерируемые *in situ* в качестве 1,3-диполей, за один синтетический шаг способны образовывать сложные гетероциклические фрагменты, которые могут влиять на биологическую активность и физико-химические свойства целевых продуктов. Это открывает прямой путь к созданию библиотек структурно-сложных и функционально-разнообразных соединений. Селективное образование диастереомеров является важным для создания структур с заданными стереохимическими параметрами, что

крайне важно для установления надежных зависимостей «структура-свойство». С другой стороны, селективное присоединение спиртов по электрофильному атому углерода C=N-связи 2-арилгидразоновых производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидинов с О-нуклеофилами, позволяет эффективно вводить в молекулу кислородсодержащие фрагменты, что является инструментом управления липофильностью, растворимостью и способностью к образованию водородных связей, критически важными для проявления фармакологического эффекта.

Комплексное решение значимой научной проблемы разработки стереоселективного и экологичного подхода к синтезу новых полигетероциклических структур на основе тиазоло[3,2-а]пиримидина - перспективных для фармакологии и материаловедения, несомненно, является актуальным.

Научная новизна работы.

1. Разработан отвечающий принципам «зеленой химии» one-pot метод диастереоселективного синтеза новых диспирогетероциклов на основе арилиденовых производных тиазолопиримидина реакцией 1,3-диполярного циклоприсоединения с азометинилидами, генерируемыми *in situ* из 1,2-дикетонов и N-замещенных аминокислот (N-метилглицин и L-пролин).

2. Впервые установлена диастереоселективность реакции циклоприсоединения азометинилидов к 2-арилметилиденовым производным тиазоло[3,2-*a*]пиримидина, показано, что предпочтительным является образование продуктов *анти-эндо*-конфигурации.

3. Впервые (на примере 6 соединений) обнаружена новая скелетная перегруппировка 2-арилгидразонов тиазоло[3,2-*a*]пиримидина в дигидро[1,2,4]триазоло[4,3-*a*]пиримидины, индуцируемая действием метанола и пиридина в условиях микроволновой активации.

4. Синтезирована и охарактеризована комплексом физико-химических методов библиотека из 82 новых производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидина, а именно 2-арилметилиденовых, 2-арилгидразоновых, диспироциклических производных и дигидро[1,2,4]триазоло[4,3-*a*]пиримидинов с потенциальной биологической активностью.

5. Впервые установлены ключевые структурные факторы, влияющие на кристаллическую упаковку 2-арилметилиденовых производных тиазоло[3,2-

a]пиримидина: положение заместителя в ароматическом фрагменте при пятом атоме углерода тиазолопиримидинового каркаса и арилметилиденового фрагмента.

6. Выявлена определяющая роль галогенной связи в формировании супрамолекулярных ансамблей в кристаллической фазе 2-арилметилиденовых, 2-арилгидразоновых и диспироциклических производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидина, содержащих атом галогена в 3- или 4-положениях ароматических фрагментов при 2 и 5 атомах углерода тиазоло[3,2-*a*]пиримидинового каркаса.

7. Впервые получены галогенсвязанные гомохиральные цепочки в кристаллах *пара*- и *мета*-замещенных 2-арилметилиденовых производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидина, что создает предпосылки для хиральной дискриминации и энантиоселективного разделения рацемических смесей..

Практическая значимость.

Разработаны новые пути синтеза гетероциклических производных: предложены регио- и диастереоселективные методы синтеза спиросочлененных тиазоло[3,2-*a*]пиримидинов с пирролидиновым или пирролизидиновым фрагментом на основе 1,3-диполярного циклоприсоединения азометинилидов к 2-арилметилиденовым производным тиазоло[3,2-*a*]пиримидина, обнаружена новая перегруппировка в тиазолопиримидиновом ряду в условиях микроволновой активации, приводящая к образованию дигидро[1,2,4]триазоло[4,3-*a*]пиримидинов, что позволяет в дальнейшем в одну стадию получать широкий ряд соединений с различными функциональными заместителями.

Ценность научных работ соискателя заключается в том, что в данной работе разработан эффективный однореакторный метод диастереоселективного синтеза полигетероциклических диспиросочленённых новых, характеризующихся наличием четырех хиральных центров, соединений реакциями [3+2]-циклоприсоединения 2-арилметилиденов тиазоло[3,2-*a*]пиримидина с азометинилидами, генерируемыми in situ из аценафтохинона, изатина и саркозина. Установлено, что реакции [3+2]-циклоприсоединения протекают по механизму *анти-эндо*-присоединения азометинилида к диполярофилу, обеспечивая высокую диастереоселективность и образование рацемических смесей, состоящих из двух энантиомеров, имеющих абсолютные конфигурации: 2-*S*, 5-*R*, 9-*S*, 12-*S* и 2-*R*, 5-*S*, 9-*R*, 12-*R*. Впервые обнаружена перегруппировка 2-арилгидразонов тиазоло[3,2-*a*]пиримидин-3-онов в

дигидро[1,2,4]триазоло[4,3-*a*]пиримидины в условиях микроволновой активации в метаноле в присутствии пиридина.

Личное участие автора.

Автор диссертации участвовал в постановке цели и задач исследования, анализе и обобщении литературных данных, реализации экспериментальных исследований, обработке и обсуждении их результатов, подготовке публикаций и представлении докладов по теме диссертационной работы на конференциях различного уровня. Экспериментальные данные, приведенные в диссертационной работе, получены автором лично, либо при его непосредственном участии.

Результаты работы обоснованы и достоверны.

Достоверность исследования и его результатов подтверждается большим экспериментальным материалом с использованием современных физических и физико-химических методов анализа.

Основные результаты работы достаточно полно отражены в 5 научных статьях, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК при Минобрнауки России.

1. Agarkov, A.S. (2-Hydroxy-3-Methoxybenzylidene)thiazolo[3,2-a]pyrimidines: Synthesis, Self-Assembly in the Crystalline Phase and Cytotoxic Activity / A.S. Agarkov, **A.A. Nefedova**, E.R. Gabitova, D.O. Mingazhetdinova, A.S. Ovsyannikov, D.R. Islamov, S.K. Amerhanova, A.P. Lyubina, A.D. Voloshina, I.A. Litvinov, S.E. Solovieva, I.S. Antipin // International Journal of Molecular Sciences. – 2023. – V. 24. – № 3. – P. 2084.

2. Furer, V.L. A computational and spectral analysis of 2-arylhydrazone thiazolo[3,2-a]pyrimidine derivatives containing p-carboxyphenyl fragment / V.L. Furer, A.S. Agarkov, A.E. Vandyukov, E.R. Gabitova, **A.A. Nefedova**, S.E. Solovieva, I.S. Antipin // Structural Chemistry. – 2025. – V. 36. – №2. – P. 621-636.

3. Mingazhetdinova, D.O. Supramolecular interplay: how non-covalent bonds affect the crystal packing of 2-arylmethylidenethiazolo[3,2-a]pyrimidines / D.O. Mingazhetdinova, **A.A. Nefedova**, A.A. Kozhikhov, A.S. Agarkov, I.A. Litvinov, L.V. Frantsuzova, D.R. Islamov, S.E. Solovieva, I.S. Antipin // CrystEngComm. – 2025. – Т. 27. – №. 42. – С. 6884-6893.

4. Agarkov, A.S. Structure-forming non-covalent bonding of new 2-(4-carboxyphenylhydrazinylidene)[1,3]thiazolo[3,2-a]pyrimidines in the crystalline phase /

A.S. Agarkov, D.O. Mingazhetdinova, **A.A. Nefedova**, E.R. Gabitova, A.S. Ovsyannikov, I.A. Litvinov, D.R. Islamov, P.V. Dorovatovskii, S.E. Solovieva, I.S. Antipin // Russian Chemical Bulletin. – 2024. – V. 73. – № 8. – P. 2350-2369.

5. Agarkov, A. Synthesis and Crystal Structure of Ethyl 5-(4-Bromophenyl)-7-methyl-3-oxo-2,3-dihidro-5H-thiazolo[3,2-a]pyrimidine-6-carboxylate / A. Agarkov, **A. Nefedova**, A. Ovsyannikov, I. Litvinov, S. Solovieva, I. Antipin // MolBank. – 2023. – V. 2023. – №1. – P. M1581.

В диссертации соискатель ссылается на собственные опубликованные работы. В тексте диссертации отсутствуют материалы без ссылки на автора или источник заимствования.

По материалам диссертации также опубликованы тезисы 8 докладов на международных и всероссийских конференциях.

Специальность, которой соответствует диссертация. Диссертационная работа Нефедовой А.А. соответствует паспорту специальности 1.4.3. Органическая химия по ряду пунктов: 1. Выделение и очистка новых соединений; 2. Открытие новых реакций органических соединений и методов их исследования; 3. Развитие рациональных путей синтеза сложных молекул; 7. Выявление закономерностей типа «структура–свойство»; 10. Исследование стереохимических закономерностей химических реакций и органических соединений.

Расширенный научный семинар ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН по направлению «Органическая химия и химия биологически активных соединений» считает, что по актуальности, научной и практической значимости, достоверности полученных результатов, объему, целостности и законченности диссертационная работа Нефедовой А.А. полностью соответствует требованиям, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата химических наук.

Расширенный научный семинар по направлению «Органическая и медицинская химия, нефтехимия, экология» (протокол № 15 от 27.01.2026) рекомендовал Учёному совету выдать заключение по диссертационной работе Нефедовой А.А. Присутствовали: 39 чел. Итоги голосования: «за» – 39, «против» – нет, «воздержавшихся» – нет.

Заключение рекомендовано к утверждению на заседании Ученого Совета ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН (протокол № 2 от 18.02.2026г.). Рекомендации и замечания, высказанные на научном семинаре, диссертантом учтены, и соответствующие изменения внесены в текст диссертации. Из 27 членов списочного состава Ученого совета присутствовали: 19 чел. Итоги голосования: «за» – 19, «против» – нет, «воздержавшихся» – нет.

Руководитель
ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН,
доктор химических наук, член-корреспондент РАН А.А. Карасик

Председатель научного семинара по направлению
«Органическая химия и
химия биологически активных соединений»,
доктор химических наук, профессор В.А. Мамедов

Ученый секретарь
ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН,
кандидат химических наук А.В. Торопчина