

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации *Герасимовой Дарьи Павловны* «Экспериментальное и теоретическое исследование гомо- и гетеро-хирального типов связывания производных 5-гидрокси-3-пирролин-2она», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия

Одной из главных фундаментальных задач кристаллохимии является поиск и установление корреляции “состав-структура-свойство”, что открывает возможности прогноза и последующего направленного дизайна соединений с желаемыми физическими свойствами. Но в случае органических соединений, обладающих хиральностью, данный вопрос усложняется возможностью самих соединений кристаллизоваться в виде энантиомеров или различного типа рацематов под действием внешних факторов или в их отсутствие. И несмотря на то, что вопросом кристаллизации хиральных соединений занимаются различные группы ученых, эта область исследований, а именно поиск корреляции “структура-свойство” в кристаллах хиральных соединений, не теряет своей актуальности в связи с появлением новых классов соединений.

Работа Герасимовой Д.П. посвящена исследованию и выявлению общих закономерностей спонтанного разделения на примере интересного и перспективного класса соединений - производных *N*-замещенных 5-гидрокси-3-пирролин-2-она. Автором проделан большой объем работы, актуальность, научная новизна и практическая значимость которой не вызывает сомнений. В ходе выполнения исследований были установлены структурные факторы образования рацемических конгломератов. Проведен подробный анализ межмолекулярного связывания и показаны различия в гомо- и гетерохиральных типах связывания в кристаллах тиоэфиров. Выявлены не только супрамолекулярные мотивы, которые воспроизводятся как в кристаллах рацемических конгломератов, так и в кристаллах рацемических соединений, но и объяснена причина их воспроизводимости, которая заключается в реализации дополнительных межмолекулярных взаимодействий более слабого порядка.

По автореферату сформулировано несколько вопросов:

1. Автор не везде указывает из какого растворителя кристаллизовали ту или иную полиморфную модификацию, как например в случае соединения 1. Важна ли в целом природа растворителя (полярность, протонность) при спонтанной кристаллизации?
2. Не совсем ясно, в чем заключалось “дважды энантиофобное” поведение при кристаллизации соединения 6.

3. Что представляют собой исходные образцы, которые брали для кристаллизаций?

Проводились ли для них порошковые дифракционные исследования?

Также в автореферате не хватило таблицы с основными кристаллохимическими параметрами исследованных соединений, так как обсуждалась изоструктурность ряда объектов.

Несмотря на имеющиеся вопросы, работа выполнена на высоком экспериментальном уровне, а комбинированное использование нескольких современных методов исследования (РСА, ИК, ДСК) в совокупности с квантово-химическими расчетами приводят к согласованным и достоверным результатам. Результаты работы были представлены на Российских и международных конференциях и опубликованы в 6 статьях в рецензируемых российских и международных журналах.

На основании представленного автореферата можно заключить, что Герасимовой Д.П. выполнена законченная научно-исследовательская работа, которая удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук. Автор – Герасимова Дарья Павловна – заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

кандидат химических наук, доцент, с.н.с. лаб.№33
Института органической химии
им. Н.Д. Зелинского РАН
119991, г. Москва, Ленинский проспект, 47;
mminyayev@ioc.ac.ru

Миняев Михаил Евгеньевич