

Отзыв на автореферат диссертации

Герасимовой Дарьи Павловны «Экспериментальное и теоретическое исследование гомо- и гетерохирального типов связывания производных 5-гидрокси-3-пирролин-2-она», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Хорошо известно, что хиральность соединений имеет большое значение для химических и биохимических систем и открывает множество возможностей для различных направлений исследований. Получение чистых энантиомеров важно не только для фармацевтической промышленности, но также для агрохимии и биотехнологии. Кристаллографический подход – рассмотрение всех межмолекулярных взаимодействий в кристалле и выявление преимуществ гомохиральных взаимодействий в хиральных кристаллах по сравнению с гетерохиральными в рацемических – продолжает оставаться актуальным при получении новых классов хиральных веществ и рассмотрении разных типов межмолекулярных взаимодействий. Именно в этой **актуальной** области выполнена диссертационная работа Герасимовой Д.П., посвященная выявлению факторов, определяющих гомо- и гетерохиральный тип связывания в кристаллах производных 5-гидрокси-3-пирролин-2-она.

Диссертационная работа обладает **научной новизной, теоретической и практической значимостью**. Среди полученных результатов можно выделить следующие.

Герасимова Д.П. **впервые** подробно изучила феномен «двойной энантиофобности» при кристаллизации рацемических смесей хиральных соединений и уникальный фазовый переход «рацемический конгломерат 1 – рацемический конгломерат 2». Выявлено фундаментальное различие гомо- и гетерохирального типов связывания в серии тиоэфиров *N*-замещенных 5-гидрокси-3-пирролин-2-онов.

Автор на примере серии производных 5-гидрокси-3-пирролин-2-она показала, что проявление хиральности в кристаллах тесно связано с супрамолекулярной структурой, следовательно, небольшие структурные изменения на молекулярном уровне могут вызвать значительные изменения за пределами молекулы и повлиять на образование гетеро- и гомохирального кристалла.

Наблюдаемые корреляции между особенностями кристаллического строения и предпочтением образования одной из возможных форм, могут быть использованы при планировании процессов кристаллизации в хиральных системах родственных или близких по строению соединений с целью разделения смесей их оптических изомеров при разработке новых препаратов для медицины. Понимание закономерностей образования различных кристаллических фаз крайне важно для создания конструктивной базы современных исследований по обнаружению соединений с выраженной биологической активностью.

Структурные данные описанных соединений добавлены в Кембриджский банк структурных данных и доступны для мировой научной общественности.

К достоинствам диссертационного исследования следует отнести удачное сочетание физических методов исследования строения изученных соединений и квантово-химических расчетов, позволившее получить интересные результаты.

Достоверность результатов и **обоснованность** сделанных на их основе выводов определяется богатым экспериментальным и расчетным материалом и высоким теоретическим уровнем его обсуждения.

Герасимовой Д.П. выполнен большой объем экспериментальной работы с использованием современных физических методов исследования структуры и свойств веществ: монокристалльный рентгеноструктурный анализ, порошковая дифрактометрия, ДСК, ИК спектроскопия. Результаты исследований широко представлены в печати (6 статей в журналах, рекомендованных ВАК) и хорошо апробированы на международных конференциях (8 тезисов докладов). Работа проведена при финансовой поддержке грантов РФФИ.

По автореферату диссертации имеются замечания, никоим образом не влияющие на общую положительную оценку работы. В автореферате не приведены программы, методы и базисы, использованные для теоретических расчетов. Встречаются неудачные выражения, например, на странице 16 «*Совокупность* вторичных межмолекулярных взаимодействий дополнительно *сшивает ...*» и др. Мелкие рисунки затрудняют понимание текста.

Считаю, что по актуальности темы, объему выполненных исследований, новизне полученных результатов, методам исследования и практической значимости диссертационная работа соответствует пункту 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (Постановление Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г.), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, **Герасимова Дарья Павловна**, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности **1.4.4. Физическая химия**.

Профессор кафедры физической химии
Химического института им. А.М. Бутлерова
ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский)
федеральный университет»,
доктор химических наук
(специальность 02.00.04 – физическая химия),
профессор

Верещагина Яна Александровна
01.04.2024 г.

КФУ, ул. Кремлевская, 18, г. Казань, 420008. Тел. (843)2337606; e-mail: jveresch@kpfu.ru

