

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Ившина Камиля Анатольевича** «*Супрамолекулярная организация и природа межмолекулярных взаимодействий в комплексах с переносом заряда на основе полициклических ароматических соединений и ряда акцепторов хиноидной структуры*», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – «Физическая химия»

Актуальность. Расположение молекул в молекулярных кристаллах определяется преимущественно межмолекулярными взаимодействиями, однако, надежное предсказание кристаллических упаковок продолжает оставаться нерешенной задачей. Наряду с разработкой теоретических подходов к ее решению, целесообразен эмпирический анализ кристаллохимических данных, направленный на установление структурных закономерностей для последующего применения их в целенаправленном синтезе кристаллических твердых форм с заранее заданной структурой и свойствами. В Институте органической и физической химии им. А.Е. Арбузова РАН много лет ведутся структурные исследования новых комплексов с переносом заряда на основе полициклических ароматических углеводов современными физико-химическими методами, в том числе рентгеноструктурным анализом (РСА) и квантовой химией.

Диссертационная работа Ившина Камиля Анатольевича направлена на рентгеноструктурное и квантово-химическое исследование новых комплексов с переносом заряда на основе полициклических ароматических соединений и ряда акцепторов хиноидной структуры, а также новых металлокомплексов при взаимодействии фталоцианина марганца(II) с тетрацианохинодиметаном и его перфторированным производным.

Научная новизна диссертационной работы Камиля Анатольевича заключается в определении строения методом РСА новых вышеназванных комплексов, в изучении молекулярной и супрамолекулярной структуры этих соединений с использованием всех современных методов и программ, в том числе DFT-расчетов и топологического анализ методом Р. Бейдера «Атомы в молекулах» для выявления основных внутри- и межмолекулярных взаимодействий, а также для получения количественных значений энергии межмолекулярных взаимодействий и величин переноса заряда.

Достоверность выполненных автором исследований не вызывает сомнений.

Замечания по диссертационной работе

1. Основные утверждения автора по супрамолекулярной организации кристаллов строятся на основе анализа сокращенных по сравнению суммой ван-дер-ваальсовых радиусов, контактов, однако, в тексте автореферата не приводится (кроме расстояний для π -стекинга) **диапазон значений** сокращенных контактов ни для F...F, ни для H...F, ни для C...F, ни для H...N и т.д.. Также не указано какой

системой ван-дер-ваальсовых радиусов пользовался диссертант, т.к. на данном этапе в литературе их существует несколько: по Бонди, по Полингу, по Зефирову, по Роланду и Тейлору.

2. На стр. 17 автор указывает на наличие стабилизирующих Н...Н взаимодействий. Однако, до сих пор это утверждение считается спорным, до недавнего времени сокращенные контакты между атомами водорода считались вынужденными. Чтобы считать, что это структурообразующее взаимодействие, мало опираться только на геометрические характеристики.

3. В автореферате не отражена взаимосвязь между межмолекулярными взаимодействиями, на основе которых выявляется супрамолекулярная организация сокристаллов, и их физическими свойствами.

4. «Смешная» опечатка на 2-ой странице автореферата в названии ведущей организации.

В целом автореферат на диссертационную работу «Супрамолекулярная организация и природа межмолекулярных взаимодействий в комплексах с переносом заряда на основе полициклических ароматических соединений и ряда акцепторов хиноидной структуры», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – «Физическая химия» оставляет положительное впечатление, а её автор, **Ившин Камиль Анатольевич**, заслуживает присвоения ему ученой степени кандидата химических наук по специальностям 1.4.4 – Физическая химия.

Багрянская Ирина Юрьевна

доктор химических наук, ведущий научный сотрудник
ФГБУН Новосибирского института органической химии
им. Н.Н. Ворожцова СО РАН

“ 20 ” 05 2024 г.

Багрянская И.Ю.

Подпись д.х.н, в.н.с. И.Ю. Багрянской

Подтверждаю Ученый секретарь ФГБУН Новосибирского института
органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН

“ 20 ” 05 2024 г.

Бредихин Р.А.

630090, г. Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, д. 9

Тел.: (383) 330-88-50, факс: (383) 330-97-52

E-mail: benzol@nioch.nsc.ru <http://www.nioch.nsc.ru>