

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», представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Многокомпонентные кристаллы комплексов с переносом заряда обладают донорными и акцепторными характеристиками, совокупность, которых приводит к появлению функциональных свойств, не проявляющихся в их отдельных компонентах. Разнообразие донорных и акцепторных взаимодействий предоставляет широкие возможности для создания новых многокомпонентных систем. Потому сокристаллы являются перспективным классом для поиска новых органических молекулярных материалов и интенсивно исследуются современными физическими методами. Поэтому цель данной диссертационной работы - установление взаимосвязи между межмолекулярными взаимодействиями, супрамолекулярной организацией молекул, величиной переноса заряда и физическими свойствами сокристаллов на основе ароматических органических и металлсодержащих соединений и хиноновых производных - является актуальной.

Диссертант определил молекулярную и кристаллическую структуру ряда новых сокристаллов комплексов с переносом заряда на основе полициклических ароматических углеводородов в качестве доноров и фторсодержащих производных TCNQ и PFAQ в качестве акцепторных молекул. Установил закономерности влияния топологии электронной плотности донорных молекул и относительного размера донорных и акцепторных составляющих и слабых F...F и водородных связей на супрамолекулярную организацию сокристалла и величину переноса заряда. Экспериментально получил распределение электронной плотности в сокристалле тетрацен/F4TCNQ и теоретически рассчитал электронную плотность в соединениях антрацен/F2TCNQ, тетрацен/F2TCNQ и хризен/F2TCNQ, что позволило проникнуть в природу взаимодействий молекул в этих сокристаллах. Также установлена молекулярная и кристаллическая структура продуктов реакции MnPc с акцепторными молекулами TCNQ и F4TCNQ, структура комплекса MnPc с 4- (дицианометанидо)тетрафторбензоат дианионом и супрамолекулярная организация сокристаллов $MnPc \cdot 2(H_2O)$ с анион-радикалами TCNQ⁻ и F4TCNQ⁻, а также их магнитные свойства.

Полученные в данной работе результаты являются новыми и представляют научный и практический интерес. Актуальность, практическая значимость, новизна и достоверность полученных результатов диссертационной работы, а также личный вклад автора сомнений не вызывают. Результаты диссертационной работы докладывались на российских и международных конференциях и опубликованы в научных журналах, входящих в список, рекомендованный ВАК РФ.

Замечание: Понятие переноса заряда не имеет однозначного определения. К сожалению, автор диссертации не обосновал выбор примененного им подхода к этому эффекту.

Указанный недостаток не умаляет значимость и качество работы.

Судя по автореферату, можно заключить, что диссертационная работа Ившина К. А. выполнена на высоком научном уровне, ее результаты опубликованы в ведущих

международных и отечественных профильных журналах. По актуальности, новизне, уровню решения научной задачи, практической значимости полученных результатов диссертационная работа отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям «Положения о присуждении учёных степеней» (Постановление Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842 с изменениями и дополнениями), а её автор Ившин Камилль Анатольевич заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Доктор физико-математических наук

(специальность 01.04.17 - химическая физика,

горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества),

Заслуженный деятель науки Российской Федерации,

профессор, заведующий кафедрой квантовой химии

ФГБОУВО «Российский химико-технологический

университет им. Д.И. Менделеева»

Цирельсон Владимир Григорьевич

26.04.2024 г.

Адрес:

ФГБОУВО РХТУ им. Д.И. Менделеева,

кафедра квантовой химии,
125047 Москва, Миусская площадь, 9.

Тел.: +7-499-978-9584

E-mail: tsirelson.v.g@muctr.ru