

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

Ключевым аспектом в создании органических функциональных материалов является умение контролировать и управлять супрамолекулярной организацией тектонов с помощью супрамолекулярных синтонов. Особое интерес привлекает сочетание в одном кристалле донорных и акцепторных компонентов (т.н. сокристаллы), что позволяет направленно выбирать строительные блоки, используя известные межмолекулярные взаимодействия. Тем не менее, несмотря на большое количество известных сокристаллов комплексов с переносом заряда, до сих пор остается ключевая проблема предсказания их кристаллической упаковки, зная только структуру отдельных компонентов. Причиной этих трудностей является то, что супрамолекулярная организация молекул в кристалле определяется тонким балансом множества межмолекулярных взаимодействий, включая слабые дисперсионные и $\pi \cdots \pi$ взаимодействия, водородные связи, галоген-галоген взаимодействия и другие супрамолекулярные связи. Таким образом, необходимы более глубокие исследования природы нековалентных взаимодействий, их силы и направленности; взаимосвязи между межмолекулярными взаимодействиями, кристаллической упаковкой и физическими свойствами соединений. Решение этих проблем является **актуальной** задачей, которая является одним из современных подходов к рациональному дизайну сокристаллов с заданными свойствами.

Цель и задачи работы. Целью работы было 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. Достижение поставленных целей включало решение следующих задач:

- установление закономерностей кристаллического строения ряда бикомпонентных сокристаллов с переносом заряда на основе PFAQ, F₁TCNQ, F₂TCNQ, F₄TCNQ и ароматических углеводородов различного размера и топологии и MnPc. Определение основных факторов, влияющих на супрамолекулярную организацию молекул в сокристаллах;

- оценка механизма переноса заряда и количества переноса заряда в исследуемых системах на основе структурных данных, спектроскопических методов и прецизионных рентгеновских экспериментов в сочетании с квантово-химическими расчетами. Изучение электронной структуры, электрохимических и оптических свойств;
- исследование распределения теоретической статической деформационной электронной плотности сокристаллов антрацен/ F_2TCNQ , тетрацен/ F_2TCNQ и хризен/ F_2TCNQ с целью выяснения природы нековалентных взаимодействий;
- исследование распределения экспериментальной статической деформационной электронной плотности в сокристалле тетрацен/ F_4TCNQ с целью выяснения природы нековалентных взаимодействий;
- изучение электронного строения и магнитных свойств многокомпонентных кристаллов с переносом заряда на основе $TCNQ$, F_4TCNQ и $MnPc$.

По мнению составителя отзыва, все основные результаты были получены соискателем в рамках данного цикла исследований. Отмечаю, что содержательная часть диссертационной работы **полностью соответствует** заявленной **цели исследования** и сформулированным **задачам**, по каждой из которых соискателю удалось достичь научно- и практически значимых результатов.

Считаю, в ходе выполнения исследований соискатель получил, описал и обсудил обширный теоретический материал, который по своей **новизне**, **объёму** и научному **качеству** является **достаточным** для кандидатской диссертационной работы. Основные результаты, полученные соискателем, были опубликованы в 6 статьях в рецензируемых научных изданиях, индексируемых международными базами данных (Web of Science, Scopus), а также прошли апробацию в виде 6 докладов на российских и международных конференциях. Стоит отметить, что представленная диссертационная работа является **логически завершенным** самостоятельным научным исследованием.

Основываясь на автореферате, можно с уверенностью утверждать, что диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне, ее результаты опубликованы в ведущих международных и отечественных профильных журналах. Автореферат в полной мере отражает основные положения диссертационной работы.

По актуальности, новизне, уровню решения научной задачи, практической значимости полученных результатов диссертационная работа «Супрамолекулярная организация и природа межмолекулярных взаимодействий в комплексах с переносом заряда на основе полициклических ароматических соединений и ряда акцепторов

хиноидной структуры» 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 Камиль Анатольевич, заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Составитель отзыва:

Вацадзе Сергей Зурабович, профессор РАН

доктор химических наук по специальности 02.00.03 – органическая химия

заведующий лабораторией супрамолекулярной химии (№2)

ФГБУН Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН

Адрес: 119991, Москва, Ленинский проспект, д. 47

Телефон: +7 (499) 137-2944

Электронный адрес: vatsadze@ioc.ac.ru

Дата «17» мая 2024 г.