

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 ученой степени кандидата химических наук по специальности
1.4.4. Физическая химия

Диссертационная работа Ившина К.А. посвящена исследованию супрамолекулярного строения и нековалентных взаимодействий в одном из наиболее перспективных классов органических молекулярных материалов – многокомпонентных кристаллах. Очевидно, что объединение молекул с разными свойствами в одном кристалле приведет к формированию материала, обладающего новым индивидуальным набором свойств, которые достаточно просто настраивать, варьируя количество, соотношение и природу веществ, составляющих сокристалл, а значительно более простой по сравнению с синтезом новых соединений процесс получения сокристаллов делает их еще более привлекательными с точки зрения финансов, технологий и человеческих ресурсов. В диссертации представлено исследование сокристаллов, образованных за счет переноса заряда из ароматических донорных и акцепторных молекул.

В рамках работы проведено подробное экспериментальное и теоретическое исследование сокристаллов ароматических и хиноновых соединений, установлены зависимости их строения от размера молекул их компонентов, а также их донорной и акцепторной способностей. Определены и охарактеризованы нековалентные взаимодействия во всех исследованных сокристаллах, оценена величина переноса заряда. Показано, что при взаимодействии фталоцианина марганца(II) с тетрацианохинодиметаном и его перфторированным производным образуются комплексы, в которых ион марганца имеет степень окисления III, и находится в высокоспиновом состоянии $S = 2$, что приводит к увеличению магнитного момента иона металла.

При прочтении автореферата возникают некоторые вопросы и замечания.

1) В автореферате представлено достаточно много данных, полученных в результате квантово-химических расчетов, однако не всегда понятно

- какие именно ассоциаты были выбраны для расчета, почему, проводилась ли оптимизация геометрии?
- как рассчитывался перенос заряда?

- как оценивалась энергия взаимодействий?

2) В работе обсуждается размер молекул, а также донорных и акцепторных фрагментов, однако нет четкой формулировки, какой именно размер имеется в виду.

3) Для сокристаллов толуол/FxTCNQ, тетрацен/F4TCNQ, а также MnPc и TCNQ и F4TCNQ не приводятся геометрических параметров нековалентных взаимодействий, кроме того отсутствуют необходимые величины отклонений при описании структур: «имеет неплоскую структуру», «практически параллельны» (с.8)

4) По тексту встречается ряд не очень удачных формулировок: «л...л взаимодействия во всех сокристаллах малы» (с.8), «акцептор-акцептор взаимодействия минимальны» (с.13) и т.д., опечаток и речевых ошибок, не изменяющих сути работы.

Считаю, что высказанные замечания не носят принципиального характера, а диссертация Ившина Камиля Анатольевича «Супрамолекулярная организация и природа межмолекулярных взаимодействий в комплексах с переносом заряда на основе полициклических ароматических соединений и ряда акцепторов хиноидной структуры» по своей актуальности, новизне, научной и практической значимости полностью соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук в соответствии с пунктами 9-11, 13, 14 Положения о присуждении ученых степеней (утверждено Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. №842, в действующей редакции), а ее автор заслушивает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Старший научный сотрудник
лаборатории химии координационных
полиядерных соединений
ФГБУН Институт общей и неорганической
химии им. Н.С. Курнакова РАН (ИОНХ РАН)
к.х.н. (спец. 02.00.04 – Физическая химия)

2

Воронина Юлия Константиновна

119991, Москва,
Ленинский просп., 31
тел. +79600430583
e-mail: juliavoronina@mail.ru
02.05.2024