

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Бородиной Татьяны Николаевны «СТЭКИНГ-ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ СУЛЬФОНАМИДОВ, ИХ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСАХ И КООРДИНАЦИОННЫХ ПОЛИМЕРАХ», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.03 – органическая химия и 02.00.04 – физическая химия.

Представление о валентной связи является основой для теории химического строения вещества. Очевидно, что с помощью только валентных связей невозможно описать все многообразие существующих внутримолекулярных взаимодействий. Существуют энергетически более слабые внутри- и межмолекулярные взаимодействия, такие как: водородные связи, π - и t -стэкинг - идентифицировать которые обычными спектральными методами анализа сложно, а порой и невозможно, и которые требуют дополнительных специальных исследований в каждом отдельном случае.

С точки зрения метода, дающего информацию, как о молекулярной структуре отдельной молекулы, так и о кристалле в целом, рентгеноструктурный анализ (РСА) является незаменимым и чрезвычайно информативным инструментом. Для соединений, содержащих ароматические и полиароматические фрагменты, основополагающими являются невалентные внутри- и межмолекулярные стэкинг-взаимодействия, знания о которых представляют интерес для прогнозирования свойств молекул и строения кристаллов. Известно, насколько важную роль для свойств органических молекул имеют внутримолекулярные π - π -взаимодействия. Однако экспериментальное изучение таких взаимодействий сталкивается с объективными трудностями, а теоретические исследования в большинстве не опираются на экспериментальные критерии.

В связи с этим исследование слабых внутри- и межмолекулярных стэкинг-взаимодействий в новых представителях арилсульфонаминозамещенных производных имидазо[2,1-*b*]тиазола, тиазоло[3,2-*a*]бензимидазола, имидазо[1,2-*a*]пиридина, а также в металлокомплексах и координационных полимерах на их основе является актуальной и практически значимой задачей.

Работа Бородиной Т.Н. оставляет хорошее впечатление, получены интересные данные, проделан большой объем теоретических и экспериментальных исследований. Отдельно хотелось отметить методичное и планомерное решение обозначенных задач, позволивших успешно достичь поставленной цели работы. Проведенные исследования позволяют предполагать дальнейшее интенсивное развитие данной тематики и достижение новых интересных и значимых результатов.

В работе впервые методом РСА установлена структура десяти новых производных сульфонамидов, трех координационных полимеров и двух металлокомплексов на их основе.

Автором впервые выявлено, что за счет эффективного внутримолекулярного π -стэкинга и компактного расположения фрагментов молекул, существуют «закрытые» системы арилсульфонамидов. Экспериментально доказано, что ароматический заместитель участвует в π -стэкинге только в том случае, когда находится в положении 2 гетероциклического остова производных сульфонамидов.

Показано, что природа заместителя не являются единственным определяющим фактором, влияющим на π -стэкинг-взаимодействие. Необходимо учитывать ориентацию заместителя, а также его межмолекулярные контакты.

Установлено, что только в металлокомплексных соединениях и координационном полимере [N-(2-фенил[1,3]тиазоло[3,2-a]бензимидазол-3-ил)бензолсульфонамидато-к²N,O] натрия наряду с внутримолекулярным π-стэкингом, реализуется межмолекулярный π-стэкинг.

Диссертантом впервые для данного класса соединений теоретическими методами оценены энергии тетрельного, халькогенового, пниктогенового взаимодействий и t-стэкинга на основании величины плотности потенциальной энергии в связевых критических точках.

По диссертационной работе имеется несколько вопросов:

1. в ряде случаев конформационные изменения структур веществ можно зафиксировать, используя температурные эксперименты ЯМР – проводились ли такие исследования автором?
2. известно, что при наличии как внутри-, так и межмолекулярного π-стэкинга часто наблюдаются пространственные Н-Н взаимодействия – проводился ли анализ двумерных спектров ЯМР NOESY/TOCSY?

Высказанные замечания и вопросы не снижают общую высокую оценку представленного исследования. Считаю, что диссертационная работа Бородиной Т.Н. вносит весомый вклад в решение актуальной научно-практической задачи – исследования стэкинг-взаимодействий в новых производных сульфонамидов, их металлокомплексах и координационных полимерах. По актуальности избранной темы, степени обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, их достоверности и новизне диссертационная работа **соответствует пункту 9 Положения** о порядке присуждения ученых степеней, а ее автор, Бородина Татьяна Николаевна, **заслуживает присуждения** ученой степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.03 – органическая химия и 02.00.04 – физическая химия.

Ельцов Олег Станиславович,
доцент, кандидат химических наук,
заведующий лабораторией Структурных исследований и физико-химических методов анализа Инновационного центра химико-фармацевтических технологий Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина».

Адрес: 620002, Екатеринбург, ул. Мира, 28, X-333.

тел. (343)3759385

e-mail: o.s.eltsov@urfu.ru

6 мая 2020 г. _____

подпись Ельцова О.С. заверяю,
директор ХТИ УрФУ



Вараксин М.В.