

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Бородиной Татьяны Николаевной «Стэкинг-взаимодействия в новых производных сульфонамидов, их металлокомплексах и координационных полимерах», представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.03 – органическая химия и 02.00.04 – физическая химия.

Диссертация Т.Н. Бородиной посвящена структурной характеристике новых производных сульфонамидов и их металлокомплексах, включающей исследование слабых внутри- и межмолекулярных стэкинг-взаимодействий. Работа выполнена с привлечением методов рентгеноструктурного анализа, а также квантово-химических расчетов (DFT) и топологического анализа. Качество полученных данных не вызывает сомнений, и все эксперименты выполнены на высоком уровне.

Несомненным достоинством работы является синтез и тщательный структурный анализ большого количества соединений, что требует больших усилий, а также специальных знаний и навыков. Установлены закономерности формирования внутримолекулярных невалентных взаимодействий. Анализ позволил рекомендовать некоторые соединения как перспективные лиганды для сборки координационных полимеров и металлокомплексных конструкций типа $C12MetL2$. Особое внимание заслуживает рекомендация полимера P1 как перспективного материала для молекулярной электроники, поскольку анализ π - π взаимодействий обнаружил в них потенциальную возможность переноса заряда. Получение таких интересных результатов стало возможным благодаря тщательному и систематическому исследованию кристаллов, с использованием всех доступных методик, что положительно характеризует Татьяну Николаевну как учёного.

В качестве замечаний, не умаляющих научной и практической значимости работы, можно отметить следующее:

1. Супрамолекулярные мотивы водородных связей всех изучаемых соединений можно было бы характеризовать символами, например: $R_2^2(8)$; $S(6)$ и т.д., согласно работе (Стид Дж.В., Этвуд Дж.Л. Супрамолекулярная химия. М.: Академкнига, 2007. 480 с.). Это общепринятое обозначение, и оно облегчает понимание рисунков, дает возможность сравнить молекулярные мотивы в разных соединениях.
2. Для выявления дополнительных общностей и различий в анализируемых структурах можно было бы провести топологический анализ водородных и других связей при помощи бесплатной программы ToposPro (<https://topospro.com/>), созданной российскими учеными и широко известной по всему миру. Обнаруженные этой программой типы сеток и их точечные символы, позволили бы сделать дополнительную классификацию соединений и даже найти сходства с абсолютно другими органическими и металлоорганическими соединениями. Более того, если бы обнаружили новые топологии, то они позволили бы дополнить базу ToposPro.

3. Опечатки:

- стр. 5 автореферата, «перспективные лигандов» должно быть «перспективных лигандов»;
- стр. 16 диссертации, подпись рисунка 1.6, «3,625.(2)Å» надо заменить на «3,625(2)Å»;

- стр. 19 диссертации, «3.1-3.2Å» должно быть «3,1-3,2Å». Во многих местах, как диссертации, так и автореферата, разделитель десятичного знака «,», однако встречается «.», например стр.22, 23 и т.д.;
- стр. 40 диссертации, «(P21/c для L1 и P212121 для L2» должно быть «(P2₁/c для L1 и P2₁2₁2₁ для L2». Такие же правки должны быть и для других групп по всему тексту, например, стр.49 «P 21/n» и на стр.67 «P2(1)/n» должно быть «P2₁/n» и т.д.;
- таблицы 3.4-3.33в диссертации приведены полностью на английском языке, стоило бы перевести их на русский.

Научная и практическая значимость проведенных исследований не вызывает сомнений. Результаты диссертационной работы опубликованы в российских и зарубежных рецензируемых журналах и представлены на конференциях. Считаю, что диссертационная работа полностью удовлетворяет требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор, Бородина Татьяна Николаевна, заслуживает присуждения ей учёной степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.03 – органическая химия и 02.00.04 – физическая химия.

Старший научный сотрудник
лаборатории Кристаллофизики
ИФ СО РАН им. Л.В. Киренского,
кандидат физ.-мат. наук по специальности
01.04.07 – физика конденсированного состояния,
г. Красноярск, Академгородок д.50, стр. 38
тел.8-950-437-17-72,
E-mail: msmolokeev@gmail.com
Согласен на обработку моих персональных данных.

Молокеев Максим Сергеевич



8 апреля 2020 г.

Подпись Молокеев М.С.
Заверено
ученик секретари
К.Ф.-И.И.



А.Ф. Эмелин