

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 специальности 02.00.03 – органическая химия и 02.00.04 – физическая химия

Теория химических связей всегда являлась центральной темой, как органической, так и физической химии. Развитие современных методов исследования строения соединений открывает новые возможности для изучения энергетически более слабых внутримолекулярных взаимодействий, например, водородные связи, π - и t -стэкинг. Поэтому тематика диссертации, связанная с исследованиями особенностей пространственного строения новых лигандов сульфонамидового ряда и координационных полимеров; выявление особенностей внутримолекулярных взаимодействий на основе данных РСА и QТАИМ-анализа; теоретическое изучение стереоэлектронного строения несомненно, является **актуальной**.

Автором диссертации четко сформулирована **цель работы** - исследование слабых внутри- и межмолекулярных стэкинг-взаимодействий в арилсульфониламинозамещенных производных конденсированных гетероциклов, а также в металлокомплексах и координационных полимерах на их основе. При достижении поставленной цели Бородиной Т.Н. использовались современные экспериментальные и теоретические методы исследования, что позволяет сделать вывод о достоверности полученных результатов исследования.

Достоинством работы Бородиной Т.Н. является продуктивное сочетание теоретических и экспериментальных (РСА) методов исследования новых производных имидазо[2,1-*b*]тиазола, тиазоло[3,2-*a*]бензимидазола, имидазо[1,2-*a*]пиридина, их металлокомплексов и координационных полимеров, которое позволило установить взаимосвязь конформационного строения сульфонамидов с природой невалентных внутримолекулярных взаимодействий и оценить энергию этих взаимодействий в пределах 0.5-1.2 ккал/моль. Следует подчеркнуть, что такой подход дает возможность не только описать молекулярные структуры исследуемых лигандов и их комплексов, но и позволит в дальнейшем прогнозировать направленный синтез лигандов с заранее заданными свойствами.

Научную новизну диссертации отражает то, что автором впервые установлена молекулярная структура десяти новых производных сульфонамидов, их металлокомплексов, координационных полимеров и на основании прецизионных РСА экспериментов и теоретических расчетов надежно идентифицированы и охарактеризованы слабые **структурообразующие внутримолекулярные π - и t -стэкинг, тетрельные, халькогеновые и пниктогеновые взаимодействия**.

При прочтении автореферата возник ряд вопросов и замечаний:

Опечатка на стр. 7 «Основываясь на выполнении условий, необходимых для t -стэкинг-взаимодействия сделан вывод о внутримолекулярном взаимодействии С25-Н25 ... Сg3 в данном ряду соединений». Следует писать – выполнении.

Стр.14. последний абзац - вместо фрагментами следует писать фрагментами.

Из приведенных в автореферате топологических данных для лигандов неясно, почему п-стэкинг характеризуется наличием только двух критических точек (3,-1) между взаимодействующими циклами.

Автореферат написан хорошим химическим языком.

Диссертация Бородиной Т.Н является **научно-квалификационной работой**, в которой содержится **решение научной задачи** - исследование слабых внутри- и межмолекулярных стэкинг-взаимодействий в новых представителях производных имидазо[2,1-*b*]тиазола, тиазоло[3,2-*a*]бензимидазола, имидазо[1,2-*a*]пиридина, а также металлокомплексах и координационных полимерах на их основе. Это имеет важное **значение** для развития смежных областей органической и физической химии. Настоящая работа расширяет наши представления о природе не классических слабых связей в органических молекулах, что **имеет существенное значение** для развития теории строения органических соединений.

Диссертационная работа Бородиной Т.Н. полностью соответствует требованиям ВАК РФ п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (в ред. Постановления Правительства РФ от 01.10.2018 N 1168), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук считаю, что Бородин Т.Н., несомненно, заслуживает присуждения степени кандидата химических наук.

Василевский Сергей Францевич,

профессор, доктор химических наук, главный научный сотрудник, руководитель группы СПАС Федерального государственного учреждения науки Института химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук.

Почтовый адрес: 630090, Новосибирск, ул. Институтская 3.

Тел: 8 913 735 89 84

E-mail: vasilev@kinetics.nsc.ru

Согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

подпись

дата

23.04.2020.

