Отзыв

на автореферат диссертации **Мещеряковой Екатерины Сергеевны**, выполненной по теме ***«Молекулярная и кристаллическая структура ряда α,ω-алкан-дитиолов, 1,5,3-дитиазепанов и 1,2-бензо-1,5,3-дитиазепинов»***, представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Одной из важнейших задач современной структурной химии является установление закономерностей «структура–свойство». Несомненно, пространственное строение молекул в значительной мере определяется их физические, химические и биологические свойства. В частности, от конформации молекулы напрямую зависит эффективность ее связывания с рецептором и, как следствие, запуск каскада биохимических реакций. Исследование пространственного строения является перспективным не только для углубления теоретических основ структурной химии, но и для разработки методов синтеза сложных химических соединений и эффективных катализаторов. В связи со сказанным выше работа Мещеряковой Е.С. посвящена решению **актуальных задач** физической химии, таких как исследование закономерностей пространственного строения в кристаллическом состоянии на примере широкого ряда производных α,ω-*бис*-сульфанилалканов, 1,5,3-дитиазепанов и бензо-1,5,3-дитиазепинов, а также проявлений стереоэлектронных взаимодействий в производных 1,5,3-дитиазепанов и бензо-1,5,3-дитиазепинов.

Полученные результаты обладают **научной новизной**, которая заключается в изучении ранее неизвестных производных α,ω-*бис*-сульфанилалканов, 1,5,3-дитиазепанов и бензо-1,5,3-дитиазепинов, а также проведении систематического анализа молекулярного и кристаллического строения производных α,ω-*бис*-сульфанилалканов депонированных в Кембриджской базе структурных данных.

Так, в качестве основного результата можно назвать установление молекулярной и кристаллической структуры восьми новых производных 1,5,3-дитиазепана с аминокислотными фрагментами. Показано, что в зеркально-симметричных 1,5,3-дитиазепановых циклах проявления стереоэлектронных эффектов наблюдаются в двух N–C–S фрагментах, а в 1,5,3-дитиазепанах с несимметричным строением гетероциклического фрагмента – только на одном из N–C–S участков. Ею обнаружено, что наличие асимметричного углеродного атома в аминокислотном фрагменте производных 1,5,3-дитиазепанов приводит к образованию синтонов типа «цепи» в кристаллах, а его отсутствие способствует созданию благоприятных условий для образования центросимметричных димерных структур.

Основное содержание работы представлено в восьми научных трудах: 6 статьях в рецензируемых отечественных и зарубежных журналах, а также тезисах двух докладов конференций. Достоверность полученных результатов и сделанных на их основе выводов обеспечена широким и квалифицированным применением современных физико-химических методов исследования и не вызывает сомнений.

Замечаний принципиального характера нет.

Хотелось бы выразить **пожелание** в последующих работах изучить конформационное поведение производных α,ω-*бис*-сульфанилалканов, 1,5,3-дитиазепанов и бензо-1,5,3-дитиазепинов не только в кристаллическом состоянии, но в жидкости и провести между ними параллель.

Анализ материала диссертации позволяет утверждать, что диссертационная работа Мещеряковой Е.С. выполнена на высоком профессиональном уровне и вносит серьезный вклад в развитие современной структурной химии гетероциклических соединений. Автореферат и опубликованные работы соответствуют содержанию диссертации и отвечают требованиям пп. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней» (в действующей редакции), утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г., предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Мещерякова Е.С., безусловно, заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

3 июня 2019 г.

Я, Кривдин Леонид Борисович, согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета Д 002.198.02, и их дальнейшую обработку.

Заведующий лабораторией ядерного магнитного резонанса,
доктор химических наук (02.00.03 – Органическая химия)
профессор (02.00.04 – Физическая химия)

Кривдин Леонид Борисович

Почтовый адрес: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Иркутский институт химии им. А. Е. Фаворского Сибирского отделения Российской академии наук (ИрИХ СО РАН)
664033, Россия, г. Иркутск, ул. Фаворского, 1, тел.: (3952) 51-14-33, www.irkinstchem.ru
E-mail: krivdin_office@irioch.irk.ru

КАДРОВО-ПРАВОВОЙ ОТДЕЛ ИрИХ СО РАН

ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ
Начальник КПО ИрИХ СО РАН
(Ф.И.О.)