

## ОТЗЫВ

на диссертационную работу Мещеряковой Екатерины Сергеевны «Молекулярная и кристаллическая структура ряда  $\alpha,\omega$ -алкан-дитиолов, 1,5,3-дитиазепанов и 1,2-бензо-1,5,3-дитиазепинов», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия

Актуальность работы автор обосновывает перспективами разработок новых материалов для промышленности и сельского хозяйства, которые можно получить из соединений на основе этан-1,2-дитиолов. В работе предпринята попытка установления зависимости кристаллической структуры соединений, содержащих 1,2-дитиоловый фрагмент и общего структурного фрагмента  $S-(CH_2)_m-S$ , от конформационных особенностей входящих в их состав молекул. Объектами исследования выступили производные  $\alpha,\omega$ -бис-сульфанилалканов, 1,5,3-дитиазепанов и бензо-1,5,3-дитиазепинов, изучены закономерности их пространственного строения и стереоэлектронные эффекты. Научная новизна работы заключается в получении новой структурной информации об аминокислотных производных 1,5,3-дитиазепанов и плоском строении  $\alpha,\omega$ -бис-сульфанилалканов в кристаллическом состоянии, наблюдаемой независимо от числа метиленовых звеньев; обнаружен эффект влияния числа звеньев на особенности упаковки в кристаллах. Обоснованность и достоверность полученных результатов базируется на использовании методов рентгеноструктурного анализа монокристаллов, спектроскопическом исследовании растворов соединений методом ядерного магнитного резонанса и применении анализа молекулярного строения на основе квантово-химических расчетов. Содержание работы изложено в 6 статьях в журналах, рекомендованных ВАК и включённых в Scopus, имеются два доклада, представленные тезисам в сборниках трудов конференций.

Имеются замечания, изложенные ниже.

В работе указано, что расчёт энергии межмолекулярных взаимодействий осуществлён с помощью программы AIMAll. Это утверждение не верно сформулировано, программа AIMAll не выполняет расчет энергий взаимодействий, а позволяет лишь произвести топологический анализ электронной плотности.

В целом, диссертация представляет собой завершённую научно-квалификационную работу на актуальную тему фундаментального исследования структуры и конформационного строения молекул в разных средах и фазовых состояниях. В соответствии с целью, задачами, методами и результатами исследования диссертация соответствует паспортам специальностей 02.00.04 – Физическая химия: п.1 в части «Экспериментальное определение и расчет параметров строения молекул...». По актуальности поставленных задач, новизне, объёму проведенных исследований, достоверности результатов и качеству их обоснованности представленная диссертационная работа Мещеряковой Екатерины Сергеевны соответствует требованиям п.9-14 «Положения о присуждении учёных степеней» (утверждено Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. №842), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Профессор кафедры теоретической и прикладной химии ЮУрГУ,  
доктор химических наук (02.00.04 – Физическая химия), доцент  
Барташевич Екатерина Владимировна  
тел. +79123137705; e-mail: [bartashevichev@susu.ru](mailto:bartashevichev@susu.ru)

Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования «Южно-Уральский  
государственный университет (национальный исследовательский  
университет)», 454080, Россия, г. Челябинск, пр. Ленина, 76  
+7 (351) 267-99-00 e-mail: [info@susu.ru](mailto:info@susu.ru), сайт: <http://www.susu.ru>

Я, Барташевич Екатерина Владимировна, согласна на включение моих  
персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета  
Д 002.198.02 и их дальнейшую обработку



14.06.2019

ВЕРНО  
Начальник службы  
делопроизводства ЮУрГУ  
Н.Б. Цибулина