

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Мещеряковой Екатерины Сергеевны, выполненной по теме «Молекулярная и кристаллическая структура ряда  $\alpha$ ,  $\omega$ -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.

Определение пространственного строения органических соединений и их кристаллов в твердом состоянии в настоящее время надежно определяется современными методами рентгеноструктурного анализа. Метод РСА применяется для определения структуры молекул и их кристаллов множества органических соединений и стал рутинным для химиков-органиков. Однако, одна из актуальных задач из класса «структура-свойство», а именно, предсказание строения кристаллической упаковки на основании структуры молекулы пока еще не решена. Одним из подходов к решению этой задачи является сбор и анализ множества экспериментальных данных с целью выявления структурных закономерностей и попытки применения этих закономерностей для синтеза кристаллических соединений с желаемым строением кристаллов и свойствами.

В литературе имеются данные о молекулярном строении изученных в работе Екатерины Сергеевны производных этан-1,2-дитиола, но систематический анализ известных кристаллографических данных в сопоставлении с молекулярной структурой органического соединения до настоящего времени не проводился. Также в литературе отсутствуют сведения о корреляции супрамолекулярного строения с конформационными особенностями молекул в ряду производных этан-1,2-дитиола. С учетом вышесказанного работа автора, посвященная установлению закономерностей пространственного строения производных  $\alpha$ ,  $\omega$ -бис-сульфанилалканов, 1,5,3-дитиазепанов и бензо-1,5,3-дитиазепинов, а также проявлений стереоэлектронных взаимодействий в изученных молекулах, без сомнений является **актуальной**.

Полученные результаты обладают **новизной**. Изучена структура 22 новых производных  $\alpha$ ,  $\omega$ -бис-сульфанилалкана и восьми новых  $\alpha$ ,  $\omega$ -алкан-дитиолов. Впервые проведена успешная попытка систематического анализа молекулярной и кристаллической структуры новых соединений и большого ряда соединений депонированных в Кембриджской базе структурных данных. В результате впервые обнаружены интересные закономерности, которые будут способствовать выявлению взаимосвязи «структура-активность» при разработке препаратов для сельского хозяйства, а также лигандов для создания эффективных катализаторов. Указанные моменты представляют **теоретическую и практическую ценность**.

Основное содержание работы представлено в 6 статьях в рецензируемых отечественных и зарубежных журналах, а также тезисах двух докладов конференций. Достоверность полученных результатов обеспечена квалифицированным применением современных физико-химических методов исследования и не вызывает сомнений.

Замечаний принципиального характера не выявлено.

В качестве пожелания хотелось бы отметить, что во вводной части автореферата отмечено использование автором метода ЯМР спектроскопии, однако, далее в тексте автореферата не уделяется внимания такому мощному и информативному методу, в том числе и в области конформационного анализа.

На основании вышеизложенного считаю, что диссертационная работа «Молекулярная и кристаллическая структура ряда  $\alpha$ ,  $\omega$ -алкан-дитиолов, 1,5,3-дитиазепанов и 1,2-бензо-1,5,3-дитиазепинов» по научному уровню, актуальности, новизне, значимости отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в том числе п. 9 – 14 Положения о присуждении ученых степеней, а ее автор Мещерякова Екатерина Сергеевна, заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Я, Садыков Раис Асхатович, согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета Д 002.198.02, и их дальнейшую обработку.



Садыков Раис Асхатович

11.06.2019

ФИО:	Садыков Раис Асхатович
Ученая степень:	д.х.н. по специальности 02.00.04 – Физическая химия
Ученое звание:	старший научный сотрудник
Должность:	ведущий научный сотрудник лаборатории физико-химических методов исследования Института химии (Институт химии ФГБУН ФИЦ Коми НЦ УрО РАН).
Организация:	Обособленное подразделение Институт химии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федеральный исследовательский центр «Коми научный центр Уральского отделения Российской академии наук»
Адрес:	167000, Республика Коми, г. Сыктывкар, ул. Первомайская, 48
Сайт института:	<a href="https://chemi.komisc.ru">https://chemi.komisc.ru</a>
e-mail Института:	<a href="mailto:info@chemi.komisc.ru">info@chemi.komisc.ru</a>
e-mail Садыкова	<a href="mailto:sadykov-ra@chemi.komisc.ru">sadykov-ra@chemi.komisc.ru</a>

