

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Мещеряковой Екатерины Сергеевны** «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

Гетероатомные соединения на основе алкан- и бенз-дитиолов используются в различных областях науки и техники. Они, например, являются перспективными лигандами для координационных соединений переходных металлов, которые все чаще находят применение в качестве прекурсоров каталитических систем. Основные свойства дитиолов и их комплексов в значительной степени зависят от пространственного строения молекул, в частности, от их конформации. В этой связи, диссертационная работа Мещеряковой Е.С., направленная на выявление закономерностей пространственного строения ряда дитиолов, имеющих общий структурный фрагмент $S-(CH_n)_m-S$, является **актуальной** для органической и физической химии гетероатомных соединений.

Основные результаты диссертационной работы, представляющие ее **научную новизну**, заключаются в следующем:

1. Установлена молекулярная и кристаллическая структура восьми новых аминокислотных производных 1,5,3-дитиазепанов и впервые обнаружен стереоэлектронный эффект на участке N–C–S в 1,5,3-дитиазепановом цикле. Выявлена взаимосвязь между наличием асимметричного углеродного атома в заместителе и типом формируемого синтона в ряду аминокислотных производных 1,5,3-дитиазепана.
2. Впервые изучена молекулярная и кристаллическая структуры пяти новых галогенфенильных производных бензо-1,5,3-дитиазепинов и выявлен стереоэлектронный эффект на двух геминальных N–C–S фрагментах.
3. Впервые проведен анализ молекулярной и кристаллической структуры 92 симметричных α,ω -алкан-дитиолов, депонированных в Кембриджской базе структурных данных. Установлено, что производные α,ω -бис-сульфанилалканов в кристаллическом состоянии имеют преимущественно плоскую зигзагообразную конформацию независимо от числа метиленовых звеньев.

Практическая значимость диссертационной работы состоит в следующем:

1. Установленные в работе закономерности в стабилизации реализующихся конформаций гетероциклов будут способствовать целенаправленному формированию лигандов для создания эффективных катализаторов, а также позволят получать кристаллы с определенной супрамолекулярной организацией.
2. Полученные в работе данные по молекулярной и кристаллической структуре тринадцати новых производных дитиолов депонированы в Кембриджскую базу структурных данных.

Достоверность полученных результатов и **обоснованность** основных выводов не вызывает сомнений, т.к. они базируются на комплексном высокопрофессиональном использовании современных физических методов исследования (РСТА, ЯМР, квантово-химические расчеты) и обобщения большого числа экспериментальных данных, депонированных в Кембриджской базе структурных данных по молекулярной и кристаллической структуре симметричных а,ω-алкан-дитиолов.

В целом диссертационная работа, а также автореферат, производят очень хорошее впечатление. Основные результаты диссертации **опубликованы** в многочисленных работах, в том числе в 6 статьях в журналах, рекомендованных ВАК и цитируемых в Scopus и Web of Science.

Диссертация Мещеряковой Е.С. является научно-квалификационной работой, в которой содержатся новые данные о молекулярной и кристаллической структуре ряда алкан- и бенз-дитиолов, имеющие существенное значение для развития органической и физической химии гетероатомных соединений. Диссертационная работа Мещеряковой Е.С. отвечает критериям Положения ВАК о присуждении ученых степеней (п. 9), и соискатель, безусловно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

03.06.19

Сараев

Сараев Виталий Васильевич

ФИО: Сараев Виталий Васильевич
Ученая степень: д.х.н. по специальности 02.00.04 – физическая химия
Ученое звание: профессор
Должность: профессор кафедры теоретической и прикладной органической химии и полимеризационных процессов
Адрес: 664003, Иркутск, ул. К.Маркса,1
Организация: федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Иркутский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ИГУ»)
Сайт: <https://isu.ru> е-майл: vvsaraev@mail.ru

Я, Сараев Виталий Васильевич, согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета Д 002.198.02, и их дальнейшую обработку.

