

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Бикмухаметова Камиля Шамиловича  
«Молекулярная и кристаллическая структура производных 1,2,4,5,7-тетраоксазоканов и  
тетраоксаспирододекан диаминов»,  
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности  
1.4.4. Физическая химия

### Заключение

Работа соискателя Бикмухаметова Камиля Шамиловича посвящена исследованию структуры довольно редких и относительно малоизученных классов органических соединений - 1,2,4,5,7-тетраоксазоканов и тетраоксаспирододекан диаминов. Данные соединения вызывают интерес в качестве потенциальных биологически активных и энергонасыщенных веществ. Все вышеизложенное делает работу Бикмухаметова К.Ш. актуальной, практически значимой, а её научная новизна не вызывает сомнений.

Для достижения заявленных целей и задач работы автор использует метод рентгеноструктурного анализа, дополняя его арсеналом современных расчётных методов квантовой механики. Подобное сочетание экспериментальных и теоретических методов исследования позволило успешно достигнуть поставленных целей не только описания, но и теоретического обоснования структуры, конформаций, особенностей межмолекулярных взаимодействий и кристаллического строения исследованных объектов. Результаты исследований подробно опубликованы в научных журналах и представлены на ряде научных конференций.

Среди дискуссионных моментов и замечаний к работе можно выделить следующие:

1. Среди целей работы автор называет анализ влияния стереоэлектронных эффектов на конформацию и молекулярную структуру. Но любой анализ является лишь способом познания и сам по себе целью являться не может. Проведение анализа может быть только задачей для достижения какой-либо цели.
2. В разделе «Методология и методы исследования» автор приводит излишне подробное изложение методики проведения РСА, которое, на наш взгляд, следовало бы перенести в экспериментальную часть, а вместо неё дать более развёрнутое обоснование выбора использования тех или иных программ и методов КМ-расчётов, а также температуры проведения структурных экспериментов.
3. Укороченные Н...Н контакты, которые автор приводит в качестве стабилизирующих, обычно являются вынужденными и отталкивающими, а в ряде случаев (например, при уточнении позиций атомов водорода метильных групп по модели «наездника») могут оказаться ложными. Проводилось ли дополнительное обоснование аттрактивности таких контактов (например, в рамках теории Бейдера AIM).

4. Как рассчитывалась (измерялась) энергия водородных связей в кристаллических упаковках соединений **16** и **17**? В отличие от расчёта энергии отдельных МО, это может оказаться не таким простым делом.
5. Каковы были условия получения монокристаллов изученных соединений, и не может ли фиксируемое разнообразие конформаций соединений служить указанием на существование различных аллотропных модификаций, получаемых в различных условиях кристаллизации?
6. Символы разрыхляющей орбитали являются общепризнанными, их пояснять не нужно, а использование в тексте вперемешку словам «антисвязывающий» и «сигма разрыхляющий» создаёт впечатление небрежности оформления работы.

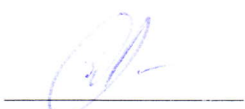
Высказанные замечания не влияют на общее благоприятное впечатление от работы. Представленная работа по своей значимости и полученным результатам соответствует требованиям пп. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением правительства РФ №842 от 24.09.2013 г. (в редакции от 20.03.2021 г.), а ее автор Бикмухаметов Камиль Шамилович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Слепухин Павел Александрович,

Кандидат химических наук 02.00.03 (органическая химия), руководитель группы рентгеноструктурного анализа Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения Российской академии наук (ИОС УрО РАН)

E-mail: slepukhin@ios.uran.ru

тел.(рабочий): +7(343)362-32-24.

  
«3» август 2022 г.

Я, Слепухин Павел Александрович,

Согласен(на) на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета 24.1.218.02, и их дальнейшую обработку.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения Российской академии наук (ИОС УрО РАН)

620108, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, д. 22/20

E-mail: [verbitsky@ios.uran.ru](mailto:verbitsky@ios.uran.ru) (приёмная директора);

тел.: +7(343) 369-30-58.

Подпись составившего отзыв Слепухина Павла Александровича заверяю,

ученый секретарь ИОС УРО РАН



Красникова О.В.

«04» мая 2022