

ОТЗЫВ

На автореферат диссертации Володина Александра Дмитриевича
«Кристаллическая структура элементоорганических соединений с низкой
температурой плавления»
по специальности 1.4.4. – «Физическая химия»

Нет особой необходимости подчёркивать фундаментальное значение структурной информации, получаемой с использованием монокристалльной рентгеновской дифракции для решения разнообразных задач в химии и биологии. Однако её получение для соединений с низкой температурой плавления, $T_{пл.}$, осложнено их неспособностью к равновесной кристаллизации из жидкого состояния. Поэтому диссертация А. Д. Володина, посвященная совершенствованию метода кристаллизации *in situ* и демонстрации его эффективности для изучения структуры и свойств 14 элементоорганических соединений с низкой $T_{пл.}$ (около 0 °С и ниже) несомненно, является актуальной.

Оказалось, что рассматриваемые соединения, начиная с $T_{пл.}$ и до 100К, как правило, образуют кристаллические фазы, а способствуют их формированию в основном слабые межмолекулярные взаимодействия Н··Н. Полезной представляется и обнаруженная эмпирическая зависимость температуры плавления изучаемых соединений от Хиршфельдовской площади поверхности молекулы и энергии кристаллической решетки.

С большим интересом читается раздел автореферата, где сообщается об обнаружении и теоретическом изучении методами молекулярной динамики фазовых превращений в кристаллах октаметилциклотетрасилоксана и 1,1,1,3,5,5,5-гептаметилтрисилоксан-3-ола. В частности, было показано, что в них, наряду с высоко- и низкотемпературной фазами, существует и промежуточная.

При чтении автореферата возникли вопросы:

1. Зачем в него был включён раздел 2.5., в котором методом РВЕ0/6-311+G(d,p)/PCM рассматривается энергетика реакции получения дифторкарбена из Me_3CF_2Br в присутствии и в отсутствие кислоты Льюиса. Он представляется “чужеродным” и незавершённым. Тем более в заключении отсутствуют результаты из этой части работы.

2. Есть ли принципиальное отличие предложенных методик кристаллизации *in situ* от давно известных (более 50 лет) из литературы?

К существу изложенной работы особых замечаний нет.

Она является законченным и современным исследованием, которое вносит важный вклад в изучение строения соединений 13 и 14 групп.


Полученные результаты, несомненно, обладают научной новизной и практической значимостью. Выводы по работе полностью соответствуют содержанию и полученным результатам.

В целом, диссертационная работа Володина А. Д. «Кристаллическая структура элементоорганических соединений с низкой температурой

плавления» по актуальности, научной новизне и практической значимости соответствует п.п. 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (Постановление Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842), как научная квалификационная работа. Работа отвечает требованиям предъявляемых к кандидатским диссертациям, а ее автор Володин Александр Дмитриевич, заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – Физическая химия.

Ведущий научный сотрудник
ФГБУН Иркутского института химии
им. А.Е. Фаворского СО РАН (ИрИХ СО РАН),
доктор химических наук, профессор

Сидоркин Валерий Фёдорович



старший научный сотрудник
ФГБУН Иркутского института химии
им. А.Е. Фаворского СО РАН (ИрИХ СО РАН),
доктор химических наук

Белоголова Елена Фёдоровна



Адрес:
ФГБУН Иркутский институт химии
им. А.Е. Фаворского СО РАН (ИрИХ СО РАН)
664033, Иркутск, Фаворского, 1
Тел.: +7 (3952) 41-93-46
E-mail: svf@irioch.irk.ru



22 сентября 2022 г.