

ОТЗЫВ НА АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ А.Д. ВОЛОДИНА
«КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ
СОЕДИНЕНИЙ С НИЗКОЙ ТЕМПЕРАТУРОЙ ПЛАВЛЕНИЯ», ПРЕДСТАВЛЕННОЙ
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА ХИМИЧЕСКИХ НАУК ПО
СПЕЦИАЛЬНОСТИ 1.4.4. ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ.

Диссертационная работа А.Д. Володина выполнена в области строения легкоплавких элементоорганических соединений. Исследования такого типа малочисленны ввиду специфики объектов. Прямым методом установления структуры вещества был и остаётся РСА, в то время как получение монокристаллов данного класса затруднено. Работа Володина А.Д. является актуальной, поскольку вносит вклад в совершенствование метода кристаллизации *in situ* и развитие представлений о строении элементоорганических соединений с низкой температурой плавления. К заслугам автора можно по праву отнести создание оборудования для кристаллизации *in situ* в дифрактометре и разработку методики кристаллизации *in situ* в дифрактометре, что позволило ему надёжно установить кристаллическую структуру ряда легкоплавких элементоорганических соединений. Отдельной важной и интересной частью работы явилось всестороннее исследование обнаруженных фазовых переходов для двух соединений. Пожалуй, аппарат квантовой химии был максимально полно привлечён к данному вопросу. Так, поиск переходного состояния конформационного перехода *псевдокресло–псевдованна* проводился с помощью методики следования по внутренней координате процесса (IRC) в программе Gaussian 09, к исследованию тепловых колебаний применялись два независимых подхода: расчеты молекулярной динамики Борна-Оппенгеймера в программном комплексе VASP и расчет фононного спектра с использованием метода «замороженного фонона» (программа PHON). Выполнено моделирование методом молекулярной динамики с ограничением внутренних координат и произведён расчет метадинамики в периодических граничных условиях. Следует отметить, что метод молекулярной метадинамики *ab initio* был впервые успешно применен к изучению механизма фазового перехода, что составляет существенный элемент научной новизны диссертационной работы.

В целом, работа выполнена на высоком экспериментальном и теоретическом уровне, выводы достоверны и обоснованы.

По автореферату имеется несколько вопросов-замечаний:

-стр. 3, последняя фраза «Из-за недостатка данных о кристаллической структуре подобных соединений квантово-химические расчеты физико-химических свойств соединений данного ряда проводятся редко» -имеются в виду затруднения с записью входного файла, необходимость писать его вручную, не имея готовых координат?

- стр. 4 – В разделе «Научная новизна» особняком стоит фраза «При изучении кристаллической структуры $\text{Me}_3\text{SiCF}_2\text{Br}$ было установлено, что связь C-Br ослаблена». Непонятно, что имеется в виду – увеличение межатомного расстояния по данным РСА в сравнении со средним по КБСД значением? И что в этом нового – такое удлинение никогда не наблюдалось ранее?

- стр. 13 – несколько небрежной является фраза «...оси 2, 3 и 6», вполне допустимая в устной речи, но в письменной хотелось бы видеть полный вариант «оси второго, третьего и шестого порядка»

- стр. 13 – о чём говорит широкий гистерезис в ДСК-термограмме?

Считаю, что диссертация Володина Александра Дмитриевича однозначно соответствует всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям (Постановление Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. N 842 «О порядке присуждения ученых степеней»), а сам диссертант безусловно достоин присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Кандидат химических наук (02.00.03- органическая химия), заведующий лабораторией дифракционных методов исследований, старший научный сотрудник ИОФХ им. А.Е. Арбузова - обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН Ольга Александровна Лодочникова, 420088, г. Казань, ул. Арбузова, 8, olga@ioprc.ru, (843)2727573.

О.А. Лодочникова

