

УТВЕРЖДАЮ

Директор ИНЭОС РАН,
чл.-корр. РАН д.х.н. А.А. Трифонов

«12» апреля 2022г.



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова
Российской академии наук (ИНЭОС РАН)

Диссертационная работа Володина Александра Дмитриевича «Кристаллическая структура элементоорганических соединений с низкой температурой плавления» выполнена в лаборатории рентгеноструктурных исследований ИНЭОС РАН. В период подготовки диссертационной работы Володин Александр Дмитриевич обучался в очной аспирантуре (2017-2021 гг.) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук (ИНЭОС РАН) и работал в лаборатории рентгеноструктурных исследований в должности инженера-исследователя (2016-2017 гг.), в настоящее время работает в должности младшего научного сотрудника в той же лаборатории.

В 2017 году А.Д. Володин окончил ВХК РАН при РХТУ им. Д.И. Менделеева по специальности «Фундаментальная и прикладная химия» с присвоением квалификации «Химик. Преподаватель химии». Удостоверение о сдаче кандидатских экзаменов выдано в 2021 г. Федеральным государственным бюджетным учреждением науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук.

Научный руководитель: Корлюков Александр Александрович, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии

наук, доктор химических наук, ведущий научный сотрудник, профессор Российской академии наук.

В ходе обсуждения диссертанту были заданы следующие вопросы:

- к.ф-м.н. Суполецкий К.Ю.: Применима ли данная методика для кристаллизации легкоплавких соединений других элементов?
- к.х.н. Федянин И.В.: Какие преимущества и недостатки вы обнаружили при использовании различных подходов к изучению пути фазового перехода?
- к.х.н. Ананьев И.В.: Есть ли вероятность того, что обнаруженные корреляции температуры плавления и площади поверхности молекулы пропадут при добавлении в зависимость новых соединений?
- д.х.н. Локшин Б.В.: В чем принципиальное отличие ваших методик кристаллизации *in situ* от известных аналогичных методик?

По итогам заседания коллоквиума принято следующее решение:

Диссертационная работа Володина Александра Дмитриевича затрагивает актуальную проблему в области физической химии, направлена на развитие возможностей метода рентгеноструктурного анализа и изучение особенностей межмолекулярного взаимодействия в кристаллах легкоплавких соединений. Работа выполнена на высоком профессиональном уровне, интерпретация полученных результатов не вызывает возражений, автором работы четко и обоснованно сформулированы выводы, их достоверность не вызывает сомнений.

Личный вклад автора состоит в непосредственном участии во всех этапах диссертационного исследования: постановке задач, анализе литературных данных, подготовке и проведении экспериментов, проведении квантово-химических расчетов, интерпретации и обсуждении полученных данных, их обобщении, формулировке выводов работы и подготовке научных публикаций и докладов по теме исследования.

Научная новизна и практическая значимость работы. В ходе работы было предложено две методики кристаллизации *in situ*. Эффективность данных методик была доказана путем кристаллизации 14 легкоплавких элементоорганических соединений. Впервые установлено строение всех кристаллических фаз данных соединений, образующихся при температуре выше 100 К. Разработанные методики подходят для применения в изучении

строения кристаллических фаз соединений, обладающих высокой вязкостью или летучестью.

С помощью квантовохимических расчетов впервые изучены термодинамические параметры реакции получения дифторкарбена из $\text{Me}_3\text{CF}_2\text{Br}$ в присутствии и в отсутствие кислоты Льюиса. Установлено, что энергия активации данного процесса в присутствии НМРА как кислоты Льюиса не превышает энтальпию присоединения свободного дифторкарбена к кратным связям. Эти данные позволят в будущем прогнозировать возможность протекания той или иной реакции исходя из полученных энергетических характеристик.

С помощью совокупности проведенных квантовохимических расчетов и результатов рентгеноструктурных исследований был изучен фазовый переход в кристалле октаметилциклотетрасилоксане. Были установлены энергетические характеристики фазового перехода, а также установлены конформации переходных состояний.

Основное содержание работы отражено в 7 публикациях, а именно: 3 — в научных журналах, рекомендованных ВАК, 5 — в тезисах сборников докладов научных конференций.

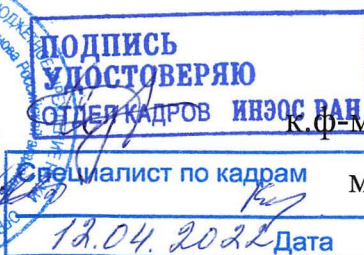
Заключение принято на заседании коллоквиума лаборатории рентгеноструктурных исследований №201 от 11 апреля 2022 года.

На заседании присутствовало 18 человек: д.х.н. Корлюков А.А., д.х.н. Долгушин Ф.М., к.ф.-м.н. Супоницкий К.Ю., к.х.н. Вологжанина А.В., к.х.н. Федянин И.В., к.х.н. Ананьев И.В., к.х.н. Смольяков А.Ф., к.х.н. Голубь А.С., к.х.н. Антонов Д.Ю., к.х.н. Шаповалов А.В., к.х.н. Головешкин А.С., м.н.с. Ушаков И.Е., м.н.с. Карноухова В.А., ст.лаб. Буйкин П.А., ст.лаб. Анисимов А.А., Белкова Н.В. (зам. председателя диссертационного совета), Локшин Б.В. (член диссертационного совета), Фёдорова О.А. (член диссертационного совета).

Результаты голосования: «за» — 18 чел., «против» — 0 чел., «воздержалось» — 0 чел.

Председатель коллоквиума

Секретарь коллоквиума



к.ф.-м.н. Супоницкий К.Ю.

м.н.с. Карноухова В.А.
Куликова И.В.