

ОТЗЫВ

на диссертационную работу в виде научного доклада **Александрова Евгения Викторовича** “ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ И ПРИНЦИПЫ ДИЗАЙНА КООРДИНАЦИОННЫХ ПОЛИМЕРОВ И ВОДОРОДНО-СВЯЗАННЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ” на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Диссертационная работа **Александрова Евгения Викторовича**, представленная в виде научного доклада, посвящена теоретическому исследованию топологических закономерностей строения и разработке методологии анализа и дизайна координационных полимеров в металл-органических кристаллических соединениях и водородно-связанных мотивов в органических кристаллах. Изучены особенности и принципы строения кристаллов на основе Zn_4O , Zr_6O_8 с тетракарбоксилатными лигандами, каркасы La(III) с тетрааифульваленттетрабензойной кислотой, комплексы 2,2-диметилмалоновой, 4,5,6-тригидроксиизофталевой кислоты, 2-амино-бифенил-4,4'-дикарбоксилатных анионов и 1,2-би(4-пиридил)этилена, комплексы Cu(II) с 1-гидроксиимидазол-3-оксидом и его производными, молекулярные кристаллы на основе стерически загруженных заместителями молекул 1,3,5-триазинов и порфиринов. В рамках теории графов разработана номенклатура и систематизированы периодические сетки и их переплетения в изучаемых классах кристаллических структур. Разработан метод распознавания топологического сходства и структурной изомерии. Изучены взаимосвязи физико-химических свойств и структуры ряда кристаллических материалов.

Практическая и научная значимость работы обоснована тем, что изучаемые объекты исследований – металл-органические соединения, в том числе, каркасного строения, лежат в основе материалов, которые могут улучшить и развить современные технологии сорбции и катализа. В диссертационной работе получена и систематизирована новая информация, полезная для прогноза свойств и рационального поиска новых соединений с требуемыми свойствами. Научная новизна полученных результатов не вызывает сомнения. Предложен новый метод определения топологии переплетения колец в кристаллических структурах, созданы базы по топологическим дескрипторам полимерных строительных единиц. Большой объем проделанной вычислительной и аналитической работы, как на методологическом, так и теоретическом уровне отличают диссертационную работу Александрова Е.В.

Имеется замечание, изложенное ниже.

1. При изучении галогенсодержащих соединений, например, описанных в главе автореферата 8.3, основное внимание уделяется водородным связям, тем не менее, вероятность формирования галогенных и тетрельных связей в таких соединениях не менее вероятна. Более того, топологические закономерности формирования таких нековалентных связей не менее важны в оценке свойств кристаллов и понимании структурообразующих взаимодействий.


Сделанное замечание не снижает общей высокой оценки диссертационной работы Александрова Евгения Викторовича. Диссертационная работа представляет собой оригинальное, целостное и скрупулезное научное исследование, выполненное на современном уровне с использованием новейших теоретических инструментов, характеризующихся высоким уровнем достоверности. Совокупность полученных результатов вносит неоспоримый вклад в развитие актуальной и полезной методологии, ориентированной на дизайн новых кристаллических соединений с заданными функциональными свойствами.

Материалы диссертации, изложенные в публикациях автора представляет интерес для специалистов и обучающихся по направлениям физической химии, органической химии, хемоинформатики; их целесообразно использовать в учебных курсах образовательных программ подготовки магистров и аспирантов по кристаллохимии, молекулярному моделированию, химии координационных соединений.

В соответствии с целью, задачами, методами и результатами исследования диссертация соответствует паспорту специальности: 1.4.4 – Физическая химия. По актуальности поставленных задач при изучении закономерностей формирования водородно-связанных координационных полимеров в органических кристаллах, по новизне, объему проведенных теоретических исследований, достоверности результатов и качеству их обоснованности диссертационная работа Александрова Евгения Викторовича, представленная в виде научного доклада полностью соответствует требованиям «Положения о присуждении учёных степеней» (утверждено Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. №842), предъявляемым к докторским диссертациям.

За вклад в развитие методологии изучения строения и принципов дизайна органических кристаллов с водородными связями кристаллов Александров Евгений Викторович заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Д.х.н. (1.4.4 – Физическая химия), доцент,
профессор кафедры теоретической и прикладной химии
ЮУрГУ, в.н.с., зав. НИЛ Многомасштабного моделирования
многокомпонентных функциональных материалов
Барташевич Екатерина Владимировна
тел. +79123137705; e-mail: bartashevichev@susu.ru


03.10.2022

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», 454080, Россия, г. Челябинск, пр. Ленина, 76. Тел.: +7 (351) 267-99-00 e-mail: info@susu.ru, сайт: <http://www.susu.ru>



*Подпись Барташевич Е.В.
заверяю.
Барташевич Е.В.
Калашников Е.И.*