

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Лёзова Дениса Витальевича
«Синтез, строение и свойства структурных аналогов 1-герматранола и 1-аминоацилоксигерматранов на их основе», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. - Физическая химия

Широкий интерес к исследованиям соединений гиперкоординированного атома германия в основном обусловлен их неклассической структурой, разнообразной биологической активностью и большим потенциалом применения в медицине, фармацевтике и сельском хозяйстве. Поэтому диссертационную работу Д. В. Лёзова, посвящённую получению и изучению строения и свойств новых, потенциально биологически активных соединений гипервалентного германия, следует признать актуальной.

Диссертация Д. В. Лёзова выполнена с использованием хорошо апробированных экспериментальных и теоретических методов исследования, выявлено согласие результатов ИК и РСА экспериментов и проведённых квантово-химических расчётов. Это гарантирует обоснованность и достоверность полученных научных результатов.

В представленной работе автором был синтезирован целый ряд новых, неизвестных ранее производных гиперкоординированного атома германия – структурные аналоги 1-герматранола и 1-аминоацилоксигерматраны. Для последних предложен новый подход к их получению. Синтезированные структуры были исследованы различными физико-химическими и квантово-химическими методами, оценена их биологическая активность.

Среди полученных автором структур наибольший интерес представляют уникальные каркасные комплексы гексакоординированного германия. Исследование природы координационного взаимодействия в этих структурах может внести вклад в развитие теории строения соединений гиперкоординированного германия. Кроме того, данные комплексы могут обладать необычными свойствами.

В целом, работа выполнена на высоком научном уровне, и ее результаты имеют значение для развития физической химии и химии элементоорганических соединений.

При прочтении автореферата возникло несколько вопросов и замечаний:

1) В разделе «Методология и методы исследования» автором перечислены различные методы, используемые им при проведении квантово-химических расчётов. Однако ни в тексте автореферата, ни в подписях к рисункам не указывается, в рамках какой именно расчётной схемы были получены приведённые в автореферате структурные и энергетические характеристики.

2) автор некорректно использовал название ‘базисный набор’ для метода B3LYP/aug-cc-pVDZ (стр. 11 автореферата).

3) Соединения, рассматриваемые в диссертации, были получены при высокой температуре ($80\text{-}90^\circ \text{C}$), а оценка относительной устойчивости различных конформеров комплексов германия методами квантовой химии проводилась для температур, близких к нулю Кельвина. Интересно было бы провести подобную оценку для высоких температур с использованием свободных энергий Гиббса.

Сделанные замечания не влияют на высокую оценку актуальности диссертационной работы Д. В. Лёзова, её новизны, достоверности и значимости полученных результатов.

В рецензируемой научно-квалификационной работе решена научная задача по разработке методов синтеза, получению новых соединений гиперкоординированного атома германия с использованием ряда гидроксиламинов и изучению строения полученных соединений. Считаю, что диссертационная работа «Синтез, строение и свойства структурных аналогов 1-герматранола и 1-аминоацилоксигерматранов на их основе» соответствует требованиям п.п. 9-14 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г., № 842 (в действующей редакции), а её автор заслуживает присуждения искомой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – физическая химия.

старший научный сотрудник лаборатории структурных исследований
Иркутского института химии им. А. Е. Фаворского СО РАН
доктор химических наук по специальности
02.00.08 – химия элементоорганических соединений

Белоголова Елена Федоровна

«16» апреля 2024 г.

(Ф.) —

664033, Россия, г. Иркутск, ул. Фаворского, 1
Тел. +7 (3952) 42-70-14
Электронная почта: lena@irioch.irk.ru

Согласна на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку

