

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

экспертной комиссии диссертационного совета Д 003.051.01 на базе ИНХ СО РАН по кандидатской диссертации Пирязева Дмитрия Александровича «Кристаллохимический анализ молекулярных комплексов Co(II), Co(III) и Ir(I) с β -дикетонат-ионами и их производными»

Комиссия диссертационного совета Д 003.051.01 (по химическим наукам) на базе ФГБУН Института неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН в составе: председателя — доктора химических наук, профессора РАН **Басовой Тамары Валерьевны**, членов комиссии — доктора физико-математических наук, профессора **Цыбули Сергея Васильевича** и доктора химических наук профессора **Игуменова Игоря Константиновича**, в соответствии с п. 25 Положения о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, утвержденного приказом Минобрнауки России от 13 января 2014 г. № 7, на основании ознакомления с кандидатской диссертацией **Пирязева Дмитрия Александровича** и состоявшегося обсуждения приняла **следующее заключение:**

1. Соискатель ученой степени кандидат химических наук соответствует требованиям пп. 2-4 Положения о порядке присуждения ученых степеней (утв. Постановлением Правительства России от 24.02.2013 г. №842), необходимым для допуска его диссертации к защите.
2. Диссертация на тему «Кристаллохимический анализ молекулярных комплексов Co(II), Co(III) и Ir(I) с β -дикетонат-ионами и их производными» в полной мере соответствует специальности 02.00.04 – «физическая химия», к защите по которой представлена работа.
3. Основные положения и выводы диссертационного исследования отражены в 4 статьях, опубликованных **Пирязевым Дмитрием Александровичем** в международных и российских журналах, которые входят в перечень индексируемых в международной системе научного цитирования Web of Science, и в 5 тезисах докладов на российских и международных научных конференциях. Представленные соискателем сведения об опубликованных им работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, достоверны.
4. Оригинальность содержания диссертации составляет более 90% от общего объема текста; цитирование оформлено корректно по всему тексту; заимствованного материала, использованного в диссертации без ссылки на автора либо источник заимствования, не обнаружено; научных работ, выполненных соискателем ученой степени в соавторстве, без ссылок на соавторов, не выявлено.
5. Методом рентгеноструктурного анализа монокристаллов определены кристаллические структуры и установлены стереохимические характеристики 19 новых комплексов Co(II) и Ir(I) с β -дикетонат-ионами и их производными. Показано различие характеристик координационного окружения центрального атома в октаэдрических

комплексах $\text{Co}(\beta\text{-dik})_3$ и $\text{Co}(\text{diam})(\beta\text{-dik})_2$. Показано, что нижняя граница углов разворота хелатных лигандов в комплексах $\text{Co}(\text{II})$ с тетраэдрическим координационным полиэдром составляет 65.5° . Проведено построение поверхностей Хиршфельда, определены характеристики шаровидности и асферичности для 54 новых и известных в литературе комплексов $\text{Co}(\text{II})$, $\text{Co}(\text{III})$ и $\text{Ir}(\text{I})$ с β -дикетонат-ионами и их производными. При анализе карт $d_{\text{ном}}$ выявлены основные типы межмолекулярных контактов. Показано, что в отличие от структур $\text{Ir}(\text{cod})L$ в $\text{Ir}(\text{CO})_2L$ реализуются металлофильные контакты $\text{Ir}\dots\text{Ir}$, минимальное значение 3.21 \AA в структуре $\text{Ir}(\text{CO})_2(\text{btfac})$. Показано, что при показателях шаровидности $G > 0.7$ и асферичности $\Omega < 0.1$, а также в отсутствие сильных межмолекулярных взаимодействий реализуются псевдогексагональные мотивы упаковки структур (молекулярное координационное число 8).

Комиссия рекомендует:

1. Принять к защите на диссертационном совете Д 003.051.01 на базе ИНХ СО РАН кандидатскую диссертацию **Пирязева Дмитрия Александровича** «Кристаллохимический анализ молекулярных комплексов $\text{Co}(\text{II})$, $\text{Co}(\text{III})$ и $\text{Ir}(\text{I})$ с β -дикетонат-ионами и их производными».
2. Утвердить официальными оппонентами:
 - Черкасову Татьяну Григорьевну, профессора, доктора химических наук, заслуженного работника высшей школы РФ, директора Института химических и нефтегазовых технологий, г. Кемерово.
 - Сомова Николая Викторовича, кандидата физико-математических наук, ассистента кафедры кристаллографии и экспериментальной физики физического факультета ННГУ им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород.
3. Утвердить в качестве ведущей организации Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск.

д.х.н., профессор РАН Басова Тамара Валерьевна

д.ф.-м.н., профессор Цыбуля Сергей Васильевич

д.х.н., профессор Игуменов Игорь Константинович

