

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Пирязева Дмитрия Александровича
«Кристаллохимический анализ молекулярных комплексов Co(II), Co(III) и Ir(I) с β -дикетонат-ионами и их производными», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 - физическая химия.

Диссертационная работа Пирязева Д.А. является комплексным исследованием и посвящена изучению строения молекулярных комплексов Co(II), Co(III) и Ir(I) с β -дикетонат-ионами и их производными (β -кетоиминат-ионами, β -дйиминат-ионами и др.).

Задача, сформулированная в диссертации, относится к области исследований, лежащих на стыке физической химии и материаловедения. Её актуальность определяется тем, что изученные в работе системы интересны не только с точки зрения фундаментальной науки, но и в плане создания новых функциональных материалов. Комплексы Co(II), Co(III) и Ir(I) с β -дикетонат-ионами традиционно используются в качестве прекурсоров функциональных покрытий.

В работе Пирязева Д.А. методом рентгеноструктурного анализа определены структуры 19 новых β -дикетонатных комплексов Co(II) и Ir(I). Следует особо отметить, что экспериментальный материал для 15 из 19 монокристаллов был получен при низкой температуре. Автором были получены важные и интересные результаты: проанализированы основные геометрические характеристики новых β -дикетонатных комплексов Co(II); построены поверхности Хиршфельда и определены характеристики шаровидности и асферичности новых и известных из литературы молекулярных комплексов Co(II), Co(III) и Ir(I) с β -дикетонат-ионами и их производными; выполнен анализ особенностей упаковки молекул в кристаллической структуре этих молекулярных комплексов.

Безусловной заслугой Пирязева Д.А. является то, что для изучения межмолекулярных взаимодействий и особенностей строения молекул, помимо непосредственного анализа стереохимических характеристик, использован метод построения и анализа поверхностей Хиршфельда. При определении мотивов упаковки кристаллических структур использован оригинальный метод трансляционных подрешеток, разработанный ранее в ИНХ СО РАН.

Критериями достоверности полученных в работе результатов являются: воспроизводимость результатов, низкие значения R-факторов; включение результатов в Международную базу структур CCDC, а также надежность и точность использованных методик, программного обеспечения и оборудования.

В качестве замечания хотела бы сказать, что в автореферате очень скупо представлена информация о свойствах изученного класса соединений. В то время как в

литературе последнего времени публикуется много, например, о магнитных свойствах соединений на основе Co(II) .

В целом, диссертация является оригинальной по сформулированной цели и фундаментальной по полученным результатам, которые были изложены в научных статьях в отечественных и зарубежных журналах, а также представлены в многочисленных докладах на Российских и Международных конференциях.

Работа Пирязева Д.А. представляет законченное исследование, результаты которого важны для понимания физико-химических свойств координационных соединений и целенаправленного предсказания и модифицирования этих свойств. Полученные данные могут быть использованы для квантово-химических, термодинамических и для иных теоретических расчетов свойств изученных фаз. Работа полностью соответствует требованиям раздела II Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842 (с изменениями постановления Правительства Российской Федерации от 21 апреля 2016 г. №335 «О внесении изменений в Положение о присуждении ученых степеней»), а ее автор Пирязев Д.А. вполне заслуживает присуждения искомой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 - физическая химия.

Доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник Сектора элементного и структурного анализа
Шибаета Римма Павловна, 08.08.1935

ФГБУН Институт физики твердого тела РАН,
142432, г. Черноголовка, Московская обл.,
ул. Академика Осипьяна д.2, ИФТТ РАН,
тел.: +7 (496) 522 8464, E-mail: shibaeva@issp.ac.ru

Подпись

доктора физ.-мат. наук Р.П. Шибаетой

удостоверяю

Ученый секретарь Института Физики твердого тела РАН,
доктор физико-математических наук,
«01»_марта_2019 г.



Г.Е. Абросимова

Согласна на обработку персональных данных

Р.П. Шибаета