

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 Дмитрия Александровича Пирязева посвящена кристаллохимическому анализу молекулярных комплексов Co(II), Co(III) и Ir(I) с β -дикетонат-ионами и их производными.

Результаты систематического кристаллохимического анализа этих молекулярных комплексов, полученные в диссертационной работе Дмитрия Александровича Пирязева, актуальны как для теории, так и для практики.

С точки зрения кристаллохимии представленное Д.А. Пирязевым исследование, является, на наш взгляд, образцом использования практически всех возможных кристаллохимических методов и подходов к изучению данного материала. Покажем это подробнее. На начало исследования в Кембриджской базе структурных данных имелись сведения о строении всего 35 молекулярных комплексов Co(II), Co(III) и Ir(I) с β -дикетонат-ионами и их производными. Систематический кристаллохимический анализ таких фаз отсутствовал.

Д. А. Пирязев с помощью метода рентгеноструктурного анализа монокристаллов определил с высокой точностью структуры 19 новых молекулярных комплексов Co(II) и Ir(I) с β -дикетонат-ионами и их производными. Уже на основе 54 кристаллических структур провел обширное кристаллохимическое исследование, которое включало, в том числе современные, но пока еще редко используемые методики исследования. Для изучения межмолекулярных взаимодействий и особенностей строения молекул, помимо непосредственного анализа стереохимических характеристик, им был использован метод построения и анализа поверхностей Хиршфельда. При определении мотивов упаковки кристаллических структур использован метод трансляционных подрешеток.

В результате, Д. А. Пирязевым было проведено построение поверхностей Хиршфельда, определены характеристики шаровидности и асферичности 54 новых и известных молекулярных комплексов Co(II), Co(III) и Ir(I) с β -дикетонат-ионами и их производными. Показано, что при показателях шаровидности > 0.7 и асферичности < 0.1 , а также в отсутствие сильных межмолекулярных взаимодействий, реализуются псевдогексагональные мотивы упаковки структур. Выявлены основные типы межмолекулярных контактов в кристаллических структурах.

Полученные данные могут служить платформой для исследования Ян-Теллеровских эффектов и магнетизма в октаэдрических комплексах Ir(I) – $5d^6$ и Co(III) – $3d^6$, а также в тетраэдрических комплексах Co(II) – $3d^7$. Кроме того они могут быть использованы для исследования высоко-спиновых и низко-спиновых состояний в Ян-Теллеровских системах и для квантово-химических, термодинамических и для иных теоретических расчетов свойств изученных фаз.

С практической точки зрения, детальный анализ межмолекулярных контактов в комплексах и способ их взаимной укладки в структурах представляет интерес не только для кристаллохимии этих соединений, но и для поиска новых β -дикетонатных

координационных соединений металлов, которые обладают стабильностью и высокой летучестью. Именно эти свойства позволяют их использовать в качестве прекурсоров функциональных покрытий.

Представленная к защите диссертация Дмитрия Александровича Пирязева является значительным вкладом в развитие исследований в области кристаллохимии. Результаты его работ опубликованы в ведущих отечественных и международных научных журналах и представлены на российских и международных конференциях. По объему выполненного эксперимента, его актуальности, уровню обсуждения результатов и их научной и научно-прикладной значимости, новизне и достоверности работа полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям и установленным п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением правительства РФ (от 24 сентября 2013 г. № 842). Ее автор Дмитрий Александрович Пирязев заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Старший научный сотрудник
Института химии ДВО РАН,
кандидат химических наук

Л.М. Волкова

12 марта 2019 г.

Волкова Людмила Михайловна, кандидат химических наук,
ФГБУН Институт химии Дальневосточного отделения РАН,
690022, г. Владивосток, пр. 100-летия Владивостока, 159
Тел. +7(423) 2-311-889, e-mail: volkova@ich.dvo.ru

Подпись Л.М. Волковой заверяю
Зам. директора по научной работе
ФГБУН Института химии Дальневосточного отделения РАН,
кандидат химических наук



Д. В. Маринин

Согласна на обработку персональных данных

Л. М. Волкова