

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

Известно, что β -дикетонатные координационные соединения металлов обладают необычными химическими свойствами, стабильностью и высокой летучестью. β -Дикетонат-ионы способны координироваться различными способами и способны к кето-енольной таутомерии. Литературные данные о строении комплексов Co(II), Co(III), Ir(I) с β -дикетонат-ионами и их производными были разрозненными и практически без анализа межмолекулярных взаимодействий и упаковок кристаллов. Поэтому установление кристаллической структуры новых соединений из этой серии и систематический кристаллохимический анализ β -дикетонатных комплексов Co(II), Co(III), Ir(I) являются актуальной и важной задачей.

В данной работе определены кристаллические структуры 19 новых β -дикетонатных комплексов Co(II), Ir(I). Проанализированы упаковки молекул в кристалле с построением поверхностей Хиршфельда и расчетом характеристик шаровидности и асферичности 54 комплексов Co(II), Co(III), Ir(I) с β -дикетонат-ионами и их производными (новых и известных).

Наиболее интересны и актуальны, с моей точки зрения, найденные в диссертации границы шаровидности и асферичности октаэдрических и тетраэдрических комплексов Co(II) и Co(III). В случаях превышения/понижения этих границ и при отсутствии сильных межмолекулярных взаимодействий реализуются псевдогексагональные мотивы упаковок комплексов.

Следует отметить образование стопок молекул комплексов $\text{Ir}(\text{CO})_2\text{L}$ с помощью металлофильных контактов $\text{Ir}\dots\text{Ir}$ с расстояниями 3.21 – 3.56 Å. Упаковка стопок этих комплексов близка к искаженно-гексагональной.

Также не менее интересно исследование комплексов $\text{Ir}(\text{cod})\text{L}$. В этом случае циклооктадиеновый лиганд препятствует образованию металлофильных контактов $\text{Ir}\dots\text{Ir}$ и реализуются межмолекулярные агостические контакты $\text{Ir}\dots\text{H}$, приводя к образованию димеров.

Отмечу пару простых опечаток в автореферате, которые несколько не уменьшают достоинство автореферата. В таблице 3 в первой строке написано « $\text{Co}(\text{diam})(\beta\text{-dik})_3$ », что не соответствует названию таблицы. На странице 16 имеется предложение с фрагментом

«... по методике выделения трансляционной подрешетки [9] с использованием программы [10]», но в списке цитируемой литературы нет ссылки [10]. На странице 6 используется термин «FF-стэкинг», обычно используется термин π -стэкинг.

В целом работа Д.А. Пирязева представляет собой законченное в рамках поставленной задачи исследование, которое по объему, уровню новизны и значимости результатов отвечает всем требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Диссертационная работа Д.А. Пирязева соответствует физико-математическим наукам по специальности 02.00.04 – физическая химия и соответствует п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842, а её автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук.

Доктор химических наук
Ведущий научный сотрудник
Центра спектральных исследований отдела
Физической органической химии ФГБУН
Новосибирского института органической химии
Им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения РАН
630090, г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 9

Гатилов Юрий Васильевич

+7(383)3307864
gatilov@nioch.nsc.ru
17.01.2019

Подпись Гатилова Ю.В. заверяю
Ученый секретарь Новосибирского института
органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН
кандидат химических наук



Бредихин Р.А.