

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации

**Кондратенко Юлии Андреевны**

«Синтез, строение и свойства новых внутрикомплексных соединений трис(2-гидроксиэтил)амин»,  
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности  
02.00.04 – физическая химия

Работа Ю.А. Кондратенко посвящена комплексному исследованию солей триэтаноламмония с различными органическими противоионами. Триэтаноламин, применяемый для синтеза атранов, является хорошо доступным реагентом, однако конечная стоимость самих силатранов и герматранов велика. Второй проблемой, которая также помешала этим соединений является их гидролитическая неустойчивость. Протатраны, в определенном смысле могут быть заменой силатранов и герматранов для получения новых биологически активных соединений и их стоимость гораздо меньше. То же самое касается и синтезированных в работе структур - металлоатранов, содержащих переходные металлы. Таким образом, тема диссертационного исследования является весьма актуальной.

Научная новизна состоит в синтезе ряда ранее неизвестных трис(2-гидроксиэтил)аммониевых солей биологически активных карбоновых кислот (бензойная, коричная, салициловая, янтарная, малоновая, щавелевая, яблочная и лимонная) и комплексном изучении их строения, физико-химических свойств, а также биологической активности. Результаты, полученные автором, могут иметь и практическую значимость, поскольку в работе разработаны новые способы синтеза целевых соединений и усовершенствованы старые. Особенно следует отметить способ синтеза галогенидов тетраакис(2-гидроксиэтиламмония). Полученные галогениды представляют интерес как исходные соединения для синтеза новых металлоатранов, что было успешно продемонстрировано в работе на примере комплексов переходных металлов.

Судя по автореферату, диссертационная работа оставляет положительное впечатление благодаря значимости результатов для химии металлоатранов и солей органических аммонийных катионов, широкому кругу методов, использованных для решения поставленных задач, и наличию данных о биологической активности полученных соединений. Работа Ю.А. Кондратенко фактически является удачным примером столь востребованных сейчас междисциплинарных исследований.

По тексту автореферата и иллюстративному материалу имеются следующие замечания:

1. В работе широко используются данные рентгеновской дифракции и квантовохимические расчеты. Определенное удивление вызывает тот факт, что для расчета комплексов переходных металлов использованы различные базисные наборы (cc-pVDZ и 6-31G(d), тогда как можно было бы использовать один (что облегчило бы объективное сравнение расчетных данных как между собой, так и с экспериментом).


2. Согласие между расчетом и экспериментом в случае структурных данных для комплексов переходных металлов можно считать удовлетворительным. Однако, некоторые межатомные расстояния M-N и M-O достаточно сильно расходятся с экспериментом. Эта проблема ранее отмечалась для атранов. Достаточно хорошо работающим решением этой проблемы является использование метода PCM. В данной работе его следовало бы использовать, чтобы улучшить согласие между экспериментом и расчетом.

3. На рис. 1 (б) нарисованы две половинки сукцинат-аниона. Специалисту в области структурного анализа понятно, что в структуре оба аниона лежат на элементе симметрии. Тем не менее, неспециалистов будет смущать наличие в кристалле частицы  $H_2CCOO$ . При рисовании данного рисунка в программе OLEX2 следовало бы используя режим View → Symmetry generation → Packing дорисовать недостающие части анионов.

4. В табл. 1 приведены значения с разным количеством знаков после запятой и ничего не сказано про стандартные отклонения. Это мешает провести корректное сравнение длин связей и межатомных расстояний.

Сделанные замечания не умаляют значимости результатов диссертационной работы и по актуальности, новизне и значимости полученных результатов, уровню решения научной задачи, практической значимости полученных результатов она отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям п. 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (Постановление Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842 (в редакции 2016 г.)), а ее автор Кондратенко Юлия Андреевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Внс ЛРСИ ИНЭОС РАН,  
дхн (по спец. 02.00.04 – физическая химия и  
02.00.08 – химия элементоорганических соединений),  
проф. РАН  
119991, ГСП-1, Москва, 119334, ул. Вавилова, 28  
тел: +7(499)135-9214, e-mail: alex@xrlab.ineos.ac.ru

 Корлюков Александр  
Александрович

«21» мая 2018 г.

Подпись А.А. Корлюкова заверяю.





