

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Семивражской Олеси Олеговны «Мостиковые производные фуллеренов: трансформация углеродного каркаса и химические превращения», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

В представляемой к защите работе проведено детальное изучение присоединения мостиковых фрагментов, в особенности CF_2 группы, к различным фуллеренам (как пустым, так и с атомами металлов внутри) и их CF_3 -производным. Автором проведен синтез, а также задействован широкий спектр структурных, физико-химических и расчетных подходов для описания уникальных производных, в ряде из которых реализуется динамическая структурная изомерия (разрыв сигма-связи протекает практически безбарьерно, что приводит к сосуществованию «открытых» и «закрытых» форм). Показано, что такая структурная изомерия в значительной степени зависит от зарядового состояния производных. Кроме того, показано что изменение электроноакцепторных свойств субстрата сильно зависит от типа присоединения. Работа выполнена на самом высоком уровне, и автор безусловно заслуживает присуждения степени кандидата химических наук. У меня есть только несколько замечаний, которые не влияют на общую оценку работы.

1. В русском языке слово «минорный» употребляется преимущественно как музыкальный термин, и его использование для обозначения примесных продуктов представляется нецелесообразным.
2. На стр. 9 автореферата делается вывод о том, что в анионе $\text{C}_{70}(\text{CF}_2)$ реализуется «открытая» конформация. Вместе с тем, расчеты сечения поверхности ПЭ вдоль координаты растяжения связи показывают, что открытая и закрытая конформации обладают фактически одинаковой энергией, и при комнатной температуре следует ожидать

сосуществование обоих конформеров. Я думаю, этот момент требует дальнейшего прояснения. Насколько достоверны расчеты для энергий конформеров? Насколько точно предсказываются константы СТВ?

3. На странице 20, при анализе спектров ЭПР изоструктурных $C_{70}(CF_3)_8[CF_2]^-$ и $C_{70}(CF_3)_8[CH_2]^-$, автор утверждает, что константы СТВ для ядер ^{19}F в этих соединений существенно отличаются, что указывает на значительные отличия в распределении спиновой плотности. В чем причина этого явления? Учитывая схожесть молекулярной структуры и π -системы этих производных, можно было бы ожидать и значительного сходства в значениях констант СТВ для CF_3 групп.

В целом, по актуальности, научной новизне, объему выполненной работы, оригинальности, ценности полученных данных, их достоверности исследование, проведенное Семивражской О.О., является завершенной научной работой, соответствующей п. 9–14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842 (в последней редакции 2016 года), а ее автор, Семивражская Олеся Олеговна, достоин присвоения искомой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Алексей Александрович Попов
к.х.н., научный сотрудник
Институт твердого тела и материалов
Гельмгольц Штрассе 20
01069 Дрезден, Германия
A.Popov@ifw-dresden.de
+49-351-4659-871



24.05.2017

Leibniz-Institut für Festkörper- und
Werkstoffforschung Dresden e.V.
Helmholtzstraße 20 · 01069 Dresden

Dr. Alexey A. Popov
Leibniz Institute for Solid State and Materials Research
Helmholtzstraße 20
01069 Dresden Germany