

УТВЕРЖДАЮ

Директор Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
«Федеральный исследовательский центр «Казанский
научный центр Российской академии наук»,
член-корр. РАН _____ А.А. Калачев

«15» декабря 2023 года

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки
«Федеральный исследовательский центр
«Казанский научный центр Российской академии наук»

Диссертация Ившина Камиля Анатольевича «Супрамолекулярная организация и природа межмолекулярных взаимодействий в комплексах с переносом заряда на основе полициклических ароматических соединений и ряда акцепторов хиноидной структуры» выполнена в лаборатории дифракционных методов исследований Института органической и физической химии им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук» (ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН).

В период подготовки диссертации соискатель Ившин К.А. обучался в очной аспирантуре ФИЦ КазНЦ РАН по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (01.11.2016-31.10.2020), а также работал в должности младшего научного сотрудника (с 09.2018 по настоящее время) в лаборатории дифракционных методов исследований ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН

Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана в 2022 году ФИЦ КазНЦ РАН.

В 2016 г. Ившин К.А. окончил магистратуру Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет» по направлению 03.04.03 «Радиофизика».

Научный руководитель – д.х.н. Катаева Ольга Николаевна – является главным научным сотрудником лаборатории дифракционных методов исследований ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН.

Диссертация Ившина К.А. обсуждалась на заседании расширенного научного семинара ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН по направлению «Физическая и супрамолекулярная химия, кристаллохимия и спектроскопия» (протокол № 8 от 28.11.2023). На заседании

присутствовали 51 чел., в т.ч. члены диссертационного совета 24.1.225.01 и Ученого совета ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН: д.х.н. Яхваров Д.Г., д.х.н. Мустафина А.Р., д.х.н. Карасик А.А., д.х.н. Литвинов И.А., д.х.н. Хаматгалимов А.Р., д.х.н. Захарова Л.Я., д.х.н. Балакина М.Ю., д.х.н. Будникова Ю.Г., к.х.н. Торопчина А.В.

При обсуждении диссертации соискателю были заданы следующие вопросы:

1. д.х.н. Балакина М.Ю.: для чего были рассчитаны теоретические карты распределения деформационной электронной плотности?
2. д.х.н. Балакина М.Ю.: Что такое T в процентах по оси ординат на рисунках энергетических щелей?
3. д.х.н. Балакина М.Ю.: Что такое кристаллы с оптимальной структурой?
4. д.х.н. Мусина Э.И.: какая установлена взаимосвязь между свойствами и структурой соединений?
5. к.ф.-м.н. Фоминых О.Д.: как был посчитан перенос заряда? Как данный метод применяется для расчета переноса заряда долей электрона?
6. д.х.н. Захарова Л.Я.: чем был обусловлен выбор исследуемых соединений?
7. д.х.н. Захарова Л.Я.: какие закономерности наблюдаются и могут ли они быть применены для других молекул доноров и акцепторов?
8. д.х.н. Янилкин В.В.: как была посчитана энергия взаимодействий и чему она равна в случае исследуемых соединений

На все поставленные вопросы соискатель дал исчерпывающие ответы.

С рецензией на работу выступил д.х.н. Яхваров Д.Г. Рецензия положительная.

Диссертационная работа Ившина Камиля Анатольевича «Супрамолекулярная организация и природа межмолекулярных взаимодействий в комплексах с переносом заряда на основе полициклических ароматических соединений и ряда акцепторов хиноидной структуры» выполнена в области исследования супрамолекулярной организации и природы межмолекулярных взаимодействий сокристаллов на основе донорных молекул толуола, полициклических ароматических углеводородов антрацена, тетрацена, хризена, а также фталоцианина марганца и акцепторов тетрацианохинодиметана и его фтор-производных, а также 1,2,3,4,5,6,7,8-октафторантрацен-9,10-диона.

Актуальность работы. Сокристаллы комплексов с переносом заряда на основе делокализованных π -систем вызывают большой интерес у исследователей в силу своих уникальных физических свойств, благодаря которым они находят применение в молекулярной электронике. Особенно важным аспектом при создании органических функциональных материалов является управление

супрамолекулярной организацией донорных и акцепторных компонентов в сокристаллах и установление взаимосвязи между структурой многокомпонентных кристаллов, межмолекулярными взаимодействиями и функциональными свойствами. Для решения этой задачи необходимы глубокие исследования природы нековалентных взаимодействий, их силы и направленности; механизмов переноса заряда в сокристаллах и факторов, определяющих подвижность носителей заряда; взаимосвязи между межмолекулярными взаимодействиями, кристаллической упаковкой и физическими свойствами соединения. Решение этих проблем является актуальной и значимой задачей, которая обеспечит рациональный дизайн многокомпонентных кристаллов с заданными свойствами. Данной теме и посвящена диссертационная работа Ившина Камиля Анатольевича.

Структура и содержание диссертации. Диссертационная работа изложена на 157 страницах, включает 60 рисунков и 12 таблиц и состоит из введения, 3 глав, заключения, списка использованных источников, включающего 261 наименование, в том числе собственные публикации соискателя. В первой главе представлен литературный обзор, посвященный типам межмолекулярных взаимодействий и супрамолекулярной организации органических сокристаллов, а также зависимости физических свойств от переноса заряда и супрамолекулярной организации. Вторая глава представляет собой экспериментальную часть, в которой приведена кристаллизация соединений, а также описание использованных методов исследования. Третья глава посвящена обсуждению полученных результатов. В ней проведен анализ структуры и свойств соединений, полученных широким спектром современных методов, в том числе теоретическое исследование физических свойств некоторых сокристаллов. После третьей главы следуют заключение и список использованной литературы.

Диссертационная работа обладает высокой степенью новизны и практической значимости.

Научная новизна диссертационной работы. Ившиным К.А. охарактеризованы структуры сокристаллов на основе ароматических соединений и акцепторов октафторантрахинона, тетрацианохинодиметана и его фтор-производных, проведено теоретическое и экспериментальное исследование распределения электронной плотности сокристаллов антрацена, тетрацена, хризена с F_2TCNQ и тетрацена с F_4TCNQ . Выявлено влияние относительных размеров компонентов сокристалла, топологии молекул, взаимодействий в подсистемах акцептор-акцептор и акцептор-донор на кристаллическое строение сокристаллов. Установлено строение сокристаллов фталоцианина марганца ($MnPc$) с анион-радикалами $TCNQ^{\bullet-}$ и $F_4TCNQ^{\bullet-}$ и комплексов, полученных в результате реакции фталоцианина марганца ($MnPc$) с тетрафторпроизводным тетрацианохинодиметана (F_4TCNQ), в которых произошло химическое превращение молекулы F_4TCNQ с образованием нового дианиона 4-(дицианометанидо)тетрафторбензоата, изучены магнитные свойства металл-содержащих соединений.

Теоретическая и практическая значимость диссертационной работы.

Теоретическая значимость работы заключается в получении результатов фундаментального характера в области дизайна сокристаллов по исследованию взаимосвязи между супрамолекулярной организацией, межмолекулярными взаимодействиями, кристаллической структурой, переносом заряда и физическими свойствами. Полученные в работе результаты исследования могут быть использованы для дизайна новых органических функциональных материалов с заранее заданными свойствами.

Апробация работы. По материалам диссертационной работы опубликовано 6 статей в рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК при Минобрнауки России, и тезисы 6 научных докладов в материалах международных и Всероссийских конференций.

Достоверность и обоснованность полученных результатов.

Представленные в диссертационной работе результаты исследований являются достоверными и подтверждаются большим объемом экспериментальной работы, с использованием современных физических и физико-химических методов исследования структуры и свойств веществ (рентгеноструктурный анализ, порошковая дифрактометрия, дифференциальная сканирующая калориметрия, ИК спектроскопия, циклическая и дифференциальная импульсная вольтамперометрия) и методов квантовой химии.

Научные положения и выводы являются обоснованными и полностью обобщают полученные результаты. Диссертационная работа, проведенные исследования и сделанные автором научные выводы соответствуют пунктам 1. «Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик» и 11. «Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных среды и белковом окружении» паспорта специальности 1.4.4. Физическая химия.

Принципиальных **замечаний** по содержанию работы при ознакомлении с диссертацией не возникло. Есть несколько замечаний, касающихся оформления работы:

1. Отсутствует Список обозначений и сокращений, а также нумерация страниц (нумерация страниц не совпадает с Оглавлением).

2. Дважды повторяется «Введение», и обычно раздел «Введение» не нумеруется (см. «1.1. Введение» на стр. 13).

3. В разделе 3.2. отсутствует вывод, характерный для всех других разделов (3.1; 3.3; 3.4; 3.5; 3.6).

4. На стр. 7 диссертации не верно записано название соединения: «1,2,3,4,5,6,7,8–ортофтор-9,10-антрахинон».

5. Нумерация рисунков желательно подредактировать (Рисунок 1.1. во «Введении»).

6. Не очень корректно называть исследованные комплексы марганца металлоорганическими соединениями, так как в них отсутствует связь металл-углерод.

7. В тексте диссертации присутствует ряд опечаток, например: «Акамедии» (стр.11), «заключаттса» (стр.12), «коформера» (стр. 15), «8 мгр» (стр. 34) и т.д. В некоторых местах пропущены точки и запятые.

8. При оформлении кратных значений, желательно придерживаться единого стандарта и указывать знаменатель дроби либо через «/» либо «-1».

9. Кроме этого, также желательно использовать более научную терминологию для некоторых описанных в работе исследований и процессов, таких как, например, «процессирование данных» на стр. 37, и более компактно изложить выводы и заключение по диссертационной работе.

Следует отметить, что представленные замечания не являются существенными и не влияют на общее положительное впечатление о диссертационной работе, в которой достигнута заявленная цель работы и решены все задачи данного исследования в полном объёме.

Заключение

Диссертационная работа Ившина Камиля Анатольевича «Супрамолекулярная организация и природа межмолекулярных взаимодействий в комплексах с переносом заряда на основе полициклических ароматических соединений и ряда акцепторов хиноидной структуры» представляет собой законченную научно-исследовательскую работу, выполненную на достаточно высоком научном уровне, и соответствует паспорту специальности 1.4.4. Физическая химия.

Считаю, что рецензируемая диссертационная работа по актуальности, новизне, научной и практической значимости, а также по числу и качеству выпущенных диссертантом публикаций соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук, и может быть рекомендована к официальной защите по специальности 1.4.4. Физическая химия.

С поддержкой работы выступили: д.х.н. Будникова Ю.Г.

По итогам обсуждения принято следующее **Заключение.**

Работа актуальна. Органические функциональные материалы на основе делокализованных π -систем вызывают большой интерес у исследователей в силу своих уникальных физических свойств, благодаря которым они находят применение в молекулярной электронике при создании органических полупроводников, фотодиодов, солнечных батарей, сенсорных элементов, молекулярных интерфейсов,

в медицине при разработке контрастных агентов для магнитно-резонансной томографии, фотосенсибилизаторов для фотодинамической терапии рака и прочее.

Наиболее перспективным классом органических молекулярных материалов являются многокомпонентные кристаллы (или сокристаллы) комплексов с переносом заряда. В результате объединения донорных и акцепторных молекул в одном кристалле можно получить функциональные свойства, не характерные для кристаллов отдельных компонентов. Кроме того, большое разнообразие сравнительно простых донорных и акцепторных соединений предоставляет безграничные возможности создания новых многокомпонентных систем. Наряду с этим, главными преимуществами инженерии сокристаллов по сравнению с традиционными технологиями являются:

1) отказ от сложных и дорогостоящих процедур синтеза: сокристаллы могут быть успешно получены методом контролируемой сублимации компонентов или путем их выращивания из раствора;

2) возможность тонкой настройки функциональных параметров материалов путем выбора донорных и акцепторных молекул с учетом их размеров, топологических характеристик, наличия функциональных групп. При этом получение сокристаллов может идти как за счет слабых нековалентных взаимодействий, так и за счет химических превращений донорных и акцепторных составляющих.

Особенно важным аспектом при создании органических функциональных материалов является управление супрамолекулярной организацией донорных и акцепторных компонентов в сокристаллах и установление взаимосвязи между структурой многокомпонентных кристаллов, межмолекулярными взаимодействиями и функциональными свойствами.

Несмотря на большое количество известных сокристаллов комплексов с переносом заряда, до сих пор проблематично предсказать их кристаллическую упаковку, исходя из структуры отдельных компонентов. Причина этих трудностей связана с тем, что супрамолекулярная организация молекул в кристалле определяется тонким балансом множества межмолекулярных взаимодействий, включая слабые дисперсионные и $\pi \cdots \pi$ взаимодействия, водородные связи, галоген-галоген взаимодействия и другие.

Таким образом, необходимы более глубокие исследования природы нековалентных взаимодействий, их силы и направленности; механизмов переноса заряда в сокристаллах и факторов, определяющих подвижность носителей заряда; взаимосвязи между межмолекулярными взаимодействиями, кристаллической упаковкой и физическими свойствами соединений. Решение этих проблем является актуальной задачей, которая обеспечит рациональный дизайн сокристаллов с заданными свойствами.

Научная новизна работы:

Получены и охарактеризованы новые сокристаллы комплексов с переносом заряда антрацен/PFAQ, тетрацен/PFAQ, толуол/ F_1 TCNQ, толуол/ F_2 TCNQ,

толуол/ F_4TCNQ , антрацен/ F_2TCNQ , тетрацен/ F_2TCNQ , хризен/ F_2TCNQ , исследованы закономерности супрамолекулярной организации донорных и акцепторных компонентов в сокристаллах, оценена величина переноса заряда. Выявлено влияние относительных размеров компонентов сокристалла, топологии молекул, взаимодействий в подсистемах акцептор-акцептор и акцептор-донор на кристаллическое строение сокристаллов.

Впервые исследовано распределение теоретической статической деформационной электронной плотности в сокристаллах антрацен/ F_2TCNQ , тетрацен/ F_2TCNQ и хризен/ F_2TCNQ , полученное с помощью квантово-химических расчётов и топологического анализа и распределение экспериментальной статической деформационной электронной плотности в сокристалле тетрацен/ F_4TCNQ , полученной с помощью топологического анализа на основе данных из прецизионного рентгеноструктурного эксперимента; исследованы межмолекулярные взаимодействия и механизм переноса заряда.

Установлено строение первых комплексов сокристаллов $MnPc \cdot 2(H_2O)$ с анион-радикалами $TCNQ^{\cdot -}$ и $F_4TCNQ^{\cdot -}$. Показано, что данные комплексы имеют необычную супрамолекулярную организацию в кристалле за счет $C-H \cdots \pi$ взаимодействий.

Установлено строение новых комплексов, полученных в результате реакции $MnPc$ с F_4TCNQ , в которых произошло химическое превращение молекулы F_4TCNQ с образованием нового 4-(дицианометанидо)тетрафторбензоат дианиона, изучены магнитные свойства термодинамически стабильного комплекса.

Теоретическая и практическая значимость.

Теоретическая значимость работы заключается в получении результатов фундаментального характера в области дизайна сокристаллов по изучению природы межмолекулярных взаимодействий и исследованию взаимосвязи между супрамолекулярной организацией, межмолекулярными взаимодействиями, кристаллической структурой, переносом заряда и физическими свойствами. Полученные в работе результаты исследования могут быть использованы для дизайна новых органических функциональных материалов.

Ценность научных работ соискателя заключается в том, что

1. Установлена структура ряда новых сокристаллов с переносом заряда, полученных на основе ароматических углеводородов (толуола, антрацена, тетрацена, хризена) и фторзамещенных производных тетрацианохинодиметана (F_xTCNQ , $x = 1, 2, 4$), а также перфторантрахинона (PFAQ). Показано, что молекулы донора и акцептора в сокристаллах образуют чередующиеся стопки, при этом величина переноса заряда в данных системах равна 0.04-0.30 е. Супрамолекулярная организация кристаллов в большей степени зависит от относительных размеров используемых компонентов, а не от их донорной и акцепторной способности:

- в случае превосходящих размеров донорных молекул (тетрацен/PFAQ, хризен/ F_2TCNQ) относительная ориентация молекул в стопках определяется $\pi \cdots \pi$

взаимодействиями и соответствует оптимальной для них структуре в стопках «кольцо над связью»;

- в кристаллах, в которых размеры молекул донора меньше, чем размеры молекул акцептора (толуол/ F_xTCNQ ($x = 1, 2, 4$), антрацен/ F_2TCNQ) доминируют латеральные «акцептор-акцептор» взаимодействия, влияющие на относительную ориентацию компонентов в стопках, при этом кристаллическая структура зависит от числа атомов фтора;

- при соизмеримых размерах молекул донора и акцептора (антрацен/PFAQ) реализуются множественные латеральные взаимодействия, которые приводят к появлению полиморфных сокристаллов, различающихся типом $F \cdots F$ контактов.

2. На основе анализа распределения теоретической и экспериментальной статической деформационной электронной плотности в сокристаллах антрацен/ F_2TCNQ , тетрацен/ F_2TCNQ , хризен/ F_2TCNQ и тетрацен/ F_4TCNQ показано, что направленность латеральных взаимодействий определяется взаимодействиями неподелённых электронных пар атомов азота и фтора с областями разрежения электронной плотности на атомах водорода. Распределение деформационной электронной плотности на эндо- и экзоциклических $C=C$ и $C \equiv N$ связях молекулы акцептора соответствует $\pi \cdots \pi$ взаимодействиям по типу «ключ-замок»: области положительной и отрицательной деформационной электронной плотности направлены друг на друга.

3. Показано, что при взаимодействии фталоцианина марганца(II) с тетрацианохинодиметаном и его перфторированным производным образуются комплексы, в которых ион марганца имеет степень окисления III, и находится в высокоспиновом состоянии $S = 2$:

- при использовании в качестве среды N,N-диметилацетамида или его смеси с 1,3-диметил-3,4,5,6-тетрагидро-2(1H)-пиримидином впервые были получены сокристаллы диаквафталоцианина марганца ($Mn^{III}Pc \cdot 2(H_2O)$) с анион-радикалами тетрацианохинодиметанов $TCNQ^{\cdot -}$ и $F_4TCNQ^{\cdot -}$ состава 1:1 за счёт переноса одного электрона. Их супрамолекулярная организация определяется $C-H \cdots \pi$ взаимодействиями, при этом наблюдается близкая к ортогональной взаимная ориентации катионов и анионов;

- при использовании N-метил-2-пирролидона происходит образование нового 4-(дицианометанидо)тетрафторбензоат дианиона с переносом двух электронов и последовательная кристаллизация комплекса состава 2:1 с ортогональной монодентатной координацией дианиона с ионом марганца, и термодинамически стабильного димерного комплекса с параллельной ориентацией двух фталоцианиновых фрагментов и дианиона тетрафторбензоата, являющегося мостиковым и обеспечивающим антиферромагнитное взаимодействие между ионами марганца.

Обоснованность и достоверность полученных результатов. Достоверность результатов проведённых исследований основана на использовании современных

физических методов, в том числе рентгеноструктурного анализа монокристаллов, выполненного на современных приборах при температурах от 100 К до 293 К, и подтверждена низкими значениями факторов расходимости и результатами квантово-химических расчётов.

Личный вклад соискателя заключается в анализе литературных данных, в участии в постановке цели и задач исследования. Все экспериментальные и расчётные данные, приведенные в диссертационной работе, получены автором лично или при его непосредственном участии в процессах выполнения рентгеноструктурного анализа, проведения квантово-химических расчётов. Также личный вклад автора заключается в обсуждении полученных результатов, формулировке научных выводов, подготовке публикаций по теме исследования и апробации результатов работы.

Основное содержание работы изложено в 6 статьях в рецензируемых изданиях, рекомендованных ВАК для размещения материалов диссертаций:

1. Kataeva, O. Electron Transfer and Unusual Chemical Transformations of F₄-TCNQ in a Reaction with Mn-Phthalocyanine / O. Kataeva, K. Metlushka, **K. Ivshin**, A. Kiiamov, V. Alfonsov, M. Khrizanforov, Y. Budnikova, O. Sinyashin, Y. Krupskaya, V. Kataev, B. Büchner, M. Knupfer // Eur. J. Inorg. Chem. – 2018. – V. 2018. – № 28. – P. 3344-3353.

2. Kataeva, O. An unusual donor–acceptor system Mn^{II}Pc-TCNQ/F₄TCNQ and the properties of the mixed single crystals of metal phthalocyanines with organic acceptor molecules / O. Kataeva, K. Metlushka, **K. Ivshin**, K. Nikitina, V. Alfonsov, A. Vandyukov, M. Khrizanforov, Y. Budnikova, O. Sinyashin, Y. Krupskaya, V. Kataev, B. Büchner, M. Knupfer // Dalton Trans. – 2019. – V. 48. – № 46. – P. 17252-17257.

3. Kataeva, O. Charge-Transfer Complexes of Linear Acenes with a New Acceptor Perfluoroanthraquinone. The Interplay of Charge-Transfer and F···F Interactions / O. Kataeva, **K. Ivshin**, K. Metlushka, S. Latypov, K. Nikitina, D. Zakharychev, A. Laskin, V. Alfonsov, O. Sinyashin, E. Mgeladze, A. Jäger, Y. Krupskaya, B. Büchner, M. Knupfer // Crystal Growth & Design. – 2019. – V. 19. – № 9. – P. 5123-5131.

4. Kataeva, O. Understanding Intermolecular Interactions in a Tetracene–F₄TCNQ Cocrystal via Its Electron Density Distribution and Topology / O. Kataeva, M. Nohr, **K. Ivshin**, S. Hampel, B. Büchner, M. Knupfer // Crystal Growth & Design. – 2021. – V. 21. – № 1. – P. 471-481.

5. Kataeva, O. New Charge Transfer Cocrystals of F₂TCNQ with Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: Acceptor–Acceptor Interactions and Their Contribution to Supramolecular Arrangement and Charge Transfer / O. Kataeva, **K. Ivshin**, K. Metlushka, K. Nikitina, V. Khrizanforova, Y. Budnikova, R.R. Fayzullin, S. Latypov, S. Schiemenz, M. Bretschneider, A. Popov, S. Avdoshenko, Y. Krupskaya, B. Büchner, M. Knupfer // Crystal Growth & Design. – 2022. – V. 22. – № 1. – P. 751-762.

6. **Ившин, К.А.** Нековалентные взаимодействия в слабых донорно-акцепторных системах на основе толуола и производных тетрацианохинодиметана /

К.А. Ившин, А.П. Федонин, Р.Г. Зиннатуллин, К.Е. Метлушка, Ш.К. Латыпов, О.Н. Катаева // Журнал общей химии – 2022. – Т. 92. – №. 12. – Р. 1826–1834.

В диссертации автор ссылается на собственные опубликованные работы. В тексте диссертации отсутствуют материалы без ссылки на автора или источник заимствования.

По материалам диссертации также опубликованы тезисы 6 докладов на международных и всероссийских конференциях.

Специальность, которой соответствует диссертация.

Диссертационная работа Ившина К.А. «Супрамолекулярная организация и природа межмолекулярных взаимодействий в комплексах с переносом заряда на основе полициклических ароматических соединений и ряда акцепторов хиноидной структуры» соответствует пунктам 1 «Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик», 11 «Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных среды и белковом окружении» паспорта специальности 1.4.4. Физическая химия.

Заседание расширенного научного семинара по направлению «Физическая и супрамолекулярная химия, кристаллохимия и спектроскопия» ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН считает, что по актуальности, научной и практической значимости, достоверности полученных результатов, объему, целостности и законченности диссертационная работа Ившина Камиля Анатольевича «Супрамолекулярная организация и природа межмолекулярных взаимодействий в комплексах с переносом заряда на основе полициклических ароматических соединений и ряда акцепторов хиноидной структуры» соответствует требованиям, предъявляемым к диссертационным работам на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Расширенный научный семинар по направлению «Физическая и супрамолекулярная химия, кристаллохимия и спектроскопия» (протокол № 8 от 28.11.2023 г.) рекомендовал Ученому совету выдать Заключение по диссертационной работе Ившина К.А. Присутствовали: 51 чел. Итоги голосования: «за» – 51, «против» – нет, «воздержались» – нет.

Заключение рекомендовано к утверждению на заседании Ученого совета ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН (протокол № 11 от 20.12.2023 г.). Из 27 членов списочного состава

Ученого совета присутствовали 20 человек. Рекомендации и замечания, высказанные на научном семинаре, диссертантом учтены, и соответствующие изменения внесены в текст диссертации. Итоги голосования: «за» – 20, «против» – нет, «воздержались» – нет.

Председатель Ученого совета,
Руководитель ИОФХ им. А.Е. Арбузова
- обособленного структурного подразделения

ФИЦ КазНЦ РАН, д.х.н., член-корр. РАН

А.А. Карасик

Председатель заседания научного семинара,
«Физическая и супрамолекулярная химия, (кристаллохимия и спектроскопия», д.х.н.

А.Ю. Зиганшина

Ученый секретарь ИОФХ им. А.Е. Арбузова
- обособленного структурного подразделения

ФИЦ КазНЦ РАН, к.х.н.

А.В. Торопчина