

ВІДГУК

Офіційного опонента на дисертацію Ірини Сергіївни Коновалової «Особливості молекулярної та кристалічної будови діамінопохідних ароматичних та гетероароматичних сполук», представлену на здобуття наукового ступеня кандидата хімічних наук за спеціальністю 02.00.03 – органічна хімія.

Сучасна органічна хімія – це багатогранна наука, що має зв'язки з різними галузями природничих наук. Сьогодні органічна хімія спрямована не тільки на органічний синтез, важливі її напрямки також пов'язані з дослідженнями особливостей будови та властивостей різних хімічних речовин. Для вирішення цих завдань все більш широко використовуються методи квантової хімії які в поєднанні з експериментальними даними дозволяють глибше зазирнути в суть хімічних процесів. Одним із найдостовірніших експериментальних методів дослідження будови речовини є рентгеноструктурний метод, особливо при використанні методики прецизійного дослідження, що дозволяє вивчати розподіл електронної густини в кристалі.

У дисертаційній роботі І. С. Коновалової дуже вдало поєднано експериментальні та теоретичні методи дослідження явища спряження неподіленої електронної пари аміногрупи та π -системи ароматичного циклу. Всебічне та комплексне дослідження дозволило отримати дуже важливу структурну інформацію, яка може бути важливою не тільки для хіміків а й для мікробіологів, що досліджують структуру ДНК і РНК.

Актуальність роботи зумовлена тим, що об'єктом дослідження є не окремі факти, а явище. Це може дати поштовх для розвитку фундаментальних основ хімії аміноароматичних сполук, інженерії кристалів, тощо. Знання особливостей будови речовини дають інформацію для прогнозування властивостей матеріалів, створених на їх основі.

Про зв'язок дисертаційних досліджень з державними науковими програмами свідчить те, що робота є частиною планових досліджень, проведених у відділі рентгеноструктурних досліджень і квантової хімії ім. О.В.Шишкіна ДНУ НТК «Інститут монокристалів» НАН України, в рамках

наступних тем: Міжмолекулярні взаємодії в супрамолекулярних системах і молекулярних комплексах (№ держреєстрації 0107U000490); Некласичні міжмолекулярні взаємодії в супрамолекулярних системах і молекулярних комплексах (№ держреєстрації 0110U000624); Супрамолекулярна архітектура молекулярних кристалів на основі топології міжмолекулярних взаємодій (№ держреєстрації 0113U001411); Супрамолекулярна архітектура та властивості функціональних органічних матеріалів (№ держреєстрації 0116U001211).

Дисертація складається зі вступу, п'яти розділів, висновків, переліку використаної літератури з 269 джерел, переліку авторських публікацій за темою дисертації та додатків, і в цілому містить 32 таблиці та 55 рисунків. Загальний обсяг дисертації становить 199 сторінок.

Роботу добре сплановано, в ній одержано та проаналізовано змістовний експериментальний та теоретичний матеріал.

Наукова новизна дисертації полягає у тому, що досліджено фактори, які впливають на геометричні характеристики аміногруп, які є замісниками в ароматичному циклі; Проведено прецизійні рентгеноструктурні дослідження 3,4-діаміно-1,2,4-триазолу та його метильної похідної і проаналізовані особливості розподілу електронної густини за експериментальними даними і за результатами квантово-хімічних розрахунків; проаналізовано особливості будови поліморфних модифікацій 3,4-діаміно-1,2,4-триазолу і встановлена основна різниця в їх системах міжмолекулярних взаємодій; визначено особливості впливу поляризуючого оточення і міжмолекулярних взаємодій на ступінь спряження між неподіленою парою Нітрогену і π -системою; виявлено новий тип водневого зв'язку – змішаний X-H...N'/X-H...л' водневий зв'язок; встановлено вплив природи замісника і його положення у циклі на геометричні характеристики аміногрупи; показана роль водневих зв'язків X-H...N', в яких аміногрупа проявляє протоноакцепторні властивості у формуванні кристалічної структури.

Практичне значення одержаних результатів. Встановлені особливості будови поліморфних модифікацій і ролі водневих зв'язків X-H...N' у формуванні кристалічної структури можуть бути використані для роз-

витку принципів кристалічної інженерії. Слід також зазначити, що робота руйнує деякі стереотипи і отримані дані можуть використовуватися в освітньому процесі в рамках викладання курсу теоретичних основ органічної хімії.

Наукові положення, висновки і рекомендації, сформульовані в дисертації, добре обґрунтовано.

Дисертаційна робота І. С. Коновалової виконана на високому науковому рівні. В дисертації дуже добре поєднано сучасні високоточні експериментальні та теоретичні методи. Це гарантує **надійність** одержаних результатів.

Загальна оцінка роботи. Дисертаційна робота І. С. Коновалової є завершеним, цілісним науковим дослідженням. **Основні результати** дисертаційної роботи **повністю опубліковано** в 6 статтях у наукових міжнародних фахових журналах, а також у збірниках матеріалів наукових конференцій (тези 8 доповідей). Така кількість публікацій і високий рейтинг видань в яких вони опубліковані, дає змогу стверджувати, що висновки переконливо обґрунтовані і достовірні. Вони носять необхідний елемент новизни, мають наукову і практичну значимість, відкривають перспективи для подальшого розвитку робіт у даному науковому напрямку.

Дисертаційна робота і автореферат добре оформлено та проілюстровано, чітко викладено всі необхідні дані, які підтверджують положення та висновки. Разом з тим, при знайомстві з дисертаційною роботою та авторефератом виникли деякі питання, зауваження та побажання.

1. Не зрозуміло, чи проводилася статистична обробка структур, що містять аміногрупи, завантажених з Кембриджської бази структурних даних? Якщо так, то які закономірності були виявлені?
2. Чим був зумовлений вибір методів квантово-хімічних досліджень? З методологічної точки зору цікаво було б порівняти результати розрахунків методом MP2 з методом CCSD(T) або одним з багатодетермінантних методів.
3. Чи може змішаний X-N...N/X-N...л водневий зв'язок бути внутрішньомолекулярним ?
4. Також є декілька зауважень щодо мовного оформлення дисертації:
 - в українській мові більш прийнятним є вживання терміну «реакційна

- здатність», а не «реактивність» (стор. 30 дисертації);
- в українській мові відсутні слова «чотириохокружному» та «неводородних» (стор. 53 та 56 дисертації);
 - не узгоджено закінчення слова у реченні «Розгляд кристалічної будови поліморфних модифікацій діамінотриазола (ДАТ) **показало** абсолютно різну упаковку молекул» (стор. 80 дисертації);

Однак перелічені зауваження не впливають на високу загальну оцінку дисертаційної роботи.

Оцінюючи дисертаційну роботу Ірини Сергіївни Коновалової в цілому, можна констатувати, що вона є завершеним і цілісним дослідженням, в якому розв'язано важливу наукову задачу.

Як напрям наукових досліджень, так і зміст дисертації **відповідають вимогам щодо паспорту спеціальності 02.00.03 – органічна хімія.** За актуальністю теми, науковою новизною, достовірністю, обсягом та практичною цінністю результатів і висновків дисертаційна робота Коновалової І.С. «Особливості молекулярної та кристалічної будови діамінопохідних ароматичних та гетероароматичних сполук», повністю відповідає вимогам до кандидатських дисертацій, викладених у «Порядку присудження наукових ступенів» (Постанова Кабінету Міністрів України № 567 від 24 липня 2013 року, зі змінами, внесеними згідно з Постановою Кабінету Міністрів № 656 від 19 серпня 2015 року та № 1159 від 30 грудня 2015 року та № 567 від 27 липня 2016 року) та регламентуючим документам МОН України, а її автор заслуговує на присудження наукового ступеня кандидата хімічних наук за спеціальністю 02.00.03 – «органічна хімія».

Доктор хімічних наук, професор,
проректор з наукової роботи
національного університету імені
Олесея Гончара

Вчений секретар



С.І.Оковитий

Т.В.Ходанен