

ОТЗЫВ

научного руководителя о выпускной квалификационной работе

студентки Черанёвой А.М.

«Вовлечение броморганических соединений в образование галогенных связей бром-
бромидный лиганд»

Данная работа посвящена разбору известных примеров галогенных связей между броморганическими соединениями и бромидным лигандом. Броморганические соединения являются менее изученными донорами галогенных связей, поскольку демонстрируют меньшую электрофильность по галогену по сравнению с их иодсодержащими аналогами.

Черанёва Анна Михайловна выполняла свою выпускную квалификационную работу на кафедре физической органической химии Института химии СПбГУ. Тема её работы связана с изучением нековалентных взаимодействий с участием бромсодержащих молекул. Среди таких взаимодействий наибольшее внимание было уделено галогенным связям. Хотя изучение галогенных связей различного типа находятся под пристальным вниманием учёных на протяжении последних пятнадцати лет, определение этому типу нековалентных взаимодействий было дано ИЮПАК только в 2013 г. В настоящее время наблюдается поистине лавинообразный рост количества публикаций в этом направлении.

В рамках литературного обзора Черанёвой А.М. была проведена исчерпывающая работа по анализу и разбору всех ранее опубликованных в Кембриджской кристаллографической базе структур с контактами бром-бромид. Также была проанализирована литература по выбранным для работы донорам галогенных связей – бром и броморганическим соединениям, а также акцептору галогенных связей.

Экспериментальная часть выпускной квалификационной работы содержит ряд новых интересных результатов, научная достоверность и актуальность которых не

вызывает сомнения. В ходе выполнения работы с помощью квантово-химических расчетов, а именно расчета электростатического поверхностного потенциала и граничных орбиталей для бромоорганических молекул и комплексов Pt^{II} и Pt^{IV} была подтверждена возможность образования галогенных связей между этими соединениями. Было обнаружено, что комплекс *транс*-[PtBr₂(NCNMe₂)₂] сокристаллизуется с бромформом, 1,1,2,2-тетрабромэтаном, 1,2-дибромтетрафторбензолом, 1,4-дибромтетрафторбензолом и бромпентафторбензолом, образуя монокристаллы и выступая тем самым универсальным акцептором галогенных связей для всех этих бромцентрированных электрофилов. При сокристаллизации с молекулярным бромом в разных соотношениях получаются монокристаллы разного состава: комплекс *транс*-[PtBr₄(NCNMe₂)₂] (соотношение 1:1) и аддукт комплекса *транс*-[PtBr₄(NCNMe₂)₂] с молекулярным бромом (соотношение 1:2). Согласно данным рентгеноструктурного анализа, в полученных аддуктах образуются ГС Br⋯Br, что подтверждает электрофильность брома к бромидному лиганду.

За время выполнения работы Черанёва А.М. освоила методы синтеза необходимых для исследования координационных соединений. Она хорошо овладела современными методами установления структуры веществ и их физико-химических свойств. Следует отдельно подчеркнуть, что обработка данных рентгеноструктурного анализа и проведение квантово-химических расчётов было проведено студенткой самостоятельно в полном объёме.

При подготовке литературного обзора Черанёва А.М. продемонстрировала навыки работы со справочной и реферативной литературой, научной периодикой, электронными информационными ресурсами. При выполнении экспериментальной части работы она проявила себя грамотным научным сотрудником, умеющим самостоятельно спланировать и рационально выполнить эксперимент, обработать полученные результаты и оценить их достоверность.

Черанёву А.М. можно охарактеризовать как самостоятельного и заинтересованного исследователя, готового к решению самых серьезных проблем современной науки.

Представленная выпускная квалификационная работа Черанёвой Анны Михайловны, без сомнения, заслуживает оценки «отлично».

научный руководитель,

старший преподаватель Института химии СПбГУ,

к.х.н Иванов Даниил Михайлович



30.05.2021