

Отзыв научного руководителя на диссертационную работу

Алиаровой Ирины Сергеевны

**«НУКЛЕОФИЛЬНОСТЬ ЗОЛОТА ПРИ ОБРАЗОВАНИИ
ГАЛОГЕННЫХ СВЯЗЕЙ»**

*представленную на соискание учёной степени кандидата химических наук по
специальности 1.4.1 – Неорганическая химия*

Диссертационная работа Алиаровой И.С. посвящена исследованию комплексов золота в различных степенях окисления в качестве участников межмолекулярных взаимодействий. Среди таких взаимодействий наибольшее внимание было уделено галогенным связям, в том числе с участием металлоцентра. Полученные Алиаровой И.С. результаты расширяют представления о природе и возможностях супрамолекулярной химии на основе галогенидных комплексов золота за счёт образования нековалентных взаимодействий, включая галогенные связи с участием атома золота.

Алиарова И.С. обучалась в аспирантуре СПбГУ в 2018–2022 гг., являясь инженером-исследователем кафедры физической органической химии Института химии СПбГУ и (в рамках грантового соглашения)

младшим научным сотрудником в Международной научно-исследовательской лаборатории «Невалентные взаимодействия в химии материалов» (Томский политехнический университет).

За время обучения в аспирантуре Алиярова И.С. получила ряд новых комплексных соединений золота(III), получила сокристаллизаты комплекса золота(I) с различными донорами галогенной связи, охарактеризовала соединения и аддукты с помощью различных физико-химических методов, включая рентгеноструктурный анализ. Кроме того, в ходе выполнения работы с помощью квантово-химических подходов, включающих поверхности электростатического потенциала (ESP), визуализацию функции локализации электрона (ELF), анализ переноса заряда в рамках приближения натуральных орбиталей (NBO charge transfer), наложенные орбитали (Superimposed orbitals), 1D профили электронной плотности и электростатического потенциала (ED/ESP) и анализ натуральной заселенности (NPA) были подтверждены как образование нековалентных взаимодействий, так и природа участников этих взаимодействий. Следует отдельно подчеркнуть, что обработка данных рентгеноструктурного анализа и проведение квантово-химических расчётов было проведено диссертантом самостоятельно в полном объёме. В процессе выполнения диссертационной работы Алиярова И.С. проявила себя как заинтересованный и самостоятельный исследователь, грамотный научный сотрудник, умеющий самостоятельно спланировать и рационально выполнить эксперимент, обработать полученные результаты и оценить их достоверность.

Научные результаты работы Алияровой И.С. опубликованы в трёх статьях в международных реферируемых журналах первого квартиля, включая *Inorganic Chemistry* (2 статьи) и *Crystal Growth & Design*, а также неоднократно представлены на российских и международных конференциях.

Алиярова И.С. участвовала в выполнении научно-исследовательских работ по проектам, поддержанным Российским фондом фундаментальных исследований (грант 20-33-90029 «Аспиранты»), Российским научным фондом (грант 20-13-00144) и Министерством науки и высшего образования РФ (Мега-грант 075-15-2021-585).

Считаю, что квалификационная работа Алияровой Ирины Сергеевны является самостоятельным научным исследованием и отвечает требованиям, представляемым к кандидатским квалификационным работам, а её автор заслуживает присуждения степени кандидата химических наук по специальности 1.4.1 – Неорганическая химия.

научный руководитель:

д.х.н., профессор кафедры физической

органической химии,

академик РАН,

СПбГУ, Университетская наб. 7-9, 199034



Кукушкин Вадим Юрьевич

v.kukushkin@spbu.ru



3

19.08.2022

