

ВІДГУК

офіційного опонента про дисертаційну роботу

Бабака Миколи Леонідовича “Синтез хіральных добавок для рідкокристалічних композицій на основі діангідрогекситолової та лупанової молекулярних платформ”, представленої на здобуття наукового ступеня кандидата хімічних наук за фахом 02.00.03 - органічна хімія

Актуальність теми. Розуміння значущості глибокого використання рослинної сировини для потреб різних галузей промисловості стало наразі вибухом з багатьох причин. З точки зору хімії та технології, найважливішими є дві з них: по-перше, це поновлюваний ресурс, на відміну від запасів нафти, газу тощо. По друге, значній кількості сполук, що надає рослинний мир, притаманна така унікальна властивість як хіральність: навіть таку нескладну оптично активну молекулу, як α -*D*-глюкоза, що продукується рослинами під час фотосинтезу мільярдами тон щорічно, отримати традиційними синтетичними методами органічної хімії є проблемою, не кажучи про проблему відходів. Розвиток різних галузей науки нарешті довів нас до розуміння, що дослідження і використання хіральных хімічних речовин, створених для нас природою, піднімає людство на новий рівень знань та технологій від техніки до life science.

Саме у цьому ключі виконане дослідження М.Л. Бабака “Синтез хіральных добавок для рідкокристалічних композицій на основі діангідрогекситолової та лупанової молекулярних платформ”. Бурхливий розвиток оптоелектроніки, фотоніки, інформаційних технологій зумовив широке використання пристроїв на основі рідкокристалічних матеріалів. Дисплеї на основі хірально-нематичних рідкокристалічних сумішей з селективним відбиттям світла у видимій області спектра характеризуються низьким енергоспоживанням, підвищеною контрастністю, наявністю значного кута огляду. На відміну від більшості публікацій і патентів, автор дослідження зосередив свої зусилля на створенні хіральных добавок для рідкокристалічних

сумішей з високою здатністю до закручування з використанням природних хіральних матриць – ізосорбїду та похідних бетуліну, що стало однією з складових успіху рецензованої роботи, а отримані результати відповідають сучасному світовому рівню. Дисертаційна робота М.Л. Бабака “Синтез хіральних добавок для рідкокристалічних композицій на основі діангідрогекситолової та лупанової молекулярних платформ” є актуальною для органічної хімії і матеріалознавства. Важливість підкреслюється і тим, що робота є складовою частиною планових досліджень відділу оптично активних органічних сполук ДНУ «НТК «Інститут монокристалів» НАН України.

Ступінь обґрунтованості наукових положень, висновків і рекомендацій, сформульованих у дисертації. Наукові положення, покладені в основу дисертації, ґрунтуються, перш за все, на результатах аналізу літературних джерел. В огляді літератури проведено вичерпний аналіз методів синтезу і властивостей існуючих хіральних добавок та переконливо обґрунтовано доцільність і актуальність вибору об'єктів дослідження дисертаційної роботи.

Внаслідок цього здобувачем запропоновано та експериментально розроблено низку методів синтезу невідомих раніше асиметричних етерів, естерів, етер-естерів та гетарилзаміщених похідних діангідрогекситолу, а також похідних лупанової структури – алобетуліну і алобетулону. Автором розроблено ряд оригінальних препаративних методів. Проведене систематичне дослідження умов утворення цільових сполук, їх будову та структуру доведено за допомогою сучасних фізико-хімічних методів.

Наукові положення дисертації ґрунтуються на результатах вивчення хімічних перетворень обраних об'єктів та на ретельному дослідженні їх будови. Треба відзначити високопрофесійне використання автором сучасних спектральних методик, мас- та РСА для встановлення складу і просторової будови отриманих сполук, що містять кілька хіральних атомів вуглецю.

Все вищенаведене дає підставу вважати рівень наукових положень і висновків дисертації високим і добре аргументованим, відповідним до сучасного стану розвитку органічної хімії.

Наукова новизна отриманих результатів. Основні результати, що подані у дисертаційній роботі, відповідають критерію новизни у досліджуваній області хімії. Серед важливих елементів новизни представленої роботи слід відзначити, що автором започатковано новий синтетичний підхід до створення високоефективних хіральних домішок – асиметричних структур з базовою хіральною платформою на основі оптично активних природних сполук. Розроблено методи одержання асиметричних естерів, етерів та гетарилзаміщених ізосорбїду, проведено спрямовану функціоналізацію алобетулолу, досліджено їх фізичні властивості як хіральних домішок. На великій базі похідних діангідрогексїтолу показано залежність геометрії та фізичних параметрів синтезованих сполук від введених замісників. Вперше похідні лупану використані як платформа хіральних домішок та показано, що нові похідні алобетуліну, синтезовані автором дослідження, є новим типом хіральних домішок.

Теоретичне і практичне значення роботи. Дисертантом, на мій погляд, вирішено два значних теоретичних завдання:

- розробка синтетичних підходів до отримання асиметричних похідних ангідрогексїтолу і обґрунтування ефективності їх використання як хіральних домішок до рідкокристалічних композицій
- створення нового класу хіральних домішок на основі похідних лупану

Здобувачем успішно здійснено велику і важку роботу з розробки методів спрямованого синтезу нових високоефективних хіральних добавок з селективним відбиттям світла у видимій області спектра, придатних для створення на їх основі матеріалів для малоенергоємних пристроїв відображення інформації. Розроблені автором методики синтезу

відкривають нові можливості для цілеспрямованого синтезу інших речовин із очікуваними властивостями. Синтетична частина роботи є також добрим внеском до розуміння реакційної здатності базових об'єктів дослідження. Значним досягненням дисертанта стало з'ясування просторової будови отриманих сполук, а для низки їх – абсолютної конфігурації діастереомерів, що дуже рідко зустрічається в синтетичних дослідженнях та свідчить про високий науковий та експериментальний рівень здобувача.

Рецензована робота має значну практичну цінність в першу чергу завдяки дослідженню оптичних властивостей синтезованих сполук, більшість з яких є перспективними компонентами РК-екранів, що стало підґрунтям трьох отриманих патентів. Окрім того, встановлені на великому масиві отриманих експериментальних даних залежності «структура – властивість» дозволяють також отримати значущий розрахунковий прогноз фізичних параметрів та суттєво оптимізувати пошук нових хіральних добавок. Розроблений метод введення гетарильних залишків до хіральних поліольних структур є безперечно перспективним також з точки зору молекулярного дизайну молекул-лідерів у медичній хімії. Велику практичну цінність дисертаційній роботі надає те, що ряд опрацьованих автором методів є препаративними, такими, що виходять з легко доступних продуктів, але дозволяють отримувати різноманітні складні сполуки з великими потенціями їх подальшого використання.

Повнота опублікування матеріалів дисертації. Основні результати дисертаційної роботи повністю розкриті в авторефераті та відображені у 4 статтях у фахових виданнях ВАК України, 3 патентах України та тезах 3 доповідей. Основні результати роботи оприлюднені на українських та міжнародних наукових конференціях.

Загальна оцінка змісту дисертації, зауваження щодо змісту і оформлення дисертації, завершеності дисертації в цілому. Дисертаційна

робота складається зі вступу, літературного огляду, трьох розділів власних досліджень здобувача, висновків, переліку використаних джерел та додатків, що містять фізико-хімічні та біологічні дані та акти впровадження результатів. Вступ містить всі необхідні складові частини і повністю відповідає чинним вимогам. Дисертант у цьому розділі зосередив увагу на перспективності розвитку синтезу нових типів оптичних домішок на основі бетулону та ізосорбїду як перспективних компонентів рідкокристалічних композицій та обґрунтував його доцільність. В літературному огляді кваліфіковано розглянуто та проаналізовано наявну літературу щодо поставленої мети та переконливо показано, що тема роботи є актуальною. Наступні три розділи є викладенням експериментального доробка автора щодо асиметричної функціоналізації похідних ангідрогекситолу та бетулону та розробки спрямованої методології одержання хіральных сполук з високою ступінню закручування на їх основі та дослідження фізичних і оптичних властивостей. Кожний з експериментальних розділів містить результати синтетичних, фізико-хімічних та фізичних досліджень, експериментальну частину, а також необхідні для цієї роботи квантово-хімічні розрахунки.

Висновки до роботи загалом викладені послідовно, стисло та змістовно, в них кваліфіковано узагальнені одержані результати.

Слід зробити деякі загальні зауваження щодо роботи. Маючи головним завданням отримання нових сполук з необхідними властивостями, автор не вживає давно сталеного терміну «зв'язок будова - властивість» та не використовує наробленого в цьому розділі хімії апарату, хоча масив синтезованих сполук може бути розглянуто як бібліотеку. Жодного разу не пояснені досить помірні виходи проміжних і кінцевих продуктів. Одним з головних параметрів кінцевих продуктів є їх здатність до закручування, але вона відсутня в переліку об'єктів дослідження. Усі сполуки, вперше синтезовані автором дослідження, є оптично активними, тому доцільно було б визначити їх питоме обертання.

Стосовно оформлення рукопису дисертації та автореферату, слід відзначити, не завадило б пронумерувати схеми перетворень для спрощення посилання на них.

Оцінюючи дисертацію в цілому, слід зазначити, що вона виконана на високому теоретичному й експериментальному рівні, отримані результати відрізняються суттєвою новизною, автор професійно володіє синтетичним і теоретичним апаратом органічної хімії. Зміст роботи викладено логічно і послідовно. Особливо слід відзначити велику кількість сполук, які були одержані автором вперше. Використані в роботі інструментальні дослідження виконані на високому сучасному рівні.

Автореферат відповідає змісту дисертації.

Дисертаційна робота Бабака Миколи Леонідовича “Синтез хіральных добавок для рідкокристалічних композицій на основі діангідрогекситолової та лупанової молекулярних платформ”, являє собою закінчену науково-дослідну роботу, відповідає вимогам п. 9, 11 «Порядку присудження наукових ступенів» затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 24 липня 2013 р. № 567, щодо дисертацій на здобуття наукового ступеня кандидата хімічних наук за фахом 02.00.03 - органічна хімія, а її автор заслуговує присудження ступеня кандидата хімічних наук.

Офіційний опонент:

Завідувач лабораторії
конденсованих гетероциклічних сполук
Інституту органічної хімії НАН України,
д.х.н., с.н.с.



Богза С. Л.

