

ОТЗЫВ

об автореферате диссертации Е.Ф. Белоголовой

«Внутримолекулярные комплексы кремния с дативными связями Si←N и Si←O: новые аспекты теории строения», представленной на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.08 – Химия элементоорганических соединений

Ознакомление с авторефератом диссертации Е.Ф. Белоголовой показывает, что работа выполнена на актуальную тему и имеет важное теоретическое значение. Е.Ф. Белоголова провела систематические исследования, направленные на расширение, существенное углубление и в отдельных случаях пересмотр имеющихся в литературе сведений об электронном строении силатранов и других внутрикомплексных соединений пентакоординированного кремния (ВСК). Всесторонние исследования ВСК как своеобразных модельных систем имеет важное значение для элементоорганической химии вообще.

Подход Е.Ф. Белоголовой отличается широким применением расчетных методов современной квантовой химии. Так, например, в отдельных случаях применен метод CCSD(T), который считают золотым стандартом квантовохимических моделей. Как отмечено в автореферате, расчетные данные хорошо согласуются с результатами спектроскопических исследований, что диссертантка рассматривает в пользу достоверности расчетов.

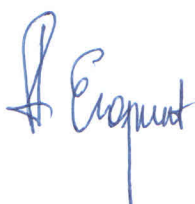
Характеризуя работу в целом, необходимо подчеркнуть ее современный научный уровень. Работа представляет новый этап изучения ВСК. Из материала диссертации Е.Ф. Белоголовой наиболее значимыми представляются результаты общего характера.

1. Квантовохимическое подтверждение спектроскопических и структурных данных, указывающих на сильное влияние среды на свойства ВСК. Разработанные представления позволяют использовать химические сдвиги на ядрах азота для суждения о прочности координационной связи Si←N в силатранах.
2. Получение новых данных, позволяющих, по мнению диссертантки, правильно интерпретировать фотоэлектронные спектры силатранов. Первая полоса в спектрах обусловлена не наличием примесей (как иногда утверждают в литературе), а ионизацией 2p-орбиталей атома азота. Вообще говоря, было бы полезно подтвердить это мнение, например, с помощью корреляционного анализа. Хорошо известно, что потенциалы ионизации зависят от индуктивного, резонансного и поляризационного эффектов заместителей.
3. Установление существенного различия в пространственном строении нейтральных силатранов и их анион-радикалов.
4. Расчет потенциалов электрохимического окисления силатранов и распределения спиновой плотности в анион-радикалах силатранов. Электрохимическое окисление изучено для представительного набора силатранов (18 соединений) с различными

заместителями. Желательно было бы рассмотреть подробнее взаимосвязь между потенциалами окисления и электронными эффектами заместителей.

Считаю, что диссертационная работа представляет интерес для широкого круга специалистов в области элементоорганической химии, по поставленным задачам, уровню их решения и научной новизне полученных результатов полностью соответствует требованиям ВАК РФ, предъявляемым к докторским диссертациям (пп. 9 – 14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г.), а автор работы Е.Ф. Белоголова заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности – 02.00.08 Химия элементоорганических соединений.

Ведущий научный сотрудник
лаборатории физико-химических
исследований,
доктор химических наук, профессор



Егорочкин Алексей Николаевич

ФГБУН Институт металлоорганической
химии им. Г.А. Разуваева РАН;
ул. Тропинина, д. 49,
Нижний Новгород, 603950
Тел. (831)462-77-09
E-mail: office@iomc.ras.ru

10 октября 2018 г.

Личную подпись А.Н. Егорочкина заверяю

Ученый секретарь ИМХ РАН,

к.х.н.



Шальнова Клара Геннадьевна