

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Белоголовой Елены Фёдоровны

«Внутримолекулярные комплексы кремния с дативными связями

$\text{Si}\leftarrow\text{N}$ и $\text{Si}\leftarrow\text{O}$: новые аспекты теории строения»,

представленной на соискание ученой степени доктора химических наук

по специальности 02.00.08 - химия элементоорганических соединений

Соединения кремния (и его соседей по 14 группе) с нестандартным координационным числом, большим или меньшим четырёх, много лет привлекают большое внимание исследователей. В качестве причины этому можно назвать и необычное химическое поведение, и специфические особенности структуры и спектральных свойств. Важным представляется и то, что значительное число представителей этого класса соединений (в особенности внутримолекулярных комплексов кремния, ВКК) нашли применение в медицине, сельском хозяйстве и промышленности. Большой объём экспериментального материала по ВКК, накопленный за несколько десятилетий их исследования, требовал теоретического осмысления. Однако из-за сложности объектов и недостаточно высокого уровня использованных методов расчёта возникали серьёзные трудности при интерпретации важных экспериментальных данных. Более того вопрос о строении ВКК с нечётным числом электронов оставался, по существу, открытым. Поэтому диссертационная работа Е.Ф. Белоголовой, направленная на разрешение многолетних противоречий в интерпретации спектральных свойств и структурных закономерностей внутримолекулярных комплексов кремния и на развитие теории их строения (в том числе ион-радикалов), несомненно, является актуальной.

Среди наиболее существенных результатов, полученных автором, следует особенно выделить следующие, вносящие важный вклад в развитие химии внутримолекулярных комплексов кремния с открытой оболочкой. В работе получены первые сведения о структуре и распределении спиновой плотности в валентно- и дипольно-связанных анион-радикалах силатранов. Было продемонстрировано, что при переходе силатранов в радикальное состояние дативная связь $\text{Si}\leftarrow\text{N}$ для валентно-связанных анион-радикалов удлиняется (в большей или меньшей степени), а для дипольно-связанных анионов сокращается. «Изомерия растяжения» дативной связи $\text{Si}\leftarrow\text{N}$, установленная Е.Ф. Белоголовой для катион-радикалов силатранов, в сочетании с предложенной ею вертикальной моделью адиабатической ионизации позволили

уверенно предсказывать место локализации спиновой плотности при окислении исходных силатранов.

В качестве замечания автору следует отметить, что в работе, где большое внимание уделяется нейтральным силатранам и их катион-радикалам, ни слова не говорится о катионах силатранов. Вместе с тем, эти соединения являются вероятными и очень важными интермедиатами в реакциях силатранов, обладающих специфической биологической активностью.

Отмеченное замечание ни в коей мере не умаляет достоинств выполненной работы, которая по своему высокому научному уровню, новизне и оригинальности полученных результатов удовлетворяет требованиям к докторским диссертациям, а ее автор, Белоголова Елена Фёдоровна, заслуживает присуждения ей ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.08 - химия элементоорганических соединений.

Главный научный сотрудник лаборатории
кремнийорганических соединений и материалов,
доктор химических наук, профессор

Кочина Татьяна Александровна

ФГБУН Ордена Трудового Красного Знамени
Институт химии силикатов им. И.В.Гребенщикова РАН
наб. Адм. Макарова, 2, Санкт-Петербург, 199034
тел. (812) 328-48-02
e-mail: t-kochina@mail.ru

08.10.2018

Подпись Кочинай Т.А.
удостоверяю



О.В. Круглова