



## ОТЗЫВ

*на автореферат диссертации Белоголовой Елены Фёдоровны “Внутримолекулярные комплексы кремния с дативными связями  $Si \leftarrow N$  и  $Si \leftarrow O$ : новые аспекты теории строения”, представленной на соискание учёной степени доктора химических наук по специальности 02.00.08 - химия элементоорганических соединений.*

Представленная соискателем диссертационная работа выполнена в рамках очень актуальной сейчас темы внутримолекулярных донорно-акцепторных комплексов кремния. Соединения такого рода вызывают постоянный и глубокий интерес кремнийоргаников на протяжении вот уже нескольких десятилетий. Такой устойчивый интерес вызван как необычной структурой внутримолекулярных комплексов кремния, которые служат модельными соединениями для детального изучения природы химических взаимодействий, так и их необычным стереодинамическим поведением и высокой реакционной способностью. С практической же точки зрения, внутримолекулярные комплексы кремния, так же как и их ион-радикальные производные, весьма перспективны для использования в катализе, в качестве спиновых переключателей, а также как уникальные биологически активные вещества.

В представленной работе автором проведено масштабное комплексное исследование в области внутримолекулярных комплексов кремния, охватывающее очень широкий спектр задач: от систематического изучения природы дативных связей кремний-азот/кислород и их взаимосвязи с ЯМР и электрохимическими параметрами и до исследования анион-радикалов и парамагнитных комплексов силатранов. В результате проведённых исследований автор достиг многих очень впечатляющих результатов. Так, например, была выявлена высокая чувствительность структурных параметров дативной связи к влиянию среды,



проведено надежное отнесение первой полосы в фотоэлектронных спектрах ряда силатранов, изучено строение и распределение спиновой плотности в анион-радикалах силатранов, определены условия существования внутримолекулярных хелатных комплексов N,N'-бис(силлилметил)пропиленмочевин. В особенности впечатляет часть работы, посвящённая согласованию корреляций между данными структурного анализа и спектроскопии ЯМР  $^{15}\text{N}$ , что позволяет с хорошей точностью делать оценки прочности координационной связи  $\text{Si} \leftarrow \text{N}$  на основании данных легко измеряемых химсдвигов атомов азота силатранов.

Все вышеперечисленные достижения автора в очень существенной степени дополняют и обогащают современные представления об электронном и пространственном строении внутримолекулярных комплексов кремния, внося таким образом неоценимый вклад в современную теорию строения и химической связи.

Представленная работа выполнена на очень высоком теоретическом уровне с использованием самых современных расчетных методов исследования, включая MP2, CCSD, CCSD(T), DFT с использованием широкого ряда функционалов. Все сделанные автором выводы и заключения достоверны, научно обоснованы и хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Результаты исследований опубликованы в ведущих высокорейтинговых журналах, включая такие топовые издания, как *J. Am. Chem. Soc.*, *Organometallics*, *J. Phys. Chem.*, *Chem. Eur. J.*, *Dalton Trans.* Сам автореферат написан очень четко и ясно, в хорошем легко читаемом стиле, не содержит ошибок.

В качестве единственного пожелания автору, можно было бы более подробно обсудить причины большей термодинамической стабильности хелатных форм теоретически моделированного силена в заключительной части раздела обсуждения. Вероятнее всего, стабилизация хелатных форм силена вызвана уменьшением степени двоевязанности при атома кремния, поскольку наличие двойной связи  $\text{Si}=\text{C}$  является основным дестабилизирующим фактором. А вообще сам по себе этот силен представляет несомненный структурный интерес, так же



как и его моно- и бис-хелатные конформеры. Это пожелание ни в коей мере не умаляет несомненных достоинств и высокой значимости выполненной работы, которая безусловно является законченным масштабным исследованием очень высокого научного уровня, а публикации отражают основные научные результаты, изложенные в автореферате.

Таким образом, у меня нет никаких сомнений в том, что данная диссертационная работа по своей актуальности, научной новизне, уровню решения поставленных задач и практической значимости полученных результатов полностью удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор, Белоголова Елена Фёдоровна, безусловно заслуживает присвоения ей искомой степени доктора химических наук по специальности 02.00.08 - химия элементарорганических соединений.

Доцент химического факультета  
университета города Цукуба (Япония),  
Ли Владимир Ярославович

Handwritten signature of Vladimir Lyeev in black ink.

Химический факультет, университет г. Цукуба,  
1-1-1 Теннодай, Цукуба 305-8571,  
префектура Ибараки, Япония  
Телефон: 81 29-853-4482  
Факс: 81 29-853-6503  
E-mail: [leevya@chem.tsukuba.ac.jp](mailto:leevya@chem.tsukuba.ac.jp)

4 октября 2018 года