

О Т З Ы В  
на автореферат диссертационной работы  
БЕЛОГОЛОВОЙ Елены Фёдоровны

на тему «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

Нейтральные атомы кремния (как четырех-, так и двух-валентные) обладают при определенных условиях способностью к дополнительным донорно-акцепторным взаимодействиям, что расширяет возможности исследования свойств комплексообразования. При изучении гипервалентных соединений кремния основные экспериментальные результаты были получены еще в прошлом веке, что привело к впечатляющим успехам физической органической химии для координационных взаимодействий. При этом уникальные детали электронного и молекулярного строения силатранов, в частности, влияние агрегатного состояния вещества до сих пор оживленно обсуждаются, но некоторые результаты физико-химических исследований ещё хранят определенные противоречия, которые оставались необъяснимыми более 30 лет. Например, суперэлектроннодонорный эффект силатранитной группировки получил объяснение только совсем недавно [Изв. АН, Сер. Хим., 2017, №12, 2269-75] после обнаружения А.Н. Егорочкиным в 2006 году нового электронного эффекта в силатранах – поляризационного.

В диссертации Е.Ф. Белоголовой использованы новые современные расчетные методы на более высоком уровне теории, что позволило точнее согласовать результаты расчетов с имеющимися экспериментальными данными (ЯМР, ИК, ЭПР, РСА, ФЭС). Это помогло автору установить, например, более мелкие детали дативной связи  $\text{Si} \leftarrow \text{N}$ , в частности, для силатранов впервые теоретически подтверждено наличие небольшого вклада ковалентной составляющей. Кроме того, удалось впервые объяснить противоречия в отнесении первой полосы в фотоэлектронных спектрах. На мой взгляд, в работе следует особо отметить теоретический анализ возможности существования внутримолекулярных координационных взаимодействий, содержащих несколько донорных и/или акцепторных центров, для которых экспериментальные данные крайне ограничены.

В этой связи следует признать важность выбора объектов и актуальность темы диссертационной работы Е.Ф. Белоголовой, в которой проведены расчеты представительного ряда координационных соединений кремния, которые согласуются с результатами современных физико-химических исследований. Изложенные в

автореферате выводы последовательны и логичны. Из общего материала «выпадает» только заключительная небольшая часть, касающаяся хелатных комплексов силенов ( $\text{Si}^{\text{II}}$ ), поскольку в них природа координационных связей в корне отличается от таковых в силанах ( $\text{Si}^{\text{IV}}$ ). Кроме того, в настоящее время известно уже достаточно много хелатных комплексов кремния для кратной связи как  $\text{C}=\text{Si}$ , так и  $\text{Si}=\text{Si}$ , поэтому «теоретическое конструирование» таких комплексов задержалось примерно на 10-15 лет.

Указанные выше замечания несколько не влияют на общее впечатление о диссертационной работе, которую отличает высокий уровень обсуждения экспериментальных результатов. Она является законченным и современным исследованием и вносит ценный вклад в изучение строения элементов подгруппы кремния. Достоверность представленных результатов не вызывает сомнений.

Основные результаты и научные положения автореферата достаточно полно отражены в оригинальных публикациях автора в ведущих отечественных и зарубежных журналах, и свидетельствуют, что автор диссертационной работы Белоголова Елена Фёдоровна является высококвалифицированным специалистом в избранной области и заслуживает присуждения искомой степени доктора химических наук.

Ведущий научный сотрудник ИОХ им. Н.Д. Зелинского РАН,

доктор химических наук

С. Н. Тандура

Ленинский проспект, д. 47, Москва, 119991

(499)137-13-79

tandura@yandex.ru

Федеральное государственное бюджетное  
учреждение науки Институт органической  
химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук  
(ИОХ РАН)

Подпись С. Н. Тандуры заверяю:

Ученый секретарь ИОХ РАН им. Н.Д. Зелинского РАН,

кандидат химических наук



И. К. Коршевец