

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Белооголовой 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

Актуальность работы Е.Ф. Белооголовой, в которой с привлечением современных теоретических методов и подходов разрешены накопившиеся за последние полвека вопросы по интерпретации экспериментальных (РСА, ГЭ, ЯМР, ЭПР, ФЭС и др.) данных соединений пентакоординированного кремния, а также получила развитие теория строения гипервалентных структур элементов 14 группы с открытой оболочкой, не вызывает сомнений.

В работе получен ряд важных результатов. В их числе, например: геометрическое обоснование гиперчувствительности ИК и ЯМР характеристик внутримолекулярных комплексов кремния с координационным узлом XSiC_3O к внешним факторам; разработка вертикальной модели адиабатической ионизации для надёжного прогнозирования мест удаления электрона из молекул силатранов; теоретическое предсказание и экспериментальное получение первых дипольно-связанные анион-радикалов внутримолекулярных комплексов кремния (на примере молекул гидро- и фторсилатрана), примечательных беспрецедентным влиянием добавочного электрона на геометрию материнской молекулы, которая не укладывается в рамки существующей теории строения дипольно-связанных анионов. С большим интересом читается раздел автореферата посвящённый Si,Si' -замещённым N,N -бис(силлилметил)пропиленмочевинам, стабилизация которых обеспечивается ранее неизвестной многоцентровой 5с-6е связью $\text{XSi}\leftarrow\text{O}\rightarrow\text{SiX}$. С применением неэмпирической теории электронного пропагатора и модельного колебательного Гамильтониана автору удалось отнести проблемные фотоэлектронные спектры 1-замещённых силатранов и установить природу дативной связи $\text{Si}\leftarrow\text{N}$ в этих молекулах.

Умелое сочетание различных квантовохимических методов (*ab initio* и DFT) и квантовотопологических подходов (AIM и ELF) позволило Белооголовой Е.Ф. успешно решить поставленные задачи. Полученные ей результаты вносят существенный вклад в теорию строения соединений гиперкоординированных элементов 14 группы.

В качестве замечания к автореферату, следовало бы объяснить, почему моделирование фотоэлектронных спектров нейтральных силатранов $\text{XSi}(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_3\text{N}$ [$\text{X} = \text{H}$, **7a**, Me, **7б**, F, **7в**, OEt, **7г**] проводилось с привлечением модели линейного вибронного

связывания, а в случае дипольно-связанных анион-радикалов $7a^-$ и $7b^-$ – в рамках метода Франка-Кондона?

Сделанное замечание не влияет на высокую оценку актуальности исследования, его новизны, достоверности и значимости полученных результатов. На основании вышесказанного считаю, что диссертационная работа Белоголовой Е.Ф. полностью отвечает требованиям, предъявляемым ВАК РФ к докторским диссертациям, и соответствует всем требованиям п. 9-14 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», а соискатель, Белоголова Елена Фёдоровна, заслуживает присуждения ей ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.08 - химия элементоорганических соединений.

Главный научный сотрудник

профессор, доктор химических наук

(02.00.04 – физическая химия)



Багатурьянц Александр Александрович

Федеральное государственное учреждение

"Федеральный научно-исследовательский центр

"Кристаллография и фотоника" Российской академии наук"

Центр Фотохимии

Адрес: 119421, г. Москва, ул. Новаторов д. 7а, корп.1.

Тел.: +74959362588

E-mail: sasha@photonics.ru, bagaturyants@gmail.com

08.10.2018 г.

Согласно заверено РИУ



*Заместитель
начальника
отдела кадров
А.Н. Гильова*