

Отзыв

на автореферат диссертации Стерховой Ирины Владимировны «Невалентные взаимодействия во фтор- и кремнийсодержащих амидах карбоновых и сульфоновых кислот, в (O-Si) хелатах N-(силилметил)карбоксамидов и силатранах», представленной диссертационному совету Д 003.052.01 на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.3 – органическая химия

Структурные представления являются основой современной химической науки и принципиально важны для развития стереохимии, что делает диссертационную работу Стерховой И.В, направленную на установление геометрического и электронного строения ряда фтор- и кремнийсодержащих амидов карбоновых и сульфоновых кислот, а так же соединений пентакоординированного кремния, с акцентом на детальное изучение невалентных взаимодействий (водородные и координационные связи) в разных фазовых состояниях, несомненно актуальной.

Научная новизна результатов работы также несомненна. Так, например, в ней детально исследовано влияние внутри- и межмолекулярных водородных связей на характер надмолекулярных структур, образующихся в разных фазовых состояниях в кремний- и фторсодержащих амидах и сульфонамидах. Показано, что природа водородных связей в ассоциатах этих соединений в основном определяется электростатическим взаимодействием, в то время как координационная связь в изученных N-силилметиламидах и силатранах характеризуется заметной ковалентной составляющей. Безусловно, новизну результатам работы придает тот факт, что рентгеноструктурные исследования ряда производных трифторметансульфонамида и трифторацетамида, а также кремнийсодержащих амидов было выполнены впервые.

Практическая значимость результатов работы связана в первую очередь с природой исследованных соединений. Практически все они могут быть квалифицированы как способные проявлять биологическую активность и могут составить интерес для фармакологии. Результаты рентгеноструктурных исследований способны пополнить существующие базы

кристаллографических данных. Совокупность полученных структурных, спектроскопических и энергетических данных, безусловно, расширяет возможности стереохимических построений при установлении корреляции «структура - свойство» для органических и кремнийорганических соединений.

Достоверность результатов, полученных Стерховой И.В., определяется тем, что при выполнении работы ею был применен подход, основанный на использовании взаимодополняющих и проверенных на решении подобных задач экспериментальных (РСА, ИКС) и теоретических (DFT, QTAIM) методов исследования, допускающих частичную взаимопроверку получаемых данных.

Диссертационная работа Стерховой И.В. является большим по объему и наполненным по содержанию исследованием, выполненном на высоком экспериментальном и теоретическом уровне и принесшем целый ряд результатов, важных для развития соответствующих разделов стереохимии. Естественно, что ограниченный объем автореферата не позволяет отразить все детали проведенных исследований, в связи с чем возникают отдельные вопросы. Например:

1. При квантово-химическом описании структуры и энергетики ассоциатов, в том числе и образованных за счет водородной связи, представляется важным изучить вопрос о целесообразности учета дальнего действия и дисперсионного взаимодействия. Проводились ли автором работы такие исследования, какие функционалы и поправки применялись?
2. В автореферате на стр. 5 утверждается, что «экспериментальные данные (РСА, ИК) прекрасно согласуются с результатами квантовохимических расчетов». Что понимается под словом «прекрасно»? Полного совпадения между расстояниями, полученными с помощью РСА, и расстояниями, рассчитанными квантово-химически, быть не может, поскольку они имеют разный физический смысл: в РСА — это (несколько упрощая) расстояние между центрами тяжести электронной плотности атомов в молекуле, в расчетах — это межъядерные расстояния.

Завершая краткий анализ представленного в автореферате и публикациях материала можно сделать заключение, что рассматриваемая диссертация «Невалентные взаимодействия во фтор- и кремнийсодержащих амидах карбоновых и сульфоновых кислот, в (O-Si) хелатах N-(силилметил)карбоксамидов и силатранах» может быть квалифицирована как завершенная научно-квалификационная работа, которая соответствует критериям, установленным п.п. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней» (утверждено постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842) в действующей редакции и предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук по специальности 1.4.3 – органическая химия, а ее автор, Стерхова Ирина Владимировна, безусловно заслуживает присуждения искомой ученой степени.

Гиричев Георгий Васильевич

Ученая степень: доктор химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия

Ученое звание: профессор

Должность: заведующий кафедрой физики

Место работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Ивановский государственный химико-технологический университет», кафедра физики

Почтовый адрес: 153000 Иваново, Шереметевский просп., 7, ИГХТУ

Тел.: +7(4932) 359874

e-mail: girichev@isuct.ru

Я, Гиричев Георгий Васильевич, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Гиричев Г.В.



Дата составления отзыва: 7 сентября 2022 г.

Подпись 
Ученый секретарь ИГХТУ

