

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 на соискание ученой степени доктора химических наук
по специальности 1.4.3 – органическая химия (химические науки)

В настоящее время большое внимание уделяется роли нековалентных взаимодействий, подробным изучением которых занимается супрамолекулярная химия. Среди таких взаимодействий, во многом определяющих свойства соединений, прежде всего, можно выделить водородную связь (ВС). Данные по водородному связыванию в фторированных и кремнийсодержащих амидах и сульфонидах, обладающих потенциально полезными фармакологическими свойствами, весьма ограничены. Поэтому исследование конформационного строения, кислотно-основных свойств, надмолекулярной структуры, процессов самоассоциации в кристаллах и растворах является важной и актуальной научной задачей.

На основе биологически активных соединений пентакоординированного кремния, таких как силатраны и (O-Si) хелатные N-силилметиламиды, получены технически ценные полимеры и материалы для нелинейной оптики. Несмотря на повышенный интерес исследователей к синтезу и биологической активности этих соединений, взаимосвязь между геометрическими и энергетическими характеристиками для них практически не изучена. В частности, это касается соединений с координационными связями Si←N и Si←O.

Цель диссертационной работы И.В. Стерховой состояла в развитии и применении системного экспериментально-теоретического подхода к изучению водородных и координационных связей на примере ряда объектов. Установлены закономерности «структура-свойство» для более чем 60 новых соединений. Определены структуры ряда производных трифторметансульфонамида и трифторацетамида, кремнийсодержащих амидов, оценены энергии ВС в различных условиях. Установлены структурные особенности ряда новых силатранов, а также амидов с координационной связью Si←O. На примере изучаемых соединений показана перспективность комплексного использования экспериментальных и теоретических данных для изучения водородных и координационных связей. Достоверность результатов работы подтверждена использованием современных экспериментальных (РСА, ИК-спектроскопия) и теоретических (расчеты DFT, AIM)

