



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

Основная часть диссертации И.В.Стерховой посвящена исследованию структуры большой серии производных трифторметансульфонамида (трифламида) $\text{CF}_3\text{SO}_2\text{NH}_2$ и трифторметилацетамида CF_3CONH_2 . Вторая часть (по объему, но не по важности) описывает результаты исследования координационных соединений кремния, содержащих координационные связи $\text{Si} \leftarrow \text{O}$ и $\text{Si} \leftarrow \text{N}$. Актуальность работы и ее практическая значимость заключаются в том, что многие соединения на основе этих амидов находят широкое и разнообразное применение как в промышленности, так и в медицине.

Трифламид, трифторацетамид и их производные нельзя отнести к малоизученным соединениям – список посвященных им публикаций по данным SciFinder насчитывает несколько тысяч наименований. Соединения гипервалентного кремния с внутримолекулярной координационной связью кремний – гетероатом только в Иркутском институте химии исследуются более полувека. Тем не менее, научная новизна работы И.В.Стерховой не вызывает сомнения. Впервые проведено комплексное исследование методами рентгеноструктурного анализа, ИК-спектро-скопии и квантово-химических расчетов широкого круга соединений, большая часть из которых не описаны ранее. Предметом исследования являются внутри- и межмолекулярные невалентные взаимодействия, к которым относятся водородные и координационные связи разнообразного типа, в кристаллах, растворе и газовой фазе. Установлено наличие разнообразных ассоциатов - линейных, циклических и мультициклических.

Исследованы структурные особенности новых соединений гипервалентного кремния (силилированных карбоксамидов и силатранов). Впервые для их изучения использован топологический метод AIM. Изложение материала во всех главах диссертации построено на принципе перехода от простого к сложному. Практически для каждого из изученных (амидов) приведены параметры PCA, частоты валентных колебаний NH в ИК-спектрах растворов и твердых состояний (таблетки KBr) и энергетические параметры невалентных взаимодействий, полученные методом AIM и обсуждена зависимость этих параметров от природы заместителей.

Оценка энергий водородных и координационных связей в рамках метода AIM проводилась с использованием трех различных уравнений. Было бы

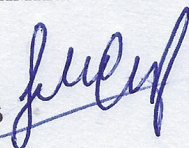
уместно сопроводить эти оценки сравнительным анализом.

В целом диссертация, судя по автореферату, производит впечатление зрелой и завершенной работы. По объему, научной и практической значимости работа И.В.Стерховой соответствует требованиям ВАК РФ, предъявляемым к докторским диссертациям (п. 9-14 "Положения о порядке присуждения ученых степеней", утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842), а ее автор – Стерхова Ирина Владимировна – заслуживает присуждения ей ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.3 – органическая химия.

Д.х.н.

11.09.22

...GURION UNIVERSITY
...FACULTY OF NATURAL SCIENCES
...DEPARTMENT OF CHEMISTRY



Сигалов М. В.