

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Исмагиловой Резеды Рафисовны “Конформации и механизмы реакций соединений четырехкоординированного фосфора со связями P=X (X = O, S, Se) и гипервалентных кремния и германия с нуклеофильными реагентами”, представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – Физическая химия.

Квантово-химические расчеты являются важным универсальным инструментом для определения структурных параметров молекул, их физико-химических свойств и для поиска предпочтительных направлений реакций. В применении к элементоорганическим соединениям использование расчетных методов имеет особый интерес, поскольку зачастую такие соединения являются лабильными, не образуются в кристаллическом виде, в растворах существуют в виде смеси относительно устойчивых конформеров, что затрудняет их анализ экспериментальными физико-химическими методами. В диссертационной работе Исмагиловой Р.Р. в качестве объектов исследования выбраны ранее не изученные представители фосфор (V) органических соединений, а также Si- и Ge-атранов и их ди- и моноциклических аналогов, для которых с привлечением квантово-химических методов была определена полярность, проведен конформационный анализ и изучены механизмы некоторых реакций. Полученные расчетные и экспериментальные данные вносят ценный вклад в представление о строении и реакционной способности изученных классов соединений. Таким образом, актуальность выбранного научного направления не вызывает сомнений.

В ходе выполнения работы автором был получен ряд новых результатов, имеющих научно-практическую значимость. В частности, расчетными и экспериментальными методами были определены дипольные моменты, выявлены предпочтительные конформации в растворах для соединений фосфора (V) различной структуры, таких как, фосфорил\тиофосфорилсодержащих енаминкетонов, фосфорил\тиофосфорил-модифицированных N-арилкарбомоилметилфосфиноксидов и сульфидов, замещенных селенофосфиновой и диселенофосфиновой кислот. Важным результатом работы является получение новой информации о механизмах реакций присоединения вторичных фосфинхалькогенидов к винилселенидам, а также реакций гидролиза\алкоголиза силатранов и герматранов и их аналогов.

Достоверность полученных результатов обеспечена применением комплекса современных расчетных и экспериментальных методов, согласованностью с литературными данными. Выводы обоснованы, отражают суть проделанной работы. По

результатам работы опубликовано 9 статей в ведущих российских и международных журналах. Тем не менее, по тексту автореферата имеются небольшие замечания и вопросы: 1) в автореферате было бы полезно провести сопоставление расчетных и экспериментальных данных по механизмам изученных реакций; 2) спектры ИК на рис. 1 малоинформативны: следовало бы сделать отнесения для характеристических полос изомеров; 3) можно также отметить небольшое количество стилистических погрешностей (например, «реакций взаимодействия», «был рассчитан димер **8**»).

Указанные замечания не снижают общего положительного впечатления, производимого данной работой, которая представляет собой тщательно спланированное целенаправленное исследование, выполненное на высоком теоретическом и экспериментальном уровне.

Диссертационная работа Исмагиловой Резеды Рафисовны по поставленным задачам, уровню их решения, актуальности, научной новизне и практической значимости, безусловно, соответствует критериям п.п.9-11,13,14 Постановления Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения ученых степеней» в действующей редакции, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук, а ее автор, Исмагилова Резеда Рафисовна, заслуживает присуждения ей искомой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4.- «Физическая химия».

доктор химических наук
по специальности 1.4.3. (02.00.03) – Органическая химия,
профессор кафедры медицинской химии и тонкого органического синтеза
Химического факультета МГУ

Аверина Е. Б.

11 февраля 2022 г.

Почтовый адрес: 119991 Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3

Телефон: +74959391234;

Контактные данные: elaver@med.chem.msu.ru; +74959393969

Наименование организации:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова», Химический факультет

