

## ОТЗЫВ

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

Невалентные взаимодействия представляют собой очень важный вид межмолекулярного связывания, влияющий на физико-химические свойства и реакционную способность органических соединений. В работе И.В. Стерховой применен комплексный экспериментально-теоретический подход к изучению водородных связей во фтор- и кремний содержащих амидах карбоновых и сульфоновых кислот и координационных связей в силатранах и силанах. Актуальность и важность поставленных задач хорошо обоснованы автором и не вызывают сомнений. Хорошо известно, что наличие амидного (сульфонамидного) фрагмента в молекуле субстрата обуславливает его фармакофорные свойства. Рассмотренные в работе фтор- и кремнийсодержащие амиды карбоновых и сульфоновых кислот являются новыми и пока очень мало изученными с точки зрения формирования их надмолекулярной структуры. Для интенсивно развивающейся в последние годы супрамолекулярной химии полученные автором теоретические и экспериментальные данные о специфическом взаимодействии молекул представляют особый интерес. В этом смысле работа Стерховой И.В. – яркий пример систематических исследований влияния гомо- и гетероассоциации на строение и свойства соединений, проявляющих высокую степень биологической активности. Для лучшего понимания природы водородных связей в работе изучены такие характеристики соединений, как сродство к протону, потенциал ионизации, кислотность, применяются исследование конформационного строения, кислотно-основных свойств, надмолекулярной структуры, процессов самоассоциации в кристалле, растворе, и газовой фазе. Очень грамотно и профессионально проведено соотнесение экспериментальных данных с результатами квантовохимических расчетов. Впервые осуществлено систематическое рентгеноструктурное исследование широкого ряда производных трифторметансульфонамида и трифторацетамида, а также силилированных амидов. Силилированные производные амидов представляют особый интерес из-за влияния гетероатома кремния на кислотно-основные свойства соединения, и как следствие, на NH-кислотность и способность к образованию водородных связей. В работе детально показано, что наличие атома кремния при азотном атоме в молекулах изученных амидов повышает их спектроскопическую NH-кислотность, в то время как наличие атома кремния

в геминальном фрагменте Si-C-N практически не влияет на спектроскопическую NH-кислотность соединений.

И.В. Стерховой показано, что к изучению координационных связей также может быть применен комплексный подход, подразумевающий AIM анализ данных рентгеновской дифракции в рамках квантовой теории Байдера «Атомы в молекулах». Для оценки энергии дативного взаимодействия по данным AIM анализа в кремнийсодержащих (O-Si) хелатах и силатранах приведены несколько формул – классическая формула Эспинозы, модифицированная формула Эспинозы, а также формула Афонина. Для (O-Si)-хелатов N-(силлилметил)карбоксамидов и силатранов получены экспоненциальная и полиномиальная зависимости энергии дативной связи от её длины. В случае амидов взаимосвязи между энергией водородной связи и её длиной не наблюдалось, что вероятно связано с изучением процессов самоассоциации, при котором одна и та же молекула выступает и донором, и акцептором водородной связи.

Также стоит отметить показанное в работе существенное влияние трифлильного фрагмента в амидинах и норборненах на геометрию молекул. Методом РСА было показано, что в изученных фторированных амидинах и норборненах формально двойная связь C=N длиннее, чем обычная связь C-N в результате сопряжения в триаде NH-C=NTf, обусловленного очень сильным электроноакцепторным эффектом трифлильной группы. Эти данные, безусловно, являются очень интересными и могут быть предметом дальнейшего изучения.

Несомненно, сильной стороной работы является анализ природы невалентных взаимодействий методом AIM анализа – показано, что природа водородных и координационных связей действительно разная. Так, в соответствии с литературными критериями природа водородных связей в самоассоциатах изученных фтор- и кремнийсодержащих амидов и сульфонамидов носит характер электростатического взаимодействия и относится к типу «закрытых оболочек», в то время как координационное взаимодействие Si←O и Si←N в (O-Si) хелатных N-силлилметиламидах и силатранах, помимо электростатического, имеет характер частичного ковалентного связывания и относится к «промежуточному» типу.

По теме диссертации опубликовано 37 статей, из них 19 в зарубежных научных журналах, и тезисы 12 докладов. Полученные данные представлялись на российских и международных конференциях высокого уровня. Считаю, что диссертационная работа полностью удовлетворяет положениям диссертационного совета Д 003.052.01 на базе Иркутского института химии им. А.Е. Фаворского СО РАН и требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемых к докторским



диссертациям, а Стерхова И.В. заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.3 – органическая химия.

Хуцишвили Спартак Спиридонович  
кандидат химических наук  
по специальности 02.00.03 – органическая химия,  
старший научный сотрудник лаборатории физикохимического анализа  
Института неорганической химии и электрохимии им. Р. Агладзе,  
Тбилисского Государственного Университета им. И. Джавахишвили  
почтовый адрес организации: пр. И. Чавчавадзе, 1, 0179, Тбилиси, Грузия  
телефон: +995-322-25-04-84  
E-mail организации: [academicaffairs@tsu.ge](mailto:academicaffairs@tsu.ge)  
сайт организации: <https://www.tsu.ge/en>

Я, Хуцишвили Спартак Спиридонович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Хуцишвили С.С.   
E-mail: [khutsishvili.spartak@gmail.com](mailto:khutsishvili.spartak@gmail.com)

Дата составления отзыва: 29 августа 2022 г.



