

## ОТЗЫВ

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

Работа И.В. Стерховой посвящена изучению невалентных взаимодействий, а именно – внутри- и межмолекулярных водородных связей в амидных структурах и внутримолекулярных координационных связей в соединениях пентакоординированного кремния. Такого рода взаимодействия влияют на физико-химические свойства и реакционную способность органических соединений, зачастую обуславливают высокую биологическую активность. В работе 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.

В своей работе автору удалось показать влияние атомов фтора и кремния в молекуле амида (сульфонамида) на его свойства: спектроскопическую кислотность, сродство к протону, прочность водородных связей. Продемонстрировано также, что на формирование надмолекулярных структур существенное влияние оказывает среда. Например, в кристалле практически все амиды формируют цепочки, образованные за счет водородных связей, в то время как в инертных растворителях амиды существуют, как правило, в виде циклических димеров. Для интерпретации данных ИК спектроскопии были применены квантовохимические расчеты мономерных молекул и их самоассоциатов в газовой фазе. Анализ кристаллических структур амидинов показал существенное влияние трифтометансульфонильного фрагмента на геометрию молекул. Впервые для довольно широкого ряда таких соединений автором продемонстрирован необычный структурный эффект: в триаде  $\text{NH}-\text{C}=\text{N}^{\text{f}}$  формально двойная связь  $\text{C}=\text{N}$  длиннее, чем обычная связь  $\text{C}-\text{N}$ , что, предположительно, обусловлено очень сильным электроноакцепторным эффектом трифлильной группы.

Данные кристаллографии проанализированы с помощью комплекса программ в рамках квантовой теории Бейдера «Атомы в молекулах» (AIM-анализ). С помощью AIM анализа показано, что природа водородных и координационных связей в изученных структурах разная. Природа водородных связей в самоассоциатах фтор- и кремнийсодержащих амидов и сульфонамидов носит характер электростатического

взаимодействия и относится к типу «закрытых оболочек», в то время как координационное взаимодействие  $\text{Si} \leftarrow \text{O}$  в (O-Si) хелатных N-силлилметиламидах и  $\text{Si} \leftarrow \text{N}$  в силатранах, помимо электростатического, имеет характер частичного ковалентного связывания и относится к «промежуточному» типу. Получены уравнения для оценки энергий координационных связей  $\text{Si} \leftarrow \text{O}$  и  $\text{Si} \leftarrow \text{N}$  по их длине.

Актуальность и важность решаемых задач не вызывают сомнений. Полученные Стерховой И.В. теоретические и экспериментальные данные о специфическом взаимодействии молекул, их энергетических и геометрических характеристиках вносят существенный вклад в интенсивно развивающуюся супрамолекулярную химию.

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. 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.

Трушков Игорь Викторович

доктор химических наук по специальности 02.00.03 – органическая химия  
заведующий лабораторией направленной функционализации органических молекулярных систем, организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук  
почтовый адрес организации: г. Москва, Ленинский проспект, 47  
телефон: +7 499 137-29-44, факс: +7 499 135-53-28  
e-mail организации: [secretary@ioc.ac.ru](mailto:secretary@ioc.ac.ru); сайт организации: <https://zioc.ru/>

Трушков И.В.

e-mail: [trush@ioc.ac.ru](mailto:trush@ioc.ac.ru)

30 августа 2022 г.

Подпись Трушкова И.В. заверяю

Ученый секретарь ИОХ им. Н.Д.Зелинского РАН



к.х.н. И.К. Коршевец