

## ОТЗЫВ

члена диссертационного совета на диссертацию Алияровой Ирины Сергеевны на тему: «НУКЛЕОФИЛЬНОСТЬ ЗОЛОТА ПРИ ОБРАЗОВАНИИ ГАЛОГЕННЫХ СВЯЗЕЙ», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.1. неорганическая химия

Изучение слабых нековалентных взаимодействий между галоген-содержащими соединениями, выступающими в качестве акцепторов электронов и различными нуклеофилами, – это интенсивно развивающееся в последнее время направление неорганической химии. Понимание природы этих взаимодействий важно, как с фундаментальной, так и с прикладной точки зрения. В фундаментальном аспекте, работы в этой области позволяют по новому взглянуть на природу химической связи, а в прикладном аспекте, результаты этих работ будут полезны при разработке новых лекарств, стабилизации взрывчатых веществ и создании новых катализаторов. Диссертационная работа Алияровой Ирины Сергеевны находится в русле этого направления и поэтому ее актуальность не вызывает сомнений.

Диссертация изложена на 102 страницах и включает 5 глав. Работа посвящена изучению возможности образования галогеновых связей в соединениях диарилидодония с комплексами золота в степенях окисления +1 и +3. Основной целью работы Ирины Сергеевны было проведение систематических исследований образования галогеновых связей в комплексах золота с целью выявления d-нуклеофильности золота(I) и (III). Для установления факта образования галогеновых связей автор использовал результаты рентгеноструктурного анализа монокристаллов изучаемых комплексов. Исследование межатомных контактов в кристаллической структуре комплексов золота(III) позволило установить наличие бифуркатных трёхцентровых  $C-I \cdots (Cl-Au-Cl)$  и двухцентровых  $C-I \cdots Cl-Au$  взаимодействий, которые можно классифицировать как галогеновые связи. В кристаллических структурах сольватов комплексов золота(I) были также идентифицированы двухцентровые  $X \cdots AuI$  ( $X = Br, Cl$ ) и бифуркатные трёхцентровые  $C-Br \cdots (Cl-Au)$  контакты, относящиеся к галогеновым связям. Квантово-химический анализ выявленных слабых нековалентных взаимодействий показал, что атомы золота, несмотря на свой формальный положительный заряд, проявляют себя в данных структурах в качестве нуклеофильных центров благодаря значительной плотности d-электронов. На первый взгляд, полученный результат выглядит весьма необычно, поскольку в качестве нуклеофилов мы привыкли видеть отрицательно заряженные центры. Вместе с тем данный вывод хорошо обоснован как надёжными экспериментальными данными, так и качественными расчетами, и его достоверность не вызывает сомнений. Поэтому можно

утверждать, что нуклеофильность атомов золота в степенях окисления +1 и +3 это новый и весьма интересный научный факт, впервые установленный автором работы.

**Практическая ценность** работы состоит в том, что полученные знания могут быть использованы при разработке и создании новых материалов, имеющих важное значение в народном хозяйстве (лекарств, полимерных соединений, взрывчатых веществ, катализаторов).

Автор работы лично участвовал во всех исследованиях, самостоятельно выполнял обработку экспериментальных данных. Основные результаты диссертационной работы представлены в трех высокорейтинговых международных печатных изданиях первого квартиля. Материалы диссертации докладывались автором на российских и международных конференциях.

В качестве комментариев к диссертационной работе Алияровой Ирины Сергеевны хотелось бы отметить следующие моменты:

1. На мой взгляд, выражение “донор или акцептор связи” выглядит жаргонным.

2. Возникает вопрос, возможно ли получить какие-нибудь другие, кроме результатов рентгеноструктурного анализа, экспериментальные доказательства образования галогеновых связей в изучаемых системах.

3. Поскольку заряд +1 и +3 в изучаемых комплексах является формальным, интересно было бы рассчитать заряд на атомах золота в этих комплексах. Может быть он будет отрицательным?

Однако указанные замечания не носят принципиального характера и не меняют общего очень хорошего впечатления от высококлассно сделанной работы.

Диссертация Алияровой Ирины Сергеевны на тему: «Нуклеофильность золота при образовании галогенных связей» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Алиярова Ирина Сергеевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.1. неорганическая химия. Нарушения пунктов 9 и 11 указанного Порядка в диссертации не установлены.

Член диссертационного совета

Доктор химических наук,

профессор кафедры радиохимии СПбГУ

Подпись Мирославова А.Е. заверяю

Дата



*Мирослав Александр Евгеньевич*  
*Мирославова А.Е.*  
*Губинский Александр Владимирович*  
*группа отбора проб и*  
*сов. проектов*