


Форма «Т». Титульный лист отчета (итогового отчета) о выполнении проекта

Название проекта: Теоретические исследования нековалентных взаимодействий в химических системах, перспективных для нужд катализа, материаловедения и медицины	Номер проекта: 19-73-00001		
	Код типа проекта: МУ(2019)		
	Отрасль знания: 03		
Фамилия, имя, отчество (при наличии) руководителя проекта: Новиков Александр Сергеевич	Контактные телефон и e-mail руководителя проекта: +79819580247, ja2-88@mail.ru		
Полное и краткое название организации, через которую осуществляется финансирование проекта: федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Санкт-Петербургский государственный университет" СПбГУ, Санкт-Петербургский государственный университет			
Объем средств, фактически полученных от РНФ в 2020-2021 гг.: 1500 тыс. руб.	Год начала проекта: 2019	Дата окончания проекта: 30 июня 2021 г.	
	Объем финансирования, запрошенный на период с 1 июля 2020 г. по 30 июня 2021 г.: 1500 тыс. руб.		
Перечень приложений к отчету	1. Копии публикаций* в соответствии с Formой 2о - 7 шт. на стр. в 1 экз. * К печатному экземпляру отчета прикладываются только копии первой (с указанием авторов) страницы и страницы со ссылкой на поддержку от РНФ.		
Гарантирую, что при подготовке отчета не были нарушены авторские и иные права третьих лиц и/или имеется согласие правообладателей на представление в РНФ материалов и их использование РНФ для проведения экспертизы и для их обнародования.			
Подпись** руководителя проекта _____/А.С. Новиков/		Дата подачи отчета: 27.04.2021 г.	
Подпись** руководителя организации*** ** Подписи должны быть расшифрованы. *** Либо уполномоченного представителя, действующего на основании доверенности или распорядительного документа. В случае подписания формы уполномоченным представителем организации (в т.ч. – руководителем филиала) к печатному экземпляру отчета прилагается копия распорядительного документа или доверенности, заверенная печатью организации (при наличии). _____/_____/			
Печать (при наличии) организации			

Отчет о выполнении проекта № 19-73-00001

«Теоретические исследования нековалентных взаимодействий в химических системах, перспективных для нужд катализа, материаловедения и медицины», в период с 1 июля 2020 г. по 30 июня 2021 г.

1.1. Заявленный в проекте план работы научного исследования на отчетный период

Формируется в соответствии с заявкой на участие в конкурсе.

В ходе продолжения научных исследований по проекту РНФ № 19-73-00001 "Теоретические исследования нековалентных взаимодействий в химических системах, перспективных для нужд катализа, материаловедения и медицины" в период с 1 июля 2020 г. по 30 июня 2021 г. планируется:

1) Изучить новые типы нековалентных взаимодействий (водородных, галогенных, халькогенных, пниктогенных, тетрельных и семикоординационных связей; агостических и анагостических взаимодействий; стэкинга, анион-/катион-π взаимодействий; металлофильных взаимодействий и др.) в различных неорганических, органических, металлоорганических и координационных соединениях и супрамолекулярных ассоциатах на их основе, полученных в Институте химии СПбГУ и в лабораториях наших отечественных и зарубежных коллабораторов в ходе работ по различным грантам РНФ, РФФИ и других научных фондов, выявить главные факторы и общие закономерности, ответственные за появление таких контактов.

2) Понять природу этих межмолекулярных и внутримолекулярных контактов, дать количественную оценку их энергии (посредством проведения современных квантово-химических расчётов высокого уровня (*ab initio* и/или теории функционала плотности), а также применения ряда специальных методик: например, топологического анализа распределения электронной плотности в рамках формализма теории Бейдера (QTAIM); изучения влияния эффектов кристаллической упаковки на структуру изолированных молекулярных кластеров, стабилизированных слабыми взаимодействиями, с помощью анализа поверхностей Хиршфельда (Hirshfeld surface analysis); анализа натуральных связевых орбиталей и зарядов в рамках формализма теории Вейнгольда (NBO); анализа зарядового и энергетического разложения в рамках формализма теорий Френкинга и Морокумы (CDA и EDA, соответственно), при необходимости, возможно количественное определение относительных вкладов сигма-донирования от лиганда к металлу и обратного пи-донирования от металла к лиганду; изучения молекулярных электростатических потенциалов и определения областей, наиболее подверженных нуклеофильным/электрофильным/радикальным атакам, расчёта функций Фукуи; расчёта адиабатических и вертикальных энергий диссоциации супрамолекулярных ансамблей и последующей коррекции значений этих энергий с учётом суперпозиционной ошибки базисного набора по методике Бойса–Бернарди (BSSE correction); расчёта термодинамических параметров, в частности, энтальпий образования, с помощью метода изодесмических реакций), найти корреляции между теоретически рассчитанными параметрами нековалентных взаимодействий и реально наблюдаемыми свойствами изучаемых химических систем.

3) Использовать полученные знания для поиска новых оригинальных путей направленного супрамолекулярного дизайна – создания кластеров, цепочек, сетей и каркасных структур в жидкой и твёрдой фазах.

Кроме того, планируется теоретически изучить относительную стабильность различных неорганических, органических, металлоорганических и координационных соединений, являющихся строительными блоками для создания супрамолекулярных систем, их структурные особенности, колебательные частоты, конформационные переходы и барьеры вращения функциональных групп, орбитальные и зарядовые факторы.

В рамках продолжения научных исследований по данному проекту РНФ возможно также изучение механизмов различных химических реакций и их движущих сил, кинетических и термодинамических факторов.

1.2. Заявленные научные результаты на конец отчетного периода

Формируется в соответствии с заявкой на участие в конкурсе.

В результате продолжения научных исследований в рамках проекта РНФ № 19-73-00001 "Теоретические исследования нековалентных взаимодействий в химических системах, перспективных для нужд катализа, материаловедения и медицины" в конце периода с 1 июля 2020 г. по 30 июня 2021 г. предполагается: (1) изучить новые типы нековалентных взаимодействий (водородных, галогенных, халькогенных, пниктогенных, тетрельных и

семикоординационных связей; агостических и анагостических взаимодействий; стэкинга, анион-/катион-π взаимодействий; металлофильных взаимодействий и др.) в различных неорганических, органических, металлоорганических и координационных соединениях и супрамолекулярных ассоциатах на их основе, полученных в Институте химии СПбГУ и в лабораториях наших отечественных и зарубежных коллег в ходе работ по различным грантам РФФИ, РФФИ и других научных фондов, выявить главные факторы и общие закономерности, ответственные за появление таких контактов; (2) понять природу этих межмолекулярных и внутримолекулярных контактов, дать количественную оценку их энергии (посредством проведения современных квантово-химических расчётов высокого уровня (*ab initio* и/или теории функционала плотности), а также применения ряда специальных методик: например, топологического анализа распределения электронной плотности в рамках формализма теории Бейдера (QTAIM); изучения влияния эффектов кристаллической упаковки на структуру изолированных молекулярных кластеров, стабилизированных слабыми взаимодействиями, с помощью анализа поверхностей Хиршфельда (Hirshfeld surface analysis); анализа натуральных связевых орбиталей и зарядов в рамках формализма теории Вейнхольда (NBO); анализа зарядового и энергетического разложения в рамках формализма теорий Френкинга и Морокумы (CDA и EDA, соответственно), при необходимости, возможно количественное определение относительных вкладов сигма-донирования от лиганда к металлу и обратного пи-донирования от металла к лиганду; изучения молекулярных электростатических потенциалов и определения областей, наиболее подверженных нуклеофильным/электрофильным/радикальным атакам, расчёта функций Фукуи; расчёта адиабатических и вертикальных энергий диссоциации супрамолекулярных ансамблей и последующей коррекции значений этих энергий с учётом суперпозиционной ошибки базисного набора по методике Бойса–Бернарди (BSSE correction); расчёта термодинамических параметров, в частности, энтальпий образования, с помощью метода изодесмических реакций), найти корреляции между теоретически рассчитанными параметрами нековалентных взаимодействий и реально наблюдаемыми свойствами изучаемых химических систем; (3) использовать полученные знания для поиска новых оригинальных путей направленного супрамолекулярного дизайна – создания кластеров, цепочек, сетей и каркасных структур в жидкой и твёрдой фазах. Кроме того, планируется теоретически изучить относительную стабильность различных неорганических, органических, металлоорганических и координационных соединений, являющихся строительными блоками для создания супрамолекулярных систем, их структурные особенности, колебательные частоты, конформационные переходы и барьеры вращения функциональных групп, орбитальные и зарядовые факторы. В рамках продолжения научных исследований по данному проекту РФФИ возможно также изучение механизмов различных химических реакций и их движущих сил, кинетических и термодинамических факторов. Решение этих фундаментальных задач будет иметь определяющее значение для развития такой области современной науки, как супрамолекулярная химия, поскольку наши исследования помогут классифицировать нековалентные взаимодействия по типу и энергетическим характеристикам.

Планируемые исследования носят междисциплинарный характер и лежат на стыке компьютерного моделирования с такими естественнонаучными дисциплинами, как химия, физика, кристаллография, биология и медицина, а также имеют непосредственное отношение к наукам о материалах и нанотехнологиям.

Результаты, полученные в ходе исследований в рамках данного проекта, будут способствовать пониманию природы соединений, имеющих широкий спектр применения в биологии и медицине (например, в нейтрон-захватной терапии онкологических заболеваний; в создании лекарственных препаратов с антибактериальной, противовирусной, противовоспалительной и противоаллергической активностью), являющихся эффективными катализаторами важнейших технологических процессов (например, реакций кросс-сочетания Сузуки, Хека и Соногаширы; различных процессов окисления углеводов и их конверсии в спирты, эпоксиды, эфиры, альдегиды, кетоны и карбоновые кислоты – данная тема актуальна для нефтегазовой промышленности), а также обладающих ценными свойствами с точки зрения материаловедения (например, механическими, окислительно-восстановительными, магнитными и оптическими), что делает их перспективными для изготовления наукоёмких аккумуляторных и топливных элементов, светодиодов и фотоэлементов солнечных электростанций.

1.3. Сведения о фактическом выполнении плана работы в отчетный период

(фактически проделанная работа, до 10 стр.)

Во второй год реализации научного проекта РФФИ № 19-73-00001 "Теоретические исследования нековалентных взаимодействий в химических системах, перспективных для нужд катализа, материаловедения и медицины" наибольший объём работ был сфокусирован на главной цели проекта – теоретических исследованиях нековалентных взаимодействий (изучение их природы и энергетики, качественное и количественное описание данного феномена) в химических системах, перспективных для нужд катализа, материаловедения и медицины (в различных

неорганических, органических, металлоорганических и координационных соединениях и супрамолекулярных ассоциатах на их основе).

Ниже приведён краткий перечень основных полученных результатов.

1) Мною, с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/DZP-DKH), топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM), расчёта молекулярных орбиталей и распределения молекулярного электростатического потенциала, была теоретически изучена природа катиона [(2-MeO-5-BrPh)₃Sb]⁺ как перспективного билдинг-блока для супрамолекулярного дизайна материалов на основе галогенных связей, а также потенциального органического катализатора, работающего за счёт нековалентных взаимодействий. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Sharutin V.V., Sharutina O.K., Novikov A.S., Adonin S.A. "Substituent-dependent reactivity of triarylantimony(III) toward I₂: isolation of [Ar₃Sb]⁺ salt" // *New J. Chem.* 2020, V. 44. P. 14339.].

2) Мною был теоретически изучен (квантово-химические расчёты в рамках теории функционала плотности и топологический анализ распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM)) феномен галогенных связей с участием галогенированных бензолов и неподелённой электронной пары атома углерода в молекуле изоцианида. Такие нековалентные взаимодействия существенно снижают неприятный запах изоцианидов, что потенциально может облегчать работу с данным реагентами в лаборатории. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Mikherdov A.S., Novikov A.S., Boyarskiy V.P., Kukushkin V.Yu. "The halogen bond with isocyano carbon reduces isocyanide odor" // *Nat. Commun.* 2020, V. 11. P. 2921.].

3) Были теоретически изучены различные нековалентные взаимодействия галоген...галоген в кристаллах серии галогенированных ароматических дихлородиазидиенов (достаточно редкий класс азо-красителей). Природа данных нековалентных взаимодействий была изучена мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/3-311++G**), топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM) и расчёта распределения молекулярного электростатического потенциала в модельных системах, а также анализа поверхностей Хиршфельда с помощью специализированного программного пакета CrystalExplorer на базе результатов рентгеноструктурных исследований. Было показано, что за счёт таких нековалентных взаимодействий можно управлять особенностями кристаллической упаковки и супрамолекулярной организацией в твёрдой фазе. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Nenajdenko V.G., Shikhaliyev N.G., Maharramov A.M., Bagirova K.N., Suleymanova G.T., Novikov A.S., Khrustalev V.N., Tskhovrebov A.G. "Halogenated diazabutadiene dyes: synthesis, structures, supramolecular features, and theoretical studies" // *Molecules* 2020, V. 25. P. 5013.].

4) Совместно с научной группой наших коллег из Института неорганической химии имени А. В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия (С. А. Адонин, М. Н. Соколов, В. П. Федин и др.) было проведено экспериментально-теоретическое исследование стабилизации декабромид-аниона {Br₁₀}²⁻ в структуре бромидного комплекса Sb(V) (4-MePyC₃)₂{[SbBr₆]₂{Br₁₀}²⁻ (4-MePyC₃ = 1,1'-(пропан-1,3-диил)-бис(4-метилпиридин)-1-иум дикатион) (потенциально перспективное соединение для создания инновационных функциональных материалов для нужд электроники и фотовольтаики). Природа и энергетические характеристики нековалентных взаимодействий Br...Br в данном соединении, отвечающих за супрамолекулярную организацию, были изучены мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Bondarenko M.A., Novikov A.S., Fedin V.P., Sokolov M.N., Adonin S.A. "The stabilization of decabromide {Br₁₀}²⁻ anion in the structure of Sb(V) bromide complex" // *J. Coord. Chem.* 2020, V. 73. P. 3038.].

5) Совместно с научной группой наших коллег из University of Oviedo, Овьедо, Испания (профессор Angel Martin Pendás и его сотрудники) было проведено фундаментальное теоретическое исследование идеализированных простейших модельных систем, способных участвовать в формировании таких нековалентных взаимодействий как галогенные связи. Было показано, что во многих случаях общее электростатическое взаимодействие между взаимодействующими частицами может быть дестабилизирующим, и делокализация электронной плотности и эффекты переноса заряда могут быть весьма существенными для стабилизации таких супрамолекулярных систем. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Jiménez-Grávalos F., Gallegos M., Pendás Á. M., Novikov A.S. "Challenging the electrostatic σ-hole picture of halogen bonding using minimal models and the interacting quantum atoms approach" // *J.*

6) Совместно с научной группой наших коллег из ИХФ РАН, РУДН и ИОХ РАН (А. Г. Цховребов, В. Н. Хрусталева) было проведено экспериментально-теоретическое исследование супрамолекулярных димеров в кристаллической структуре (Z)-1-(((5-флюоропиридин-2-ил)амино)метилена)нафтален-2(1H)-она (вещество с потенциально ценными фотохромными/термохромными, антибактериальными и противоопухолевыми свойствами), связанных за счёт водородных связей C(sp²)-H...F. Природа данных нековалентных взаимодействий была изучена мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (ωB97XD/6-311++G**) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM), а также анализа поверхностей Хиршфельда с помощью специализированного программного пакета CrystalExplorer на базе результатов рентгеноструктурных исследований. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Khrustalev V.N. "Identification of supramolecular dimers in the crystal structure of (Z)-1-(((5-fluoropyridin-2-yl)amino)methylene)naphthalen-2(1H)-one via C(sp²)-H...F hydrogen bonding: a combined experimental and theoretical study" // Журнал структурной химии, 2021, Т. 62. С. 490.].

7) Совместно с научной группой наших коллег из ИХФ РАН, РУДН и ИОХ РАН (А. Г. Цховребов, В. Н. Хрусталева и др.), а также профессором Matti Haukka из University of Jyväskylä, Ювяскюля, Финляндия, было проведено экспериментально-теоретическое исследование супрамолекулярных 1D полимеров на основе координационных соединений золота(III) (комплекс trans-dibromogold(III)t-Bu-Xantphos). Природа и энергетика нековалентных взаимодействий Au-Br...Br-Au, за счёт которых образуются 1D цепочки в кристаллической фазе, были изучены мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (ωB97XD/DZP-DKH) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Kritchenkov A.S., Khrustalev V.N., Haukka M. "Attractive halogen...halogen interactions in crystal structure of trans-dibromogold(III) complex" // Z. Kristallogr. Cryst. Mater. 2020, V. 235. P. 477.].

Достигнутые научные результаты были представлены на следующих международных научных мероприятиях:

1) 10–11 декабря 2020 г. - First Russian-German Virtual Conference on Interdisciplinary Natural Sciences: An Interactive Online G-RISC Event (устный доклад на тему: "Computer modeling of non-covalent interactions in chemical systems promising for materials science, catalysis and medicine") [https://www.g-risc.org/conferences_workshops/Digital-and-Online-Events/Virtual-Conference-2020.html]

2) 26–27 апреля 2021 г. - Онлайн-симпозиум по вычислительной химии памяти А. А. Грановского (устный доклад на тему: "Computer modeling in organometallic and coordination chemistry: reactivity and non-covalent interactions") [<https://chemport.ru/webconference2021/>]

Таким образом, запланированная работа по проекту РНФ № 19-73-00001 "Теоретические исследования нековалентных взаимодействий в химических системах, перспективных для нужд катализа, материаловедения и медицины" за отчётный период выполнена в полном объеме, и имеет место существенное перевыполнение плана. Все задачи проекта за отчётный период успешно решены. По итогам выполнения проекта за отчётный период было опубликовано 7 статей в ведущих профильных международных научных журналах (Nat. Commun., J. Comput. Chem., Molecules, New J. Chem., J. Coord. Chem., Z. Kristallogr. Cryst. Mater., Журнал структурной химии). Результаты проведённых исследований докладывались и обсуждались на международных научных мероприятиях в виде устных докладов.

Все планируемые в отчетный период работы выполнены полностью:

да

1.4. Сведения о достигнутых конкретных научных результатах в отчетном периоде

(до 5 стр.)

1) Мною, с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/DZP-DKH), топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM), расчёта молекулярных орбиталей и распределения молекулярного электростатического потенциала, была теоретически изучена природа катиона [(2-MeO-5-BrPh)3Sb]⁺ как перспективного билдинг-блока для супрамолекулярного дизайна материалов на основе галогенных связей, а также потенциального органического катализатора, работающего за счёт

нековалентных взаимодействий. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Sharutin V.V., Sharutina O.K., Novikov A.S., Adonin S.A. "Substituent-dependent reactivity of triarylantimony(III) toward I2: isolation of [Ar₃SbI]⁺ salt" // *New J. Chem.* 2020, V. 44. P. 14339.].

2) Мною был теоретически изучен (квантово-химические расчёты в рамках теории функционала плотности и топологический анализ распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM)) феномен галогенных связей с участием галогенированных бензолов и неподелённой электронной пары атома углерода в молекуле изоцианида. Такие нековалентные взаимодействия существенно снижают неприятный запах изоцианидов, что потенциально может облегчать работу с данным реагентами в лаборатории. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Mikherdov A.S., Novikov A.S., Boyarskiy V.P., Kukushkin V.Yu. "The halogen bond with isocyanato carbon reduces isocyanide odor" // *Nat. Commun.* 2020, V. 11. P. 2921.].

3) Были теоретически изучены различные нековалентные взаимодействия галоген...галоген в кристаллах серии галогенированных ароматических дихлородиазидиенов (достаточно редкий класс азо-красителей). Природа данных нековалентных взаимодействий была изучена мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/6-311++G**), топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM) и расчёта распределения молекулярного электростатического потенциала в модельных системах, а также анализа поверхностей Хиршфельда с помощью специализированного программного пакета CrystalExplorer на базе результатов рентгеноструктурных исследований. Было показано, что за счёт таких нековалентных взаимодействий можно управлять особенностями кристаллической упаковки и супрамолекулярной организацией в твёрдой фазе. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Nenajdenko V.G., Shikhaliyev N.G., Maharramov A.M., Bagirova K.N., Suleymanova G.T., Novikov A.S., Khrustalev V.N., Tskhovrebov A.G. "Halogenated diazabutadiene dyes: synthesis, structures, supramolecular features, and theoretical studies" // *Molecules* 2020, V. 25. P. 5013.].

4) Совместно с научной группой наших коллег из Института неорганической химии имени А. В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия (С. А. Адонин, М. Н. Соколов, В. П. Федин и др.) было проведено экспериментально-теоретическое исследование стабилизации декабромид-аниона {Br₁₀}²⁻ в структуре бромидного комплекса Sb(V) (4-MePyC₃)₂{[SbBr₆]₂{Br₁₀}} (4-MePyC₃ = 1,1'-(пропан-1,3-диил)-бис(4-метилпиридин)-1-иум дикатион) (потенциально перспективное соединение для создания инновационных функциональных материалов для нужд электроники и фотовольтаики). Природа и энергетические характеристики нековалентных взаимодействий Br...Br в данном соединении, отвечающих за супрамолекулярную организацию, были изучены мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Bondarenko M.A., Novikov A.S., Fedin V.P., Sokolov M.N., Adonin S.A. "The stabilization of decabromide {Br₁₀}²⁻ anion in the structure of Sb(V) bromide complex" // *J. Coord. Chem.* 2020, V. 73. P. 3038.].

5) Совместно с научной группой наших коллег из University of Oviedo, Овьедо, Испания (профессор Angel Martin Pendás и его сотрудники) было проведено фундаментальное теоретическое исследование идеализированных простейших модельных систем, способных участвовать в формировании таких нековалентных взаимодействий как галогенные связи. Было показано, что во многих случаях общее электростатическое взаимодействие между взаимодействующими частицами может быть дестабилизирующим, и делокализация электронной плотности и эффекты переноса заряда могут быть весьма существенными для стабилизации таких супрамолекулярных систем. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Jiménez-Grávalos F., Gallegos M., Pendás Á. M., Novikov A.S. "Challenging the electrostatic σ-hole picture of halogen bonding using minimal models and the interacting quantum atoms approach" // *J. Comput. Chem.* 2021, V. 42. P. 676.].

6) Совместно с научной группой наших коллег из ИХФ РАН, РУДН и ИОХ РАН (А. Г. Цховребов, В. Н. Хрусталева) было проведено экспериментально-теоретическое исследование супрамолекулярных димеров в кристаллической структуре (Z)-1-(((5-флюоропиридин-2-ил)амино)метилена)нафтален-2(1H)-она (вещество с потенциально ценными фотохромными/термохромными, антибактериальными и противоопухолевыми свойствами), связанных за счёт водородных связей C(sp²)-H...F. Природа данных нековалентных взаимодействий была изучена мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/6-311++G**) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM), а также анализа поверхностей Хиршфельда с помощью специализированного программного пакета CrystalExplorer на базе

результатов рентгеноструктурных исследований. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Khrustalev V.N. "Identification of supramolecular dimers in the crystal structure of (Z)-1-(((5-fluoropyridin-2-yl)amino)methylene)naphthalen-2(1H)-one via C(sp²)-H...F hydrogen bonding: a combined experimental and theoretical study" // Журнал структурной химии, 2021, Т. 62. С. 490.].

7) Совместно с научной группой наших коллег из ИХФ РАН, РУДН и ИОХ РАН (А. Г. Цховребов, В. Н. Хрусталеv и др.), а также профессором Matti Haukka из University of Jyväskylä, Ювяскюля, Финляндия, было проведено экспериментально-теоретическое исследование супрамолекулярных 1D полимеров на основе координационных соединений золота(III) (комплекс trans-dibromogold(III)t-Bu-Xantphos). Природа и энергетика нековалентных взаимодействий Au-Br...Br-Au, за счёт которых образуются 1D цепочки в кристаллической фазе, были изучены мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (ω B97XD/DZP-DKH) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Kritchenkov A.S., Khrustalev V.N., Haukka M. "Attractive halogen...halogen interactions in crystal structure of trans-dibromogold(III) complex" // Z. Kristallogr. Cryst. Mater. 2020, V. 235. P. 477.].

Все запланированные в отчетном периоде научные результаты достигнуты:

да

1.5. Описание выполненных в отчетном периоде работ и полученных научных результатов для публикации на сайте РНФ

на русском языке (до 3 страниц текста, также указываются ссылки на информационные ресурсы в сети Интернет (url-адреса), посвященные проекту)

Во второй год реализации научного проекта РНФ № 19-73-00001 "Теоретические исследования нековалентных взаимодействий в химических системах, перспективных для нужд катализа, материаловедения и медицины" наибольший объём работ был сфокусирован на главной цели проекта – теоретических исследованиях нековалентных взаимодействий (изучение их природы и энергетики, качественное и количественное описание данного феномена) в химических системах, перспективных для нужд катализа, материаловедения и медицины (в различных неорганических, органических, металлоорганических и координационных соединениях и супрамолекулярных ассоциатах на их основе).

Основные полученные научные результаты:

- 1) Была теоретически изучена природа катиона [(2-MeO-5-BrPh)₃Sb]⁺ как перспективного билдинг-блока для супрамолекулярного дизайна материалов на основе галогенных связей, а также потенциального органического катализатора, работающего за счёт нековалентных взаимодействий.
- 2) Был теоретически изучен феномен галогенных связей с участием галогенированных бензолов и неподелённой электронной пары атома углерода в молекуле изоцианида. Такие нековалентные взаимодействия существенно снижают неприятный запах изоцианидов, что потенциально может облегчать работу с данным реагентами в лаборатории.
- 3) Были теоретически изучены различные нековалентные взаимодействия галоген...галоген в кристаллах серии галогенированных ароматических дихлородиазидиенов (достаточно редкий класс азо-красителей). Было показано, что за счёт таких нековалентных взаимодействий можно управлять особенностями кристаллической упаковки и супрамолекулярной организацией в твёрдой фазе.
- 4) Было проведено исследование стабилизации декабромид-аниона {Br₁₀}²⁻ в структуре бромидного комплекса Sb(V) (4-MePyC₃)₂{[SbBr₆]₂{Br₁₀}} (4-MePyC₃ = 1,1'(пропан-1,3-диил)-бис(4-метилпиридин)-1-иум дикатион) (потенциально перспективное соединение для создания инновационных функциональных материалов для нужд электроники и фотовольтаики). Природа и энергетические характеристики нековалентных взаимодействий Br...Br в данном соединении, отвечающих за супрамолекулярную организацию, были изучены теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности.
- 5) Было проведено фундаментальное теоретическое исследование идеализированных простейших модельных систем, способных участвовать в формировании таких нековалентных взаимодействий как галогенные связи. Было показано, что во многих случаях общее электростатическое взаимодействие между взаимодействующими частицами может быть дестабилизирующим, и делокализация электронной плотности и эффекты переноса заряда могут быть весьма существенными для стабилизации таких супрамолекулярных систем.
- 6) Было проведено исследование супрамолекулярных димеров в кристаллической структуре (Z)-1-(((5-

флюоропиридин-2-ил)амино)метиленафтален-2(1H)-она (вещество с потенциально ценными фотохромными/термохромными, антибактериальными и противоопухолевыми свойствами), связанных за счёт водородных связей C(sp²)-H...F. Природа данных нековалентных взаимодействий была изучена теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности, а также анализа поверхностей Хиршфельда на базе результатов рентгеноструктурных исследований.

7) Было проведено исследование супрамолекулярных 1D полимеров на основе координационных соединений золота(III) (комплекс trans-dibromogold(III)t-Bu-Xantphos). Природа и энергетика нековалентных взаимодействий Au–Br...Br–Au, за счёт которых образуются 1D цепочки в кристаллической фазе, были изучены теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности.

Достигнутые научные результаты были представлены на следующих международных научных мероприятиях:

1) 10–11 декабря 2020 г. - First Russian-German Virtual Conference on Interdisciplinary Natural Sciences: An Interactive Online G-RISC Event (устный доклад на тему: "Computer modeling of non-covalent interactions in chemical systems promising for materials science, catalysis and medicine") [https://www.g-risc.org/conferences_workshops/Digital-and-Online-Events/Virtual-Conference-2020.html]

2) 26–27 апреля 2021 г. - Онлайн-симпозиум по вычислительной химии памяти А. А. Грановского (устный доклад на тему: "Computer modeling in organometallic and coordination chemistry: reactivity and non-covalent interactions") [<https://chemport.ru/webconference2021/>]

Таким образом, запланированная работа по проекту РНФ № 19-73-00001 "Теоретические исследования нековалентных взаимодействий в химических системах, перспективных для нужд катализа, материаловедения и медицины" за отчётный период выполнена в полном объеме, и имеет место существенное перевыполнение плана. Все задачи проекта за отчётный период успешно решены. По итогам выполнения проекта за отчётный период было опубликовано 7 статей в ведущих профильных международных научных журналах (Nat. Commun., J. Comput. Chem., Molecules, New J. Chem., J. Coord. Chem., Z. Kristallogr. Cryst. Mater., Журнал структурной химии). Результаты проведённых исследований докладывались и обсуждались на международных научных мероприятиях в виде устных докладов.

на английском языке

During the second year of the implementation of the RSF project No. 19-73-00001 "Theoretical studies of non-covalent interactions in chemical systems promising for catalysis, materials science, and medicine", the largest amount of work was focused on the main goal of the project - theoretical studies of non-covalent interactions (studying their nature and energies, qualitative and quantitative description of this phenomenon) in chemical systems that are promising for the needs of catalysis, materials science and medicine (in various inorganic, organic, organometallic and coordination compounds and their supramolecular associates).

The main scientific results obtained:

1) The theoretical study of the nature of [(2-MeO-5-BrPh)₃SbI]⁺ cation as a promising building block for supramolecular design of materials based on the halogen bonds as well as a potential organic catalyst operating through non-covalent interactions.

2) The phenomenon of halogen bonds with the participation of halogenated benzenes and the lone electron pair of the carbon atom in the isocyanide molecule was theoretically studied. These non-covalent interactions significantly reduce the unpleasant odor of isocyanides, which can potentially facilitate handling of these reagents in the laboratory.

3) Various non-covalent interactions halogen...halogen in crystals of a series of halogenated aromatic dichlorodiazadienes (a fairly rare class of azo-dyes) were theoretically studied. It was shown that due to such non-covalent interactions it is possible to control the peculiarities of crystal packing and supramolecular organization in the solid phase.

4) The stabilization of the {Br₁₀}²⁻ decabromide anion in the structure of the bromide complex Sb(V) (4-MePyC₃)₂{[SbBr₆]₂{Br₁₀}} (4-MePyC₃ = 1,10 (propane-1,3-diyl)- bis(4-methylpyridin)-1-ium dication) (a potentially promising compound for creating innovative functional materials for the needs of electronics and photovoltaics) was theoretically studied. The nature and energy characteristics of non-covalent interactions Br...Br in this compound, which are responsible for the supramolecular organization, were studied theoretically using high-level quantum-chemical calculations within the framework of the density functional theory.

5) A fundamental theoretical study was carried out for idealized simplest model systems capable of participating in the formation of halogen bonds. It was shown that in many cases the general electrostatic interaction between interacting particles can be destabilizing, and the delocalization of the electron density and the effects of charge transfer can be very significant for the stabilization of such supramolecular systems.

6) A study of supramolecular dimers in the crystal structure of (Z)-1-(((4-fluoropyridine-2yl)amino)methylene)naphthalen-2(1H)-one (a substance with potentially valuable photochromic / thermochromic, antibacterial and antitumor properties) connected due to C(sp²)–H...F hydrogen bonds was carried out. The nature of these non-covalent interactions was studied theoretically using high-level quantum-chemical calculations in the framework of the density functional theory, as well as the analysis of Hirshfeld surfaces based on the results of X-ray structural studies.

7) A study of supramolecular 1D polymers based on gold(III) coordination compounds (trans-dibromogold(III)t-Bu-Xantphos complex) was carried out. The nature and energetics of noncovalent interactions Au–Br...Br–Au, due to which 1D chains are formed in the crystalline phase, were studied theoretically using high-level quantum-chemical calculations within the framework of the density functional theory.

The achieved scientific results were presented at the following international scientific events:

1) December 10–11, 2020 - First Russian-German Virtual Conference on Interdisciplinary Natural Sciences: An Interactive Online G-RISC Event (oral presentation: "Computer modeling of non-covalent interactions in chemical systems promising for materials science, catalysis and medicine") [https://www.g-risc.org/conferences_workshops/Digital-and-Online-Events/Virtual-Conference-2020.html]

2) April 26–27, 2021 - Online Symposium on Computational Chemistry in Memory of A.A. Granovsky (oral presentation: "Computer modeling in organometallic and coordination chemistry: reactivity and non-covalent interactions") [<https://chemport.ru/webconference2021/>]

Thus, the planned work on the reporting period within the RSF project No. 19-73-00001 "Theoretical studies of non-covalent interactions in chemical systems promising for catalysis, materials science, and medicine" has been successfully done, and there is a significant over fulfillment of the plan. All project tasks on the reporting period have been successfully solved. As a result of the project implementation within the reporting period, 7 articles were published in leading specialized international scientific journals (Nat. Commun., J. Comput. Chem., Molecules, New J. Chem., J. Coord. Chem., Z. Kristallogr. Cryst. Mater., J. Struct. Chem.). The results of the research were reported and discussed at various international scientific events as oral presentations.

1.6. Файл с дополнительными материалами

(при необходимости представления экспертному совету РНФ дополнительных графических материалов к отчету по проекту, файл размером до 3 Мб в формате pdf)

1.7. Перечень публикаций за отчетный период по результатам проекта

(добавляются из списка публикаций, зарегистрированных участниками проекта)

1. Bondarenko M.A., Novikov A.S., Fedin V.P., Sokolov M.N., Adonin S.A. (Bondarenko M.A., Novikov A.S., Fedin V.P., Sokolov M.N., Adonin S.A.) **The stabilization of decabromide {Br₁₀}²⁻ anion in the structure of Sb(V) bromide complex** JOURNAL OF COORDINATION CHEMISTRY (2020 г.)

2. Mikherdov A.S., Novikov A.S., Boyarskiy V.P., Kukushkin V.Yu. (Mikherdov A.S., Novikov A.S., Boyarskiy V.P., Kukushkin V.Yu.) **The halogen bond with isocyano carbon reduces isocyanide odor** Nature Communications (2020 г.)

3. Nenajdenko V.G., Shikhaliyev N.G., Maharramov A.M., Bagirova K.N., Suleymanova G.T., Novikov A.S., Khrustalev V.N., Tskhovrebov A.G. (Nenajdenko V.G., Shikhaliyev N.G., Maharramov A.M., Bagirova K.N., Suleymanova G.T., Novikov A.S., Khrustalev V.N., Tskhovrebov A.G.) **Halogenated diazabutadiene dyes: synthesis, structures, supramolecular features, and theoretical studies** Molecules (2020 г.)

4. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Novikov A.S., Adonin S.A. (Sharutin V.V., Sharutina O.K., Novikov A.S., Adonin S.A.) **Substituent-dependent reactivity of triarylantimony(III) toward I₂: isolation of [Ar₃SbI]⁺ salt** New Journal of Chemistry (2020 г.)

5. Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Kritchenkov A.S., Khrustalev V.N., Haukka M. (Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Kritchenkov A.S., Khrustalev V.N., Haukka M.) **Attractive halogen...halogen interactions in crystal structure of trans-dibromogold(III) complex** Zeitschrift für Kristallographie – Crystalline Materials (2020 г.)

6. Jiménez-Grávalos F., Gallegos M., Pendás Á.M., Novikov A.S. (Jiménez-Grávalos F., Gallegos M., Pendás Á.M., Novikov A.S.) **Challenging the electrostatic σ-hole picture of halogen bonding using minimal models and the interacting quantum atoms approach** Journal of Computational Chemistry (2021 г.)

7. Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Khrustalev V.N. (Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Khrustalev V.N.) **Identification of supramolecular dimers in the crystal structure of (Z)-1-(((5-fluoropyridin-2-yl)amino)methylene)naphthalen-2(1H)-one via C(sp²)–H⋯F hydrogen bonding: A combined experimental and theoretical study** Журнал структурной химии (2021 г.)

1.8. В период с 1 июля 2020 г. по 30 июня 2021 г. возникли исключительные права на результаты интеллектуальной деятельности (РИД), созданные при выполнении проекта:

Нет

1.9. Показатели реализации проекта

Показатели кадрового состава научного коллектива (рассчитываются как округленное до целого отношение суммы количества месяцев, в которых действовали в отчетном периоде в отношении членов научного коллектива приказы о составе научного коллектива, к количеству месяцев, в которых действовало в отчетном периоде соглашение)

Плановые значения указываются только для показателей, предусмотренных соглашением.

Показатели	Единица измерения	с 1 июля 2020 г. по 30 июня 2021 г.	
		план	факт
Число членов научного коллектива	человек		1
Число исследователей в возрасте до 39 лет (включительно) среди членов научного коллектива	человек		1
Число аспирантов (интернов, ординаторов, адъюнктов) очной формы обучения среди членов научного коллектива	человек		0
Количество лиц категории «Вспомогательный персонал»	человек		0

Публикационные показатели реализации проекта (значения показателей формируются автоматически на основе данных, представленных в форме 2о (накопительным итогом). Показатели публикационной активности приводятся в отношении публикаций, имеющих соответствующую ссылку на поддержку Российского научного фонда и на организацию (в последнем случае – за исключением публикаций, созданных в рамках оказания услуг сторонними организациями).

Плановые значения указываются только для показателей, предусмотренных соглашением.

Публикационные показатели реализации проекта (нарастающим итогом, за исключением показателя «Число цитирований...»)	Единица измерения	с 1 июля 2019 г. по 30 июня 2021 г.	
		план	факт
Количество публикаций по проекту членов научного коллектива в рецензируемых российских и зарубежных научных изданиях, индексируемых в базах данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (SCOPUS)	Ед.	3	18
в том числе в изданиях, входящих в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по SJR (принадлежность издания к Q1 в Scopus определяется по базе данных http://www.scimagojr.com/)	Ед.		7
Число цитирований публикаций членов научного коллектива в научных журналах, индексируемых в международной базе данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) в отчетном периоде	Ед.		38

1.10. Информация о представлении достигнутых научных результатов на научных мероприятиях (конференциях, симпозиумах и пр.)

(в том числе форма представления – приглашенный доклад, устное выступление, стендовый доклад)

Достигнутые научные результаты были представлены на следующих международных научных мероприятиях:

Первый год реализации проекта:

- 1) 2–6 сентября 2019 г. (Лиссабон, Португалия) - 1st International Conference on Noncovalent Interactions (ICNI 2019) (стендовый доклад на тему: "Theoretical studies of noncovalent interactions in chemical systems promising for catalysis, materials science, and medicine") [<https://icni2019.eventos.chemistry.pt/>]
- 2) 9–13 сентября 2019 г. (Санкт-Петербург, Россия) - Mendeleev 2019, the XI International Conference on Chemistry for Young Scientists (планарный доклад на тему: "Theoretical studies in organometallic and coordination chemistry: reactivity, catalysis, and non-covalent interactions") [<http://mendeleev.spbu.ru/>]
- 3) 20–23 октября 2019 г. (Ливерпуль, Великобритания) - Workshop "Dynamic self-assembly and quorum effects in chemistry and biology predicted by non-linear modelling algorithms" (устное выступление на тему: "Computer modeling in organometallic chemistry: reactivity, catalysis, and noncovalent interactions") [<http://dysa.itmo.ru/>]

Второй год реализации проекта:

1) 10–11 декабря 2020 г. - First Russian-German Virtual Conference on Interdisciplinary Natural Sciences: An Interactive Online G-RISC Event (устный доклад на тему: "Computer modeling of non-covalent interactions in chemical systems promising for materials science, catalysis and medicine") [https://www.g-risc.org/conferences_workshops/Digital-and-Online-Events/Virtual-Conference-2020.html]

2) 26–27 апреля 2021 г. - Онлайн-симпозиум по вычислительной химии памяти А. А. Грановского (устный доклад на тему: "Computer modeling in organometallic and coordination chemistry: reactivity and non-covalent interactions") [<https://chemport.ru/webconference2021/>]

1.11. Все публикации, информация о которых представлена в пункте 1.9, имеют указание на получение финансовой поддержки от Фонда:

да

1.12. Информация (при наличии) о публикациях в СМИ, посвященных результатам проекта, с упоминанием Фонда:

Да

1.12.1 Наименование СМИ

Интернет-портал Indicator.ru

Заголовок (название)

Новый тип связи с атомом углерода смог устранить отвратительный запах изоцианидов

Выходные данные публикации о проекте

1.12.2 Ссылка на адрес в сети Интернет (при наличии)

<https://indicator.ru/chemistry-and-materials/novyi-tip-svyazi-s-atomom-ugleroda-smog-ustranit-otvratitelnyy-zapakh-izocianidov-14-06-2020.htm>

1.12.1 Наименование СМИ

Сайт Института химии СПбГУ

Заголовок (название)

Открытый химиками СПбГУ новый тип связи с атомом углерода смог устранить отвратительный запах изоцианидов

Выходные данные публикации о проекте

1.12.2 Ссылка на адрес в сети Интернет (при наличии)

http://chem.spbu.ru/index.php?option=com_content&view=article&id=3036:otkrytyj-khimikami-spbgu-novyj-tip-svyazi-s-atomom-ugleroda-smog-ustranit-otvratitelnyy-zapakh-izotsianidov&catid=139:news&Itemid=152

1.13. Форма трудового договора с руководителем проекта соответствует указанной в исходной заявке на участие в конкурсе (п. 2.16 Формы 2):

«Организация будет являться основным местом работы (характер работы – не дистанционный): да»

да

1.14. Перечень** работ из Плана научного исследования, которые не были выполнены в связи с объективными обстоятельствами (описание работы из Плана научного исследования, подробное пояснение о приведших к невыполнению обстоятельств):**

**** При наличии, в отчете о целевом использовании средств гранта необходимо будет указать объем денежных средств, не затраченных на выполнение работ из Плана научного исследования, которые не были выполнены в связи с объективными обстоятельствами, и которые будут возвращены в Фонд (с учетом понесенных необратимых расходов).

Запланированная работа по проекту РНФ № 19-73-00001 "Теоретические исследования нековалентных взаимодействий в химических системах, перспективных для нужд катализа, материаловедения и медицины" за отчетный период выполнена в полном объеме, и имеет место существенное перевыполнение плана. Все задачи проекта за отчетный период успешно решены.

Объем средств, запланированный для выполнения вышеуказанных работ из Плана научного исследования:

0

Информация о замене работ из Плана научного исследования, которые не были выполнены в связи с объективными

обстоятельствами, на иные выполненные работы, которые соответствовали цели выполняемого исследования, с обоснованием такого соответствия и равнозначности замены:

-

Настоящим подтверждаю:

- самостоятельность и авторство текста отчета о выполнении проекта;
- при обнародовании результатов, полученных в рамках поддержанного РНФ проекта, научный коллектив ссылался на получение финансовой поддержки проекта от РНФ и на организацию, на базе которой выполнялось исследование;
- согласие с опубликованием РНФ сведений из отчета (итогового отчета) о выполнении проекта, в том числе в информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»;
- проект не имеет других источников финансирования;
- проект не является аналогичным***** по содержанию проекту, одновременно финансируемому из других источников.

***** Проекты, аналогичные по целям, задачам, объектам, предметам и методам исследований, а также ожидаемым результатам. Экспертиза на совпадение проводится экспертным советом Фонда.

Подпись руководителя проекта _____/А.С. Новиков/

Сведения о публикациях по результатам проекта
№ 19-73-00001

«Теоретические исследования нековалентных взаимодействий в химических системах, перспективных для нужд катализа, материаловедения и медицины»,
в период с 1 июля 2020 г. по 30 июня 2021 г.

Приводится в отношении публикаций, имеющих соответствующую ссылку на поддержку РФФ.

(заполняется отдельно на каждую публикацию, для формирования п.1.7 отчета)

Указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях,

положительного решения о регистрации исключительных прав.

В карточке публикации все данные приводятся на языке и в форме, используемой базами данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection), «Скопус» (Scopus) и/или РИНЦ, каждая статья упоминается только один раз (независимо от языков опубликования).

1

2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

на русском языке: Bondarenko M.A., Novikov A.S., Fedin V.P., Sokolov M.N., Adonin S.A.

на английском языке: Bondarenko M.A., Novikov A.S., Fedin V.P., Sokolov M.N., Adonin S.A.

WoS Researcher ID (при наличии): <https://publons.com/researcher/L-5001-2015>

Scopus AuthorID (при наличии): <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorid=50262902200>

ORCID (при наличии): ---

В состав авторов публикации входит аспирант(ы) (интерн, ординатор, адъюнкт) очной формы обучения:

да

2.2. Название публикации

The stabilization of decabromide {Br10}2- anion in the structure of Sb(V) bromide complex

2.3. Год публикации

2020

2.4. Ключевые слова

Antimony; polybromide; polyhalides; halogen bonding; supramolecular contacts

2.5. Вид публикации

статья

2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

JOURNAL OF COORDINATION CHEMISTRY

ISSN (при наличии): ---

e-ISSN (при наличии): ---

ISBN (при наличии): ---

Издание входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition или по SJR (принадлежность издания к Q1 в Scopus определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>):

нет

2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

J. Coord. Chem. 2020, V. 73. P. 3038.

Месяц и год публикации: ---

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):
<https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00958972.2020.1837785>

2.8. DOI (при наличии)

<https://doi.org/10.1080/00958972.2020.1837785>

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

2.9. Принята в печать (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

Письмо из редакции или издательства с извещением об официальном принятии рукописи к публикации: ---

2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

да

2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

да

Пояснения о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда, как это отражено в публикации (в случаях, если в тексте публикации не отражено за счет каких источников выполнялись отдельные работы – пояснения о причинах отсутствия такой информации и о том, какие работы выполнялись не за счет гранта данного Фонда):

Теоретические исследования были выполнены мною в рамках работ по данному проекту (No. 19-73-00001), экспериментальные исследования были выполнены моими коллегами и финансировались из другого гранта.

В статье (в разделе Funding) это чётко указано: "This work was supported by the Russian Science Foundation, Grant Nos. 18-73-10040 (SAA, experimental part) and 19-73-00001 (ASN, theoretical investigation)".

2.16. Файл с текстом публикации

(для материалов в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФ; размер до 3 Мб в формате pdf)

скачать

2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

на русском языке: Mikherdov A.S., Novikov A.S., Boyarskiy V.P., Kukushkin V.Yu.

на английском языке: Mikherdov A.S., Novikov A.S., Boyarskiy V.P., Kukushkin V.Yu.

WoS Researcher ID (при наличии): <https://publons.com/researcher/L-5001-2015>

Scopus AuthorID (при наличии): <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=50262902200>

ORCID (при наличии): ---

В состав авторов публикации входит аспирант(ы) (интерн, ординатор, адъюнкт) очной формы обучения:
нет

2.2. Название публикации

The halogen bond with isocyano carbon reduces isocyanide odor

2.3. Год публикации

2020

2.4. Ключевые слова

Crystal engineering,
Halogen bonding, Noncovalent interactions, Isocyanide

2.5. Вид публикации

статья

2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

Nature Communications

ISSN (при наличии): ---

e-ISSN (при наличии): ---

ISBN (при наличии): ---

Издание входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition или по SJR (принадлежность издания к Q1 в Scopus определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>):

да

2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

Nat. Commun. 2020, V. 11. P. 2921.

Месяц и год публикации: ---

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):
<https://www.nature.com/articles/s41467-020-16748-x>

2.8. DOI (при наличии)

<https://doi.org/10.1038/s41467-020-16748-x>

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

2.9. Принята в печать (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

Письмо из редакции или издательства с извещением об официальном принятии рукописи к публикации: ---

2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

да

2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

да

Пояснения о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда, как это отражено в публикации (в случаях, если в тексте публикации не отражено за счет каких источников выполнялись отдельные работы – пояснения о причинах отсутствия такой информации и о том, какие работы выполнялись не за счет гранта данного Фонда):

Теоретические исследования были выполнены мною в рамках работ по данному проекту (№. 19-73-00001), экспериментальные исследования были выполнены моими коллегами и финансировались из другого гранта.

В статье (в разделе Acknowledgements) это чётко указано: "This work was supported by the Russian Science Foundation. Experimental part was supported by project 19-13-00008, whereas the theoretical calculations were conducted as a part of the project 19-73-00001. Physicochemical studies were performed at the Center for Magnetic Resonance, Center for X-ray Diffraction Studies, Center for Chemical Analysis and Materials Research, and Thermogravimetric and Calorimetric Research Center (all belonging to Saint Petersburg State University)."

2.16. Файл с текстом публикации

(для материалов в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФИ; размер до 3 Мб в формате pdf)

скачать

2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

на русском языке: Nenajdenko V.G., Shikhaliyev N.G., Maharramov A.M., Bagirova K.N., Suleymanova G.T., Novikov A.S., Khrustalev V.N., Tskhovrebov A.G.

на английском языке: Nenajdenko V.G., Shikhaliyev N.G., Maharramov A.M., Bagirova K.N., Suleymanova G.T., Novikov A.S., Khrustalev V.N., Tskhovrebov A.G.

WoS Researcher ID (при наличии): <https://publons.com/researcher/L-5001-2015>

Scopus AuthorID (при наличии): <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorid=50262902200>

ORCID (при наличии): ---

В состав авторов публикации входит аспирант(ы) (интерн, ординатор, адъюнкт) очной формы обучения:

нет

2.2. Название публикации

Halogenated diazabutadiene dyes: synthesis, structures, supramolecular features, and theoretical studies

2.3. Год публикации

2020

2.4. Ключевые слова

non-covalent interactions; crystal engineering; halogen bonding; azo dyes; DFT; QTAIM

2.5. Вид публикации

статья

2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

Molecules

ISSN (при наличии): ---

e-ISSN (при наличии): ---

ISBN (при наличии): ---

Издание входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition или по SJR (принадлежность издания к Q1 в Scopus определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>):

да

2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

Molecules 2020, V. 25. P. 5013.

Месяц и год публикации: ---

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):
<https://www.mdpi.com/1420-3049/25/21/5013>

2.8. DOI (при наличии)

<https://doi.org/10.3390/molecules25215013>

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

2.9. Принята в печать (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

Письмо из редакции или издательства с извещением об официальном принятии рукописи к публикации: ---

2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

да

2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

да

Пояснения о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда, как это отражено в публикации (в случаях, если в тексте публикации не отражено за счет каких источников выполнялись отдельные работы – пояснения о причинах отсутствия такой информации и о том, какие работы выполнялись не за счет гранта данного Фонда):

Теоретические исследования (квантовой-химические расчёты в рамках теории функционала плотности, а также анализ поверхностей Хиршфельда) были выполнены мною в рамках работ по данному проекту (№. 19-73-00001), экспериментальные исследования были выполнены моими коллегами и финансировались из других источников.

В статье (в разделе Funding) это чётко указано: "This work was performed under the support of the FRCCP RAS State task AAAA-A19-119012990175-9. A.S.N. is grateful to Russian Science Foundation for the support of his theoretical studies (project No. 19-73-00001). We acknowledge the RUDN University Program 5-100. V.G.N. is grateful to RFBR for the support (grant N 18-03-00791)."

2.16. Файл с текстом публикации

(для материалов в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФ; размер до 3 Мб в формате pdf)

скачать

4

2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

на русском языке: Sharutin V.V., Sharutina O.K., Novikov A.S., Adonin S.A.

на английском языке: Sharutin V.V., Sharutina O.K., Novikov A.S., Adonin S.A.

WoS Researcher ID (при наличии): <https://publons.com/researcher/L-5001-2015>

Scopus AuthorID (при наличии): <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorid=50262902200>

ORCID (при наличии): ---

В состав авторов публикации входит аспирант(ы) (интерн, ординатор, адъюнкт) очной формы обучения:

нет

2.2. Название публикации

Substituent-dependent reactivity of triarylantimony(III) toward I₂: isolation of [Ar₃SbI]⁺ salt

2.3. Год публикации

2020

2.4. Ключевые слова

noncovalent interactions, antimony, iodine

2.5. Вид публикации

статья

2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

New Journal of Chemistry

ISSN (при наличии): ---

e-ISSN (при наличии): ---

ISBN (при наличии): ---

Издание входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition или по SJR (принадлежность издания к Q1 в Scopus определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>):

да

2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

New J. Chem. 2020, V. 44. P. 14339.

Месяц и год публикации: ---

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):
<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2020/NJ/D0NJ02774J#!divAbstract>

2.8. DOI (при наличии)

<https://doi.org/10.1039/D0NJ02774J>

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

2.9. Принята в печать (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

Письмо из редакции или издательства с извещением об официальном принятии рукописи к публикации: ---

2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

да

2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

да

Пояснения о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда, как это отражено в публикации (в случаях, если в тексте публикации не отражено за счет каких источников выполнялись отдельные работы – пояснения о причинах отсутствия такой информации и о том, какие работы выполнялись не за счет гранта данного Фонда):

Теоретические исследования были выполнены мною в рамках работ по данному проекту (No. 19-73-00001), экспериментальные исследования были выполнены моими коллегами и финансировались из других источников.

В статье (в разделе Acknowledgements) это чётко указано: "The work was supported by Act 211 Government of the Russian Federation, contract No 02.A03.21.0011. ASN is grateful to the Russian Science Foundation for support of his theoretical studies of noncovalent interactions in 5 (Grant No. 19-73-00001). The authors thank Prof. Kukushkin (Saint Petersburg State University) for his valuable suggestions. Also, we kindly thank the Referee responsible for evaluation of the XRD part of this work for his/her criticism and suggestions and Dr P. A. Abramov (NIIC SB RAS) for his recommendations regarding the XRD part."

2.16. Файл с текстом публикации

(для материалов в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФИ; размер до 3 Мб в формате pdf)

скачать

2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

на русском языке: Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Kritchenkov A.S., Khrustalev V.N., Haukka M.

на английском языке: Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Kritchenkov A.S., Khrustalev V.N., Haukka M.

WoS Researcher ID (при наличии): <https://publons.com/researcher/L-5001-2015>

Scopus AuthorID (при наличии): <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorid=50262902200>

ORCID (при наличии): ---

В состав авторов публикации входит аспирант(ы) (интерн, ординатор, адъюнкт) очной формы обучения:
нет

2.2. Название публикации

Attractive halogen...halogen interactions in crystal structure of trans-dibromogold(III) complex

2.3. Год публикации

2020

2.4. Ключевые слова

halogen-halogen interactions; non-covalent interactions; supramolecular polymers

2.5. Вид публикации

статья

2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

Zeitschrift für Kristallographie – Crystalline Materials

ISSN (при наличии): ---

e-ISSN (при наличии): ---

ISBN (при наличии): ---

Издание входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition или по SJR (принадлежность издания к Q1 в Scopus определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>):

нет

2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

Z. Kristallogr. Cryst. Mater. 2020, V. 235. P. 477.

Месяц и год публикации: ---

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):
<https://www.degruyter.com/view/journals/zkri/235/10/article-p477.xml>

2.8. DOI (при наличии)

<https://doi.org/10.1515/zkri-2020-0045>

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

2.9. Принята в печать (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

Письмо из редакции или издательства с извещением об официальном принятии рукописи к публикации: ---

2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

да

2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

да

Пояснения о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда, как это отражено в публикации (в случаях, если в тексте публикации не отражено за счет каких источников выполнялись отдельные работы – пояснения о причинах отсутствия такой информации и о том, какие работы выполнялись не за счет гранта данного Фонда):

Теоретические исследования были выполнены мною в рамках работ по данному проекту (No. 19-73-00001), экспериментальные исследования были выполнены моими коллегами и финансировались из других источников.

В статье (в разделе Research funding) это четко указано: "This work was supported by RFBR and BRFB, project number 20-53-00006. ASN is grateful to RSF for the support of his theoretical studies (project No. 19-73-00001). We acknowledge the RUDN University Program 5-100. Funding for this research was provided by Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (award no. 075-03-2020-223 [FSSF-2020-0017])."

2.16. Файл с текстом публикации

(для материалов в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФИ; размер до 3 Мб в формате pdf)

скачать

6

2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

на русском языке: Jiménez-Grávalos F., Gallegos M., Pendás Á.M., Novikov A.S.

на английском языке: Jiménez-Grávalos F., Gallegos M., Pendás Á.M., Novikov A.S.

WoS Researcher ID (при наличии): <https://publons.com/researcher/L-5001-2015>

Scopus AuthorID (при наличии): <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorid=50262902200>

ORCID (при наличии): ---

В состав авторов публикации входит аспирант(ы) (интерн, ординатор, адъюнкт) очной формы обучения:

да

2.2. Название публикации

Challenging the electrostatic σ -hole picture of halogen bonding using minimal models and the interacting quantum atoms approach

2.3. Год публикации

2021

2.4. Ключевые слова

σ -hole, halogen bond, DFT

2.5. Вид публикации

статья

2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

Journal of Computational Chemistry

ISSN (при наличии): ---

e-ISSN (при наличии): ---

ISBN (при наличии): ---

Издание входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition или по SJR (принадлежность издания к Q1 в Scopus определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>):

да

2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

J. Comput. Chem. 2021, V. 42. P. 676.

Месяц и год публикации: ---

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):
<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/jcc.26488>

2.8. DOI (при наличии)

<https://doi.org/10.1002/jcc.26488>

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

2.9. Принята в печать (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

Письмо из редакции или издательства с извещением об официальном принятии рукописи к публикации: ---

2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

да

2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

да

Пояснения о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда, как это отражено в публикации (в случаях, если в тексте публикации не отражено за счет каких источников выполнялись отдельные работы – пояснения о причинах отсутствия такой информации и о том, какие работы выполнялись не за счет гранта данного Фонда):

Исследования были выполнены в рамках международного сотрудничества. Работа испанских коллег финансировалась из средств их фондов (Spanish MICINN, FICYT и European Union FEDER), моя работа - из средств РФФ.

В статье (в разделе Acknowledgements) это чётко указано: "Fernando Jiménez-Grávalos, Miguel Gallegos, and Angel Martín Pendás acknowledge the Spanish MICINN (grant PGC2018-095953-B-I00), the FICYT (grant FC-GRUPIN-IDI/2018/000177), and the European Union FEDER for financial support. Fernando Jiménez-Grávalos and Miguel Gallegos specially acknowledge the Spanish MICINN for predoctoral grants BES-2016-076986 and FPU19/02903, respectively. Alexander S.

2.16. Файл с текстом публикации

(для материалов в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФИ; размер до 3 Мб в формате pdf)

скачать

2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

на русском языке: Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Khrustalev V.N.

на английском языке: Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Khrustalev V.N.

WoS Researcher ID (при наличии): <https://publons.com/researcher/L-5001-2015>

Scopus AuthorID (при наличии): <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=50262902200>

ORCID (при наличии): ---

В состав авторов публикации входит аспирант(ы) (интерн, ординатор, адъюнкт) очной формы обучения:
нет

2.2. Название публикации

Identification of supramolecular dimers in the crystal structure of (Z)-1-(((5-fluoropyridin-2-yl)amino)methylene)naphthalen-2(1H)-one via C(sp²)–H⋯F hydrogen bonding: A combined experimental and theoretical study

2.3. Год публикации

2021

2.4. Ключевые слова

azomethines, imines, hydrogen bonding, weak interactions, DFT

2.5. Вид публикации

статья

2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

Журнал структурной химии

ISSN (при наличии): ---

e-ISSN (при наличии): ---

ISBN (при наличии): ---

Издание входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition или по SJR (принадлежность издания к Q1 в Scopus определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>):

нет

2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

ЖСХ, 2021, Т. 62. С. 490.

Месяц и год публикации: ---

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):
<https://jsc.niic.nsc.ru/article/69922/>

2.8. DOI (при наличии)

https://doi.org/10.26902/JSC_id69922

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

2.9. Принята в печать (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

Письмо из редакции или издательства с извещением об официальном принятии рукописи к публикации: ---

2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

да

2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

да

Пояснения о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда, как это отражено в публикации (в случаях, если в тексте публикации не отражено за счет каких источников выполнялись отдельные работы – пояснения о причинах отсутствия такой информации и о том, какие работы выполнялись не за счет гранта данного Фонда):

Теоретические исследования были выполнены мною в рамках работ по данному проекту (No. 19-73-00001), экспериментальные исследования были выполнены моими коллегами и финансировались из других источников.

В статье (в разделе Funding) это чётко указано: "We acknowledge RUDN University Program 5-100. This work was performed under the support of the FRCCP RAS State task, topic 0082-2019-0003. The Hirshfeld surface analysis, DFT calculations, and the QTAIM analysis were performed as a part of Russian Science Foundation project No. 19-73-00001."

2.16. Файл с текстом публикации

(для материалов в открытом доступе, можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РНФ; размер до 3 Мб в формате pdf)

скачать

Подпись руководителя проекта _____/А.С. Новиков/

Итоговый отчет о выполнении проекта
№ 19-73-00001

«Теоретические исследования нековалентных взаимодействий в химических системах, перспективных для нужд катализа, материаловедения и медицины»

(представляется в последний год практической реализации проекта вместе с отчетом о выполнении проекта)

5.1. Заявленный в проекте план работы на весь срок выполнения проекта, предлагаемые методы и подходы (в соответствии с исходной заявкой на участие в конкурсе)

Настоящий проект предполагает проведение комплексного и систематического теоретического изучения природы и энергетических характеристик нековалентных взаимодействий (например, водородных, галогенных, халькогенных, пниктогенных, тетрельных и семикоординационных связей; агостических и анагостических взаимодействий; стэкинга, анион-/катион-π взаимодействий; металлофильных взаимодействий) в модельных системах, построенных на основании экспериментальных данных, посредством проведения современных квантово-химических расчётов высокого уровня (*ab initio* и/или теории функционала плотности), а также применения ряда специальных методик: топологического анализа распределения электронной плотности в рамках формализма теории Бейдера (QTAIM); изучения влияния эффектов кристаллической упаковки на структуру изолированных молекулярных кластеров, стабилизированных слабыми взаимодействиями, с помощью анализа поверхностей Хиршфельда (Hirshfeld surface analysis); анализа натуральных связевых орбиталей и зарядов в рамках формализма теории Вейнхольда (NBO); анализа зарядового и энергетического разложения в рамках формализма теорий Френкинга и Морокумы (CDA и EDA, соответственно), при необходимости, возможно количественное определение относительных вкладов сигма-дониорования от лиганда к металлу и обратного пи-дониорования от металла к лиганду; изучения молекулярных электростатических потенциалов и определения областей, наиболее подверженных нуклеофильным/электрофильным/радикальным атакам, расчёта функций Фукуи; расчёта адиабатических и вертикальных энергий диссоциации супрамолекулярных ансамблей и последующей коррекции значений этих энергий с учётом суперпозиционной ошибки базисного набора по методике Бойса–Бернарди (BSSE correction); расчёта термодинамических параметров, в частности, энтальпий образования, с помощью метода изодесмических реакций; использования теоретической модели принципа жёстких и мягких кислот и оснований (HSAB principle theoretical model) для поиска различных корреляционных зависимостей между теоретически рассчитанными (химический потенциал; жёсткость и мягкость; глобальные индексы электрофильности и нуклеофильности; максимальное количество электронного заряда, которое электрофильная система может принять; статический перенос заряда «нуклеофил → электрофил») и экспериментально наблюдаемыми (длины контактов; спектральные характеристики; проводимость; магнитные и фотофизические свойства) параметрами. Кроме того, планируется теоретически изучить относительную стабильность различных неорганических, органических, металлоорганических и координационных соединений, являющихся строительными блоками для создания супрамолекулярных систем, их структурные особенности, колебательные частоты, конформационные переходы и барьеры вращения функциональных групп, орбитальные и зарядовые факторы. В случае изучения модельных систем с открытой электронной оболочкой, может быть проведена проверка степени чистоты спинового состояния и количественное определение доли спиновой примеси. В случае необходимости учёта эффектов влияния растворителя на геометрические особенности супрамолекулярных ассоциатов предполагается использование современных сольватационных моделей (например, PCM, CPCM, IPCM, SMD) и/или явный учёт молекул растворителя в составе моделируемой системы.

В рамках данного проекта возможно также изучение механизмов различных химических реакций и их движущих сил, кинетических и термодинамических факторов. Планируется выполнить полную оптимизацию структур исходных соединений, интермедиатов и продуктов реакций, а также переходных состояний, для того, чтобы изучить энергетику и активационные барьеры соответствующих превращений. Доказательство локализации корректного минимума или седловой точки на поверхности потенциальной энергии будет выполнено с помощью анализа матрицы гессиана. Изучение природы переходных состояний будет выполнено с помощью анализа векторов, сопряжённых с мнимой частотой в рассчитанном колебательном спектре, и/или с помощью расчёта внутренней координаты реакции по методу Гонсалеса-Шлегеля. При необходимости, будет изучена синхронность реакций.

В разделе 4.7 заявки подробно изложен имеющийся у заявителя научный задел по проекту - на протяжении всего срока выполнения проекта планируется вести параллельную работу по всем изложенным там направлениям.

В результате проведения исследований по проекту предполагается: (1) изучить новые типы нековалентных

взаимодействий (водородных, галогенных, халькогенных, пниктогенных, тетрельных и семикоординационных связей; агостических и анагостических взаимодействий; стэкинга, анион-/катион-π взаимодействий; металлофильных взаимодействий и др.) в различных неорганических, органических, металлоорганических и координационных соединениях и супрамолекулярных ассоциатах на их основе, выявить главные факторы и общие закономерности, ответственные за их появление; (2) понять природу этих межмолекулярных и внутримолекулярных контактов, дать количественную оценку их энергии, найти корреляции между теоретически рассчитанными параметрами нековалентных взаимодействий и реально наблюдаемыми свойствами изучаемых химических систем; (3) использовать полученные знания для поиска новых оригинальных путей направленного супрамолекулярного дизайна – создания кластеров, цепочек, сетей и каркасных структур в жидкой и твёрдой фазах.

5.2. Содержание фактически проделанной работы, полученные результаты (за все годы, не более 10 стр.)

В результате реализации научного проекта РФФ № 19-73-00001 "Теоретические исследования нековалентных взаимодействий в химических системах, перспективных для нужд катализа, материаловедения и медицины" наибольший объём работ был сфокусирован на главной цели проекта – теоретических исследованиях нековалентных взаимодействий (изучение их природы и энергетики, качественное и количественное описание данного феномена) в химических системах, перспективных для нужд катализа, материаловедения и медицины (в различных неорганических, органических, металлоорганических и координационных соединениях и супрамолекулярных ассоциатах на их основе).

Ниже приведён краткий перечень основных полученных результатов.

1) Совместно с научной группой наших коллег из Института неорганической химии имени А. В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия (С. А. Адонин, В. П. Федин) было проведено экспериментально-теоретическое исследование пяти новых координационных соединений $Sb(V)$: $Cat[SbBr_6]$ ($Cat = 1,3,4-MePy^+$, $1,4-MePy^+$) и $Cat_2\{[SbBr_6](Br_3)\}$ ($Cat = 1,2-MePy^+$, $1-Et-2-MePy^+$, $1-Et-4-MePy^+$), потенциально перспективных для создания инновационных функциональных материалов для нужд электроники и фотовольтаики. Данные новые координационные соединения были экспериментально охарактеризованы нашими коллегами в твёрдой фазе, посредством рентгеноструктурного и термогравиметрического анализов, а природа и энергетические характеристики нековалентных взаимодействий $Br \cdots Br$ в этих соединениях, отвечающих за их супрамолекулярную организацию, были изучены мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/DZP-DKH) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM), а также вычисления порядков связей (Wiberg bond indices) данных нековалентных контактов в рамках формализма натуральных связевых орбиталей (Natural Bond Orbital partitioning scheme). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Adonin S.A., Bondarenko M.A., Novikov A.S., Plyusnin P.E., Korolkov I.V., Sokolov M.N., Fedin V.P. "Five new Sb(V) bromide complexes and their polybromide derivatives with pyridinium-type cations: structures, thermal stability and features of halogen...halogen contacts in solid state" // Inorg. Chim. Acta 2020, V. 502. P. 119278.].

2) Феномен наличия галогенных связей $X \cdots O$ ($X = Cl, Br, I$) (природа и энергетические характеристики данных нековалентных взаимодействий), ответственных за супрамолекулярную организацию в твёрдой фазе изоструктурных координационных соединений $[(Bu_4N)_2\{[Ag(L)(DMF)]_2Mo_8O_{26}\}]$ ($L = 3-chloro-$, $3-bromo-$, $3-iodopyridine$), перспективных для нужд материаловедения, синтезированных и всесторонне охарактеризованных с помощью рентгеноструктурных, спектроскопических и хроматографических экспериментальных методов в научной группе наших коллег из Института неорганической химии имени А. В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия (П. А. Абрамов, М. Н. Соколов), был изучен мною с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/DZP-DKH) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM), а также вычисления порядков связей (Wiberg bond indices) данных нековалентных контактов в рамках формализма натуральных связевых орбиталей (Natural Bond Orbital partitioning scheme). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Chupina A.V., Shayarov V.R., Novikov A.S., Volchek V.V., Benassi E., Abramov P.A., Sokolov M.N. "[AgL]2Mo8O26)n- complexes: a combined experimental and theoretical study" // Dalton Trans. 2020, V. 49. P. 1522.].

3) Мною было проведено теоретическое исследование (квантово-химические расчёты в рамках теории функционала плотности и топологический анализ распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM)) природы и

энергетических характеристик редкого типа межмолекулярных водородных связей $C(sp^2)-H\cdots Hal$, а также слабых межмолекулярных нековалентных взаимодействий $N-H\cdots Ph$, ответственных за формирование 1D супрамолекулярных полимерных цепочек в кристалле новых дихлороосазоновых комплексов палладия(II). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Repina O.V., Novikov A.S., Khoroshilova O.V., Kritchenkov A.S., Vasin A.A., Tskhovrebov A.G. "Lasagna-like supramolecular polymers derived from the PdII osazone complexes via $C(sp^2)-H\cdots Hal$ hydrogen bonding" // *Inorg. Chim. Acta* 2020, V. 502. P. 119378.].

4) Природа и энергетика координационных и семикоординационных связей, а также стэкинг-взаимодействий в кристалле комплексных соединений серебра(I) с 8-фенилхинолиновыми лигандами, перспективных в качестве катализаторов различных процессов Csp^3-N функционализации, а также различных химических реакций с участием субстратов с $C=C$ и $C\equiv C$ связями, были изучены посредством квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности ($\omega B97XD/x2c-TZVPPall$) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM), а также вычисления порядков связей (Wiberg bond indices) данных контактов в рамках формализма натуральных связевых орбиталей (Natural Bond Orbital partitioning scheme). Различные межмолекулярные взаимодействия в твёрдой фазе были также дополнительно исследованы с помощью анализа поверхностей Хиршфельда для асимметрической единицы в кристалле – можно констатировать, что наибольший вклад в кристаллическую упаковку данного комплексного соединения вносят межмолекулярные взаимодействия с участием атомов водорода ($H-H$, $C-H$, $F-H$ и $O-H$). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Bolotin D.S., Soldatova N.S., Demakova M.Y., Novikov A.S., Ivanov D.M., Aliyarova I.S., Sapegin A., Krasavin M. "Pentacoordinated silver(I) complex featuring 8-phenylquinoline ligands: interplay of coordination bonds, semicoordination, and stacking interactions" // *Inorg. Chim. Acta* 2020, V. 504. P. 119453.].

5) Природа и энергетика координационных и семикоординационных связей $Ni\cdots I$, галогенных связей и $Ir\cdots \pi$ взаимодействий в аддуктах плоскоквадратных диоксиматных комплексов никеля(II) $[Ni(bqoxH)_2]$ ($bqoxH_2 = o$ -benzoquinonedioxime) с иодом и полииодидными анионами (редокс-активные системы, перспективные для создания инновационных материалов с проводниковыми или полупроводниковыми свойствами) были изучены мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/DZP-DKH) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM), а также с помощью специализированного программного пакета CrystalExplorer на базе результатов рентгеноструктурных исследований. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Efimenko Z.M., Novikov A.S., Ivanov D.M., Piskunov A.V., Vereshchagin A.A., Levin O.V., Bokach N.A., Kukushkin V.Yu. "The (dioximate)NiII/I2 system: ligand oxidation and binding modes of triiodide species" // *Inorg. Chem.* 2020, V. 59. P. 2316.].

6) Теоретически (с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/DZP-DKH) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM), а также вычисления порядков связей (Wiberg bond indices) в рамках формализма натуральных связевых орбиталей (Natural Bond Orbital partitioning scheme)) мною были изучены природа и энергетика нековалентных взаимодействий $I\cdots I$ в кристаллах солей производных пиридина с трииодидными анионами $CatI_3$ ($Cat = 1,2-MePy$ и $1,2,6-MePy$), что даёт понимание о движущих силах супрамолекулярной организации этих систем и открывает возможности для кристаллохимического дизайна на основе данных билдинг-блоков. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Usoltsev A.N., Novikov A.S., Kolesov B.A., Chernova K.V., Plyusnin P.E., Fedin V.P., Sokolov M.N., Adonin S.A. "Halogen \cdots halogen contacts in triiodide salts of pyridinium-derived cations: theoretical and spectroscopic studies" // *J. Mol. Struct.* 2020, V. 1209. P. 127949.].

7) С помощью проведения квантово-химических расчётов мною было показано, что внутримолекулярные водородные связи $N-H\cdots Cl$ стабилизируют транс-конфигурацию карбенового комплекса палладия(II), который может являться катализатором важнейших органических реакций кросс-сочетания – реакций Сузуки, Хека, Соногаширы и др. Различные межмолекулярные нековалентные взаимодействия в твёрдой фазе были также дополнительно исследованы с помощью анализа поверхностей Хиршфельда для полученной кристаллической структуры этого карбенового комплекса палладия(II) – можно констатировать, что наибольший вклад в кристаллическую упаковку данного комплексного соединения вносят межмолекулярные взаимодействия с участием атомов водорода (главным образом, $H-H$, $C-H$, $Cl-H$). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Mikhaylov V.N., Sorokoumov V.N., Novikov A.S., Melnik M.V., Tskhovrebov A.G., Balova I.A. "Intramolecular hydrogen bonding stabilizes trans-configuration in a mixed carbene/isocyanide PdII complexes" // *J. Organomet. Chem.* 2020, V. 912. P. 121174.].

8) С помощью проведения квантово-химических расчётов высокого уровня (ω B97XD/6-31++G**) мною было показано, что квази-циклическая конформация N-ацилмочевин (органических соединений, находящихся широкое применение в материаловедении [гели, нанотрубки, нанолисты, полимеры с нелинейными оптическими свойствами], катализе реакций нуклеофильного раскрытия цикла в эпоксидах и фармакологической индустрии [прекурсоры для антидиабетических, противоопухолевых и противовоспалительных препаратов]) определяется внутримолекулярными водородными связями, стабилизированными электронной делокализацией (resonance-assisted hydrogen bonding), в то время как их димеризация в твёрдой фазе происходит за счёт образования межмолекулярных водородных связей N–H•••O и C–H•••O. Природа и энергетические характеристики данных нековалентных взаимодействий были изучены с помощью топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM) и вычисления порядков связей (Wiberg bond indices) соответствующих контактов в рамках формализма натуральных связевых орбиталей (Natural Bond Orbital partitioning scheme). Различные межмолекулярные нековалентные взаимодействия в твёрдой фазе были также дополнительно исследованы с помощью анализа поверхностей Хиршфельда для полученных кристаллических структур N-ацилмочевин – можно констатировать, что наибольший вклад в кристаллическую упаковку данных соединений вносят межмолекулярные взаимодействия с участием атомов водорода (H–H, F–H, C–H, O–H). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Il'in M.V., Lesnikova L.A., Bolotin D.S., Novikov A.S., Suslonov V.V., Kukushkin V.Yu. "One-pot route to N-acyl ureas: a formal four-component hydrolytic reaction involving aminonitrones and isocyanide dibromides" // New J. Chem. 2020, V. 44. P. 1253.].

9) В кристаллической структуре гетеролептических биядерных иодоацетатных комплексов меди(II) с 3-бромпиридином $[Cu_2(IOAc)_4(3-BrPy)_2]$, синтезированных нашими коллегами из Института неорганической химии имени А. В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия (С. А. Адонин, В. П. Федин) были обнаружены специфические нековалентные взаимодействия I•••I и Br•••I, ведущие к образованию супрамолекулярных полимеров. Природа и энергетические характеристики данных нековалентных взаимодействий были изучены мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/DZP-DKH) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Адонин С.А., Новиков А.С., Федин В.П. "Гетеролептические биядерные иодоацетатные комплексы меди(II) с 3-бромпиридином и 4-этилпиридином: кристаллические структуры и особенности контактов галоген•••галоген" // Коорд. хим. 2020, Т. 46. С. 112.].

10) Реакцией раствора Sb_2O_3 в HBr в присутствии Br_2 с раствором 2,6-дибромпиридина (2,6-BrPy) в HBr нашими коллегами из Института неорганической химии имени А. В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия (С. А. Адонин, В. П. Федин) был получен супрамолекулярный полибромид-бромантимонат $(2,6-BrPy)_3[SbBr_6]\{(Br_2)Br\} \cdot 2H_2O$ (растущий интерес к такого рода галогенидным комплексам р-элементов в значительной степени связан с возможностью их использования в качестве компонентов солнечных батарей так называемого перовскитного типа), его структура была определена методом рентгеноструктурного анализа и было обнаружено, что его супрамолекулярная организация в твёрдой фазе определяется наличием нековалентных взаимодействий $Br \cdot \cdot \cdot Br$. Природа и энергетика нековалентных взаимодействий $Br \cdot \cdot \cdot Br$ в данном кристалле были изучены мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/DZP-DKH) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Бондаренко М.А., Адонин С.А., Новиков А.С., Соколов М.Н., Федин В.П. "Супрамолекулярный полибромид-бромантимонат(V) (2,6-BrPyH) $_3[SbBr_6]\{(Br_2)Br\} \cdot 2H_2O$: особенности контактов галоген•••галоген в кристаллической структуре" // Коорд. хим. 2020, Т. 46, С. 264.].

11) Кроме того, в соответствии с заявкой, были дополнительно проведены следующие побочные теоретические исследования: изучен механизм и движущие силы, кинетические и термодинамические факторы протекания реакций регио- и стереоселективного циклоприсоединения N-аллил замещённых полициклических производных изоиндол-1,3-диона с нитронами, приводящих к образованию изоксазолидиновых гетероциклов, перспективных для получения фармацевтических препаратов, обладающих ингибирующей активностью против вируса гриппа H1N1. Реакционная способность этих соединений была проинтерпретирована с точки зрения теории граничных молекулярных орбиталей, индексов глобальной электрофильности и нуклеофильности, а также функций Фукуи. Для модельной реакции циклоприсоединения была выполнена полная оптимизация геометрии структур исходных соединений, переходных состояний и продуктов реакции (8 изомерных форм), для того, чтобы изучить энергетику и активационные барьеры соответствующих превращений. Доказательство локализации корректного минимума или седловой точки на поверхности потенциальной энергии осуществлялось с помощью анализа матрицы гессиаана. Изучение природы переходных состояний производилось с помощью анализа векторов, сопряжённых с мнимой частотой в рассчитанном

колебательном спектре и с помощью расчёта внутренней координаты реакции по методу Гонсалеса-Шлегеля. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Efremova M.M., Molchanov A.P., Novikov A.S., Starova G.L., Muryleva A.A., Slita A.V., Zarubaev V.V. "1,3-Dipolar cycloaddition of N-allyl substituted polycyclic derivatives of isoindole-1,3-dione with nitrones and nitrile oxides: An experimental and theoretical investigation" // Tetrahedron 2020, V. 76. P. 131104.].

12) Мною, с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/DZP-DKH), топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM), расчёта молекулярных орбиталей и распределения молекулярного электростатического потенциала, была теоретически изучена природа катиона [(2-MeO-5-BrPh)3Sb]⁺ как перспективного билдинг-блока для супрамолекулярного дизайна материалов на основе галогенных связей, а также потенциального органического катализатора, работающего за счёт нековалентных взаимодействий. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Sharutin V.V., Sharutina O.K., Novikov A.S., Adonin S.A. "Substituent-dependent reactivity of triarylantimony(III) toward I2: isolation of [Ar3Sb]⁺ salt" // New J. Chem. 2020, V. 44. P. 14339.].

13) Мною был теоретически изучен (квантово-химические расчёты в рамках теории функционала плотности и топологический анализ распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM)) феномен галогенных связей с участием галогенированных бензолов и неподелённой электронной пары атома углерода в молекуле изоцианида. Такие нековалентные взаимодействия существенно снижают неприятный запах изоцианидов, что потенциально может облегчать работу с данным реагентами в лаборатории. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Mikherdov A.S., Novikov A.S., Boyarskiy V.P., Kukushkin V.Yu. "The halogen bond with isocyanate carbon reduces isocyanide odor" // Nat. Commun. 2020, V. 11. P. 2921.].

14) Были теоретически изучены различные нековалентные взаимодействия галоген...галоген в кристаллах серии галогенированных ароматических дихлородиазидиенов (достаточно редкий класс азо-красителей). Природа данных нековалентных взаимодействий была изучена мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/3-211++G**), топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM) и расчёта распределения молекулярного электростатического потенциала в модельных системах, а также анализа поверхностей Хиршфельда с помощью специализированного программного пакета CrystalExplorer на базе результатов рентгеноструктурных исследований. Было показано, что за счёт таких нековалентных взаимодействий можно управлять особенностями кристаллической упаковки и супрамолекулярной организацией в твёрдой фазе. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Nenajdenko V.G., Shikhaliyev N.G., Maharramov A.M., Bagirova K.N., Suleymanova G.T., Novikov A.S., Khrustalev V.N., Tskhovrebov A.G. "Halogenated diazabutadiene dyes: synthesis, structures, supramolecular features, and theoretical studies" // Molecules 2020, V. 25. P. 5013.].

15) Совместно с научной группой наших коллег из Института неорганической химии имени А. В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия (С. А. Адонин, М. Н. Соколов, В. П. Федин и др.) было проведено экспериментально-теоретическое исследование стабилизации декабромид-аниона {Br₁₀}²⁻ в структуре бромидного комплекса Sb(V) (4-MePyC₃)₂{[SbBr₆]₂{Br₁₀}} (4-MePyC₃ = 1,1'-(пропан-1,3-диил)-бис(4-метилпиридин)-1-иум дикатион) (потенциально перспективное соединение для создания инновационных функциональных материалов для нужд электроники и фотовольтаики). Природа и энергетические характеристики нековалентных взаимодействий Br...Br в данном соединении, отвечающих за супрамолекулярную организацию, были изучены мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Bondarenko M.A., Novikov A.S., Fedin V.P., Sokolov M.N., Adonin S.A. "The stabilization of decabromide {Br₁₀}²⁻ anion in the structure of Sb(V) bromide complex" // J. Coord. Chem. 2020, V. 73. P. 3038.].

16) Совместно с научной группой наших коллег из University of Oviedo, Овьедо, Испания (профессор Angel Martin Pendás и его сотрудники) было проведено фундаментальное теоретическое исследование идеализированных простейших модельных систем, способных участвовать в формировании таких нековалентных взаимодействий как галогенные связи. Было показано, что во многих случаях общее электростатическое взаимодействие между взаимодействующими частицами может быть дестабилизирующим, и делокализация электронной плотности и эффекты переноса заряда могут быть весьма существенными для стабилизации таких супрамолекулярных систем. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Jiménez-Grávalos F., Gallegos M., Pendás Á. M., Novikov A.S.

“Challenging the electrostatic σ -hole picture of halogen bonding using minimal models and the interacting quantum atoms approach” // J. Comput. Chem. 2021, V. 42. P. 676.].

17) Совместно с научной группой наших коллег из ИХФ РАН, РУДН и ИОХ РАН (А. Г. Цховребов, В. Н. Хрусталева) было проведено экспериментально-теоретическое исследование супрамолекулярных димеров в кристаллической структуре (Z)-1-(((5-флюоропиридин-2-ил)амино)метилена)нафтален-2(1H)-она (вещество с потенциально ценными фотохромными/термохромными, антибактериальными и противоопухолевыми свойствами), связанных за счёт водородных связей C(sp²)-H...F. Природа данных нековалентных взаимодействий была изучена мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (ωB97XD/6-311++G**) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM), а также анализа поверхностей Хиршфельда с помощью специализированного программного пакета CrystalExplorer на базе результатов рентгеноструктурных исследований. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Khrustalev V.N. “Identification of supramolecular dimers in the crystal structure of (Z)-1-(((5-fluoropyridin-2-yl)amino)methylene)naphthalen-2(1H)-one via C(sp²)-H...F hydrogen bonding: a combined experimental and theoretical study” // Журнал структурной химии, 2021, Т. 62. С. 490.].

18) Совместно с научной группой наших коллег из ИХФ РАН, РУДН и ИОХ РАН (А. Г. Цховребов, В. Н. Хрусталева и др.), а также профессором Matti Haukka из University of Jyväskylä, Ювяскюля, Финляндия, было проведено экспериментально-теоретическое исследование супрамолекулярных 1D полимеров на основе координационных соединений золота(III) (комплекс trans-dibromogold(III)t-Bu-Xantphos). Природа и энергетика нековалентных взаимодействий Au-Br...Br-Au, за счёт которых образуются 1D цепочки в кристаллической фазе, были изучены мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (ωB97XD/DZP-DKH) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Kritchenkov A.S., Khrustalev V.N., Haukka M. “Attractive halogen...halogen interactions in crystal structure of trans-dibromogold(III) complex” // Z. Kristallogr. Cryst. Mater. 2020, V. 235. P. 477.].

Достигнутые научные результаты были представлены на следующих международных научных мероприятиях:

Первый год реализации проекта:

- 1) 2–6 сентября 2019 г. (Лиссабон, Португалия) - 1st International Conference on Noncovalent Interactions (ICNI 2019) (стендовый доклад на тему: “Theoretical studies of noncovalent interactions in chemical systems promising for catalysis, materials science, and medicine”) [<https://icni2019.eventos.chemistry.pt/>]
- 2) 9–13 сентября 2019 г. (Санкт-Петербург, Россия) - Mendeleev 2019, the XI International Conference on Chemistry for Young Scientists (пленарный доклад на тему: “Theoretical studies in organometallic and coordination chemistry: reactivity, catalysis, and non-covalent interactions”) [<http://mendeleev.spbu.ru/>]
- 3) 20–23 октября 2019 г. (Ливерпуль, Великобритания) - Workshop “Dynamic self-assembly and quorum effects in chemistry and biology predicted by non-linear modelling algorithms” (устное выступление на тему: “Computer modeling in organometallic chemistry: reactivity, catalysis, and noncovalent interactions”) [<http://dysa.itmo.ru/>]

Второй год реализации проекта:

- 1) 10–11 декабря 2020 г. - First Russian-German Virtual Conference on Interdisciplinary Natural Sciences: An Interactive Online G-RISC Event (устный доклад на тему: “Computer modeling of non-covalent interactions in chemical systems promising for materials science, catalysis and medicine”) [https://www.g-risc.org/conferences_workshops/Digital-and-Online-Events/Virtual-Conference-2020.html]
- 2) 26–27 апреля 2021 г. - Онлайн-симпозиум по вычислительной химии памяти А. А. Грановского (устный доклад на тему: “Computer modeling in organometallic and coordination chemistry: reactivity and non-covalent interactions”) [<https://chemport.ru/webconference2021/>]

Таким образом, запланированная работа по проекту РНФ № 19-73-00001 “Теоретические исследования нековалентных взаимодействий в химических системах, перспективных для нужд катализа, материаловедения и медицины” выполнена в полном объеме, и имеет место существенное перевыполнение плана. Все задачи проекта успешно решены. По итогам выполнения проекта было опубликовано 18 статей в ведущих профильных международных научных журналах

(Nat. Commun.; Inorg. Chem.; Dalton Trans.; J. Comput. Chem.; Molecules; New J. Chem.; Tetrahedron; Inorg. Chim. Acta; J. Organomet. Chem.; J. Mol. Struct.; J. Coord. Chem.; Z. Kristallogr. Cryst. Mater.; Коорд. хим.; Журнал структурной химии). Результаты проведённых исследований докладывались и обсуждались на многочисленных международных научных мероприятиях в виде пленарного, устных и стендового докладов.

Все планируемые работы выполнены полностью:

да

5.3. Основные результаты выполнения проекта (не более 10 стр.)

1) Совместно с научной группой наших коллег из Института неорганической химии имени А. В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия (С. А. Адонин, В. П. Федин) было проведено экспериментально-теоретическое исследование пяти новых координационных соединений Sb(V): Cat[SbBr₆] (Cat = 1,3,4-MePy⁺, 1,4-MePy⁺) и Cat₂{[SbBr₆](Br₃)} (Cat = 1,2-MePy⁺, 1-Et-2-MePy⁺, 1-Et-4-MePy⁺), потенциально перспективных для создания инновационных функциональных материалов для нужд электроники и фотовольтаики. Данные новые координационные соединения были экспериментально охарактеризованы нашими коллегами в твёрдой фазе, посредством рентгеноструктурного и термогравиметрического анализов, а природа и энергетические характеристики нековалентных взаимодействий Br•••Br в этих соединениях, отвечающих за их супрамолекулярную организацию, были изучены мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/DZP-DKH) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM), а также вычисления порядков связей (Wiberg bond indices) данных нековалентных контактов в рамках формализма натуральных связевых орбиталей (Natural Bond Orbital partitioning scheme). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Adonin S.A., Bondarenko M.A., Novikov A.S., Plyusnin P.E., Korolkov I.V., Sokolov M.N., Fedin V.P. "Five new Sb(V) bromide complexes and their polybromide derivatives with pyridinium-type cations: structures, thermal stability and features of halogen•••halogen contacts in solid state" // Inorg. Chim. Acta 2020, V. 502. P. 119278.].

2) Феномен наличия галогенных связей X•••O (X = Cl, Br, I) (природа и энергетические характеристики данных нековалентных взаимодействий), ответственных за супрамолекулярную организацию в твёрдой фазе изоструктурных координационных соединений [(Bu₄N)₂{[Ag(L)(DMF)]₂Mo₈O₂₆] (L = 3-chloro-, 3-bromo-, 3-iodopyridine), перспективных для нужд материаловедения, синтезированных и всесторонне охарактеризованных с помощью рентгеноструктурных, спектроскопических и хроматографических экспериментальных методов в научной группе наших коллег из Института неорганической химии имени А. В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия (П. А. Абрамов, М. Н. Соколов), был изучен мною с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/DZP-DKH) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM), а также вычисления порядков связей (Wiberg bond indices) данных нековалентных контактов в рамках формализма натуральных связевых орбиталей (Natural Bond Orbital partitioning scheme). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Chupina A.V., Shayarov V.R., Novikov A.S., Volchek V.V., Benassi E., Abramov P.A., Sokolov M.N. "[[AgL]₂Mo₈O₂₆]_n- complexes: a combined experimental and theoretical study" // Dalton Trans. 2020, V. 49. P. 1522.].

3) Мною было проведено теоретическое исследование (квантово-химические расчёты в рамках теории функционала плотности и топологический анализ распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM)) природы и энергетических характеристик редкого типа межмолекулярных водородных связей C(sp²)-H•••Hal, а также слабых межмолекулярных нековалентных взаимодействий N-H•••Ph, ответственных за формирование 1D супрамолекулярных полимерных цепочек в кристалле новых дихлороосазоновых комплексов палладия(II). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Repina O.V., Novikov A.S., Khoroshilova O.V., Kritchenkov A.S., Vasin A.A., Tskhovrebov A.G. "Lasagna-like supramolecular polymers derived from the PdII osazone complexes via C(sp²)-H•••Hal hydrogen bonding" // Inorg. Chim. Acta 2020, V. 502. P. 119378.].

4) Природа и энергетика координационных и семикоординационных связей, а также стэкинг-взаимодействий в кристалле комплексных соединений серебра(I) с 8-фенилхинолиновыми лигандами, перспективных в качестве катализаторов различных процессов Csp³-H функционализации, а также различных химических реакций с участием субстратов с C=C и C≡C связями, были изучены посредством квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (ωB97XD/x2c-TZVPPall) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM), а также вычисления порядков связей (Wiberg bond indices) данных контактов в

рамках формализма натуральных связевых орбиталей (Natural Bond Orbital partitioning scheme). Различные межмолекулярные взаимодействия в твёрдой фазе были также дополнительно исследованы с помощью анализа поверхностей Хиршфельда для асимметрической единицы в кристалле – можно констатировать, что наибольший вклад в кристаллическую упаковку данного комплексного соединения вносят межмолекулярные взаимодействия с участием атомов водорода (H–H, C–H, F–H и O–H). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Bolotin D.S., Soldatova N.S., Demakova M.Y., Novikov A.S., Ivanov D.M., Aliyarova I.S., Sapegin A., Krasavin M. “Pentacoordinated silver(I) complex featuring 8-phenylquinoline ligands: interplay of coordination bonds, semicoordination, and stacking interactions” // *Inorg. Chim. Acta* 2020, V. 504. P. 119453.].

5) Природа и энергетика координационных и семикоординационных связей Ni^{II} , галогенных связей и Ir^{III} взаимодействий в аддуктах плоскоквадратных диоксиматных комплексов никеля(II) $[Ni(bqoxH)_2]$ ($bqoxH_2 = o$ -benzoquinonedioxime) с иодом и полииодидными анионами (редокс-активные системы, перспективные для создания инновационных материалов с проводниковыми или полупроводниковыми свойствами) были изучены мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/DZP-DKH) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM), а также с помощью специализированного программного пакета CrystalExplorer на базе результатов рентгеноструктурных исследований. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Efimenko Z.M., Novikov A.S., Ivanov D.M., Piskunov A.V., Vereshchagin A.A., Levin O.V., Bokach N.A., Kukushkin V.Yu. “The (dioximate)NiII/I2 system: ligand oxidation and binding modes of triiodide species” // *Inorg. Chem.* 2020, V. 59. P. 2316.].

6) Теоретически (с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/DZP-DKH) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM), а также вычисления порядков связей (Wiberg bond indices) в рамках формализма натуральных связевых орбиталей (Natural Bond Orbital partitioning scheme)) мною были изучены природа и энергетика нековалентных взаимодействий I^{III} в кристаллах солей производных пиридина с трииодидными анионами $CatI_3$ ($Cat = 1,2$ -MePy и $1,2,6$ -MePy), что даёт понимание о движущих силах супрамолекулярной организации этих систем и открывает возможности для кристаллохимического дизайна на основе данных билдинг-блоков. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Usoltsev A.N., Novikov A.S., Kolesov B.A., Chernova K.V., Plyusnin P.E., Fedin V.P., Sokolov M.N., Adonin S.A. “Halogen-halogen contacts in triiodide salts of pyridinium-derived cations: theoretical and spectroscopic studies” // *J. Mol. Struct.* 2020, V. 1209. P. 127949.].

7) С помощью проведения квантово-химических расчётов мною было показано, что внутримолекулярные водородные связи $N-H\cdots Cl$ стабилизируют транс-конфигурацию карбенового комплекса палладия(II), который может являться катализатором важнейших органических реакций кросс-сочетания – реакций Сузуки, Хека, Соногаширы и др. Различные межмолекулярные нековалентные взаимодействия в твёрдой фазе были также дополнительно исследованы с помощью анализа поверхностей Хиршфельда для полученной кристаллической структуры этого карбенового комплекса палладия(II) – можно констатировать, что наибольший вклад в кристаллическую упаковку данного комплексного соединения вносят межмолекулярные взаимодействия с участием атомов водорода (главным образом, H–H, C–H, Cl–H). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Mikhaylov V.N., Sorokoumov V.N., Novikov A.S., Melnik M.V., Tskhovrebov A.G., Balova I.A. “Intramolecular hydrogen bonding stabilizes trans-configuration in a mixed carbene/isocyanide PdII complexes” // *J. Organomet. Chem.* 2020, V. 912. P. 121174.].

8) С помощью проведения квантово-химических расчётов высокого уровня (ω B97XD/6-31++G**) мною было показано, что квази-циклическая конформация N-ацилмочевин (органических соединений, находящихся широкое применение в материаловедении [гели, нанотрубки, нанолисты, полимеры с нелинейными оптическими свойствами], катализе реакций нуклеофильного раскрытия цикла в эпоксидах и фармакологической индустрии [прекурсоры для антидиабетических, противоопухолевых и противовоспалительных препаратов]) определяется внутримолекулярными водородными связями, стабилизированными электронной делокализацией (resonance-assisted hydrogen bonding), в то время как их димеризация в твёрдой фазе происходит за счёт образования межмолекулярных водородных связей $N-H\cdots O$ и $C-H\cdots O$. Природа и энергетические характеристики данных нековалентных взаимодействий были изучены с помощью топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM) и вычисления порядков связей (Wiberg bond indices) соответствующих контактов в рамках формализма натуральных связевых орбиталей (Natural Bond Orbital partitioning scheme). Различные межмолекулярные нековалентные взаимодействия в твёрдой фазе были также дополнительно исследованы с помощью анализа поверхностей Хиршфельда для полученных кристаллических структур N-ацилмочевин – можно констатировать, что наибольший вклад в кристаллическую упаковку

данных соединений вносят межмолекулярные взаимодействия с участием атомов водорода (H–H, F–H, C–H, O–H). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Il'in M.V., Lesnikova L.A., Bolotin D.S., Novikov A.S., Suslonov V.V., Kukushkin V.Yu. "One-pot route to N-acyl ureas: a formal four-component hydrolytic reaction involving aminonitrones and isocyanide dibromides" // New J. Chem. 2020, V. 44. P. 1253.].

9) В кристаллической структуре гетеролептических биядерных иодоацетатных комплексов меди(II) с 3-бромпиридином $[Cu_2(IOAc)_4(3-BrPy)_2]$, синтезированных нашими коллегами из Института неорганической химии имени А. В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия (С. А. Адонин, В. П. Федин) были обнаружены специфические нековалентные взаимодействия $I \cdots I$ и $Br \cdots I$, ведущие к образованию супрамолекулярных полимеров. Природа и энергетические характеристики данных нековалентных взаимодействий были изучены мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/DZP-DKH) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Адонин С.А., Новиков А.С., Федин В.П. "Гетеролептические биядерные иодоацетатные комплексы меди(II) с 3-бромпиридином и 4-этилпиридином: кристаллические структуры и особенности контактов галоген \cdots галоген" // Коорд. хим. 2020, Т. 46. С. 112.].

10) Реакцией раствора Sb_2O_3 в HBr в присутствии Br_2 с раствором 2,6-дибромпиридина (2,6-BrPy) в HBr нашими коллегами из Института неорганической химии имени А. В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия (С. А. Адонин, В. П. Федин) был получен супрамолекулярный полибромид-бромостанонат $(2,6-BrPy)_3[SbBr_6]\{(Br_2)Br\} \cdot 2H_2O$ (растущий интерес к такого рода галогенидным комплексам р-элементов в значительной степени связан с возможностью их использования в качестве компонентов солнечных батарей так называемого перовскитного типа), его структура была определена методом рентгеноструктурного анализа и было обнаружено, что его супрамолекулярная организация в твёрдой фазе определяется наличием нековалентных взаимодействий $Br \cdots Br$. Природа и энергетика нековалентных взаимодействий $Br \cdots Br$ в данном кристалле были изучены мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/DZP-DKH) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Бондаренко М.А., Адонин С.А., Новиков А.С., Соколов М.Н., Федин В.П. "Супрамолекулярный полибромид-бромостанонат(V) (2,6-BrPy) $_3$ [SbBr $_6$]{(Br $_2$)Br}•2H $_2$ O: особенности контактов галоген \cdots галоген в кристаллической структуре" // Коорд. хим. 2020, Т. 46, С. 264.].

11) Кроме того, в соответствии с заявкой, были дополнительно проведены следующие побочные теоретические исследования: изучен механизм и движущие силы, кинетические и термодинамические факторы протекания реакций регио- и стереоселективного циклоприсоединения N-аллил замещённых полициклических производных изоиндол-1,3-диона с нитронами, приводящих к образованию изоксазолидиновых гетероциклов, перспективных для получения фармацевтических препаратов, обладающих ингибирующей активностью против вируса гриппа H1N1. Реакционная способность этих соединений была проинтерпретирована с точки зрения теории граничных молекулярных орбиталей, индексов глобальной электрофильности и нуклеофильности, а также функций Фукуи. Для модельной реакции циклоприсоединения была выполнена полная оптимизация геометрии структур исходных соединений, переходных состояний и продуктов реакции (8 изомерных форм), для того, чтобы изучить энергетику и активационные барьеры соответствующих превращений. Доказательство локализации корректного минимума или седловой точки на поверхности потенциальной энергии осуществлялось с помощью анализа матрицы гессиана. Изучение природы переходных состояний производилось с помощью анализа векторов, сопряжённых с мнимой частотой в рассчитанном колебательном спектре и с помощью расчёта внутренней координаты реакции по методу Гонсалеса-Шлегеля. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Efremova M.M., Molchanov A.P., Novikov A.S., Starova G.L., Muryleva A.A., Slita A.V., Zarubaev V.V. "1,3-Dipolar cycloaddition of N-allyl substituted polycyclic derivatives of isoindole-1,3-dione with nitrones and nitrile oxides: An experimental and theoretical investigation" // Tetrahedron 2020, V. 76. P. 131104.].

12) Мною, с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (M06/DZP-DKH), топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM), расчёта молекулярных орбиталей и распределения молекулярного электростатического потенциала, была теоретически изучена природа катиона $[(2-MeO-5-BrPh)_3Sb]^+$ как перспективного билдинг-блока для супрамолекулярного дизайна материалов на основе галогенных связей, а также потенциального органического катализатора, работающего за счёт нековалентных взаимодействий. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Sharutin V.V., Sharutina O.K., Novikov A.S., Adonin S.A. "Substituent-dependent reactivity of triarylantimony(III) toward I $_2$: isolation of

13) Мною был теоретически изучен (квантово-химические расчёты в рамках теории функционала плотности и топологический анализ распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM)) феномен галогенных связей с участием галогенированных бензолов и неподелённой электронной пары атома углерода в молекуле изоцианида. Такие нековалентные взаимодействия существенно снижают неприятный запах изоцианидов, что потенциально может облегчать работу с данным реагентами в лаборатории. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Mikherdov A.S., Novikov A.S., Boyarskiy V.P., Kukushkin V.Yu. "The halogen bond with isocyano carbon reduces isocyanide odor" // Nat. Commun. 2020, V. 11. P. 2921.].

14) Были теоретически изучены различные нековалентные взаимодействия галоген...галоген в кристаллах серии галогенированных ароматических дихлородиазидиенов (достаточно редкий класс азо-красителей). Природа данных нековалентных взаимодействий была изучена мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (B97XD/6-311++G**), топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM) и расчёта распределения молекулярного электростатического потенциала в модельных системах, а также анализа поверхностей Хиршфельда с помощью специализированного программного пакета CrystalExplorer на базе результатов рентгеноструктурных исследований. Было показано, что за счёт таких нековалентных взаимодействий можно управлять особенностями кристаллической упаковки и супрамолекулярной организацией в твёрдой фазе. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Nenajdenko V.G., Shikhaliev N.G., Maharramov A.M., Bagirova K.N., Suleymanova G.T., Novikov A.S., Khrustalev V.N., Tskhovrebov A.G. "Halogenated diazabutadiene dyes: synthesis, structures, supramolecular features, and theoretical studies" // Molecules 2020, V. 25. P. 5013.].

15) Совместно с научной группой наших коллег из Института неорганической химии имени А. В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия (С. А. Адонин, М. Н. Соколов, В. П. Федин и др.) было проведено экспериментально-теоретическое исследование стабилизации декабромид-аниона {Br10}2- в структуре бромидного комплекса Sb(V) (4-MePyC3)2{[SbBr6]2[Br10]} (4-MePyC3 = 1,1'(пропан-1,3-диил)-бис(4-метилпиридин)-1-иум дикатион) (потенциально перспективное соединение для создания инновационных функциональных материалов для нужд электроники и фотовольтаики). Природа и энергетические характеристики нековалентных взаимодействий Br...Br в данном соединении, отвечающих за супрамолекулярную организацию, были изучены мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Bondarenko M.A., Novikov A.S., Fedin V.P., Sokolov M.N., Adonin S.A. "The stabilization of decabromide {Br10}2- anion in the structure of Sb(V) bromide complex" // J. Coord. Chem. 2020, V. 73. P. 3038.].

16) Совместно с научной группой наших коллег из University of Oviedo, Овьедо, Испания (профессор Angel Martin Pendás и его сотрудники) было проведено фундаментальное теоретическое исследование идеализированных простейших модельных систем, способных участвовать в формировании таких нековалентных взаимодействий как галогенные связи. Было показано, что во многих случаях общее электростатическое взаимодействие между взаимодействующими частицами может быть дестабилизирующим, и делокализация электронной плотности и эффекты переноса заряда могут быть весьма существенными для стабилизации таких супрамолекулярных систем. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Jiménez-Grávalos F., Gallegos M., Pendás Á. M., Novikov A.S. "Challenging the electrostatic σ -hole picture of halogen bonding using minimal models and the interacting quantum atoms approach" // J. Comput. Chem. 2021, V. 42. P. 676.].

17) Совместно с научной группой наших коллег из ИХФ РАН, РУДН и ИОХ РАН (А. Г. Цховребов, В. Н. Хрусталева) было проведено экспериментально-теоретическое исследование супрамолекулярных димеров в кристаллической структуре (Z)-1-(((5-флюоропиридин-2-ил)амино)метил)нафтален-2(1H)-она (вещество с потенциально ценными фотохромными/термохромными, антибактериальными и противоопухолевыми свойствами), связанных за счёт водородных связей C(sp2)-H...F. Природа данных нековалентных взаимодействий была изучена мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (B97XD/6-311++G**) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM), а также анализа поверхностей Хиршфельда с помощью специализированного программного пакета CrystalExplorer на базе результатов рентгеноструктурных исследований. Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Khrustalev V.N. "Identification of supramolecular dimers in the crystal structure of (Z)-1-

((5-fluoropyridin-2-yl)amino)methylene)naphthalen-2(1H)-one via C(sp²)–H...F hydrogen bonding: a combined experimental and theoretical study" // Журнал структурной химии, 2021, Т. 62. С. 490.].

18) Совместно с научной группой наших коллег из ИХФ РАН, РУДН и ИОХ РАН (А. Г. Цховребов, В. Н. Хрусталеv и др.), а также профессором Matti Haukka из University of Jyväskylä, Ювяскюля, Финляндия, было проведено экспериментально-теоретическое исследование супрамолекулярных 1D полимеров на основе координационных соединений золота(III) (комплекс trans-dibromogold(III)t-Bu-Xantphos). Природа и энергетика нековалентных взаимодействий Au–Br...Br–Au, за счёт которых образуются 1D цепочки в кристаллической фазе, были изучены мною теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности (ω B97XD/DZP-DKH) и топологического анализа распределения электронной плотности по методу Бейдера (QTAIM). Результаты данного исследования подробно описаны и опубликованы в [Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Kritchenkov A.S., Khrustalev V.N., Haukka M. "Attractive halogen...halogen interactions in crystal structure of trans-dibromogold(III) complex" // Z. Kristallogr. Cryst. Mater. 2020, V. 235. P. 477.].

Все запланированные научные результаты достигнуты:

да

5.4. Описание выполненных работ и полученных научных результатов (в том числе степень выполнения проекта) для публикации на сайте РФФ

на русском языке (до 3 страниц текста, также указываются ссылки на информационные ресурсы в сети Интернет (url-адреса), посвященные проекту)

В результате реализации научного проекта РФФ № 19-73-00001 "Теоретические исследования нековалентных взаимодействий в химических системах, перспективных для нужд катализа, материаловедения и медицины" наибольший объём работ был сфокусирован на главной цели проекта – теоретических исследованиях нековалентных взаимодействий (изучение их природы и энергетики, качественное и количественное описание данного феномена) в химических системах, перспективных для нужд катализа, материаловедения и медицины (в различных неорганических, органических, металлоорганических и координационных соединениях и супрамолекулярных ассоциатах на их основе).

Основные полученные научные результаты:

- 1) Были теоретически изучены природа и энергетические характеристики нековалентных взаимодействий Br...Br, отвечающих за супрамолекулярную организацию новых координационных соединений Sb(V): Cat[SbBr₆] (Cat = 1,3,4-MePy+, 1,4-MePy+) и Cat₂[[SbBr₆](Br₃)] (Cat = 1,2-MePy+, 1-Et-2-MePy+, 1-Et-4-MePy+), потенциально перспективных для создания инновационных функциональных материалов для нужд электроники и фотовольтаики.
- 2) Был теоретически изучен феномен наличия галогенных связей X...O (X = Cl, Br, I) (природа и энергетические характеристики данных нековалентных взаимодействий), ответственных за супрамолекулярную организацию в твёрдой фазе изоструктурных координационных соединений [(Bu₄N)₂[[Ag(L)(DMF)]₂Mo₈O₂₆] (L = 3-chloro-, 3-bromo-, 3-iodopyridine), перспективных для нужд материаловедения.
- 3) Было проведено теоретическое исследование природы и энергетических характеристик редкого типа межмолекулярных водородных связей C(sp²)–H...Hal, а также слабых межмолекулярных нековалентных взаимодействий N–H...Ph, ответственных за формирование 1D супрамолекулярных полимерных цепочек в кристалле новых дихлороосазоновых комплексов палладия(II).
- 4) Природа и энергетика координационных и семикоординационных связей, а также стэкинг-взаимодействий в кристалле комплексных соединений серебра(I) с 8-фенилхинолиновыми лигандами, перспективных в качестве катализаторов различных процессов Csp³–H функционализации, а также различных химических реакций с участием субстратов с C=C и C≡C связями, были изучены посредством квантово-химических расчётов высокого уровня. Различные межмолекулярные взаимодействия в твёрдой фазе были также дополнительно исследованы с помощью анализа поверхностей Хиршфельда для асимметрической единицы в кристалле.
- 5) Природа и энергетика координационных и семикоординационных связей Ni...I, галогенных связей и Ir...π взаимодействий в аддуктах плоскоквадратных диоксиматных комплексов никеля(II) [Ni(bqoxH)₂] (bqoxH₂ = o-benzoquinonedioxime) с иодом и полииодидными анионами (редокс-активные системы, перспективные для создания инновационных материалов с проводниковыми или полупроводниковыми свойствами) были изучены теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня, а также с помощью специализированного программного пакета CrystalExplorer на базе результатов рентгеноструктурных исследований.
- 6) Теоретически были изучены природа и энергетика нековалентных взаимодействий I...I в кристаллах солей

производных пиридина с трийодидными анионами $CatI_3$ ($Cat = 1,2\text{-MePy}$ и $1,2,6\text{-MePy}$), что даёт понимание о движущих силах супрамолекулярной организации этих систем и открывает возможности для кристаллохимического дизайна на основе данных билдинг-блоков.

7) Было теоретически доказано, что внутримолекулярные водородные связи $N-H\cdots Cl$ стабилизируют транс-конфигурацию карбенового комплекса палладия(II), который может являться катализатором важнейших органических реакций кросс-сочетания – реакций Сузуки, Хека, Соногаширы и др. Различные межмолекулярные нековалентные взаимодействия в твёрдой фазе были также дополнительно исследованы с помощью анализа поверхностей Хиршфельда для полученной кристаллической структуры этого карбенового комплекса палладия(II).

8) Было теоретически доказано, что квази-циклическая конформация N-ацилмочевин (органических соединений), находящихся широкое применение в материаловедении [гели, нанотрубки, наноленты, полимеры с нелинейными оптическими свойствами], катализе реакций нуклеофильного раскрытия цикла в эпоксидах и фармакологической индустрии [прекурсоры для антидиабетических, противоопухолевых и противовоспалительных препаратов]) определяется внутримолекулярными водородными связями, стабилизированными электронной делокализацией (resonance-assisted hydrogen bonding), в то время как их димеризация в твёрдой фазе происходит за счёт образования межмолекулярных водородных связей $N-H\cdots O$ и $C-H\cdots O$. Природа и энергетические характеристики данных нековалентных взаимодействий были изучены с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня. Различные межмолекулярные нековалентные взаимодействия в твёрдой фазе были также дополнительно исследованы с помощью анализа поверхностей Хиршфельда для полученных кристаллических структур N-ацилмочевин.

9) В кристаллической структуре гетеролептических биядерных иодоацетатных комплексов меди(II) с 3-бромпиридином $[Cu_2(IOAc)_4(3\text{-BrPy})_2]$ были обнаружены специфические нековалентные взаимодействия $I\cdots I$ и $Br\cdots I$, ведущие к образованию супрамолекулярных полимеров. Природа и энергетические характеристики данных нековалентных взаимодействий были изучены теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня.

10) Природа и энергетика нековалентных взаимодействий $Br\cdots Br$ в супрамолекулярной структуре полибромид-бромантимоната $(2,6\text{-BrPy})_3[SbBr_6]\{(Br_2)Br\}\cdot 2H_2O$ (растущий интерес к такого рода галогенидным комплексам р-элементов в значительной степени связан с возможностью их использования в качестве компонентов солнечных батарей так называемого перовскитного типа) были изучены теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня.

11) Изучен механизм и движущие силы, кинетические и термодинамические факторы протекания реакций регио- и стереоселективного циклоприсоединения N-аллил замещённых полициклических производных изоиндол-1,3-диона с нитронами, приводящих к образованию изоксазолидиновых гетероциклов, перспективных для получения фармацевтических препаратов, обладающих ингибирующей активностью против вируса гриппа H1N1. Реакционная способность этих соединений была проинтерпретирована с точки зрения теории граничных молекулярных орбиталей, индексов глобальной электрофильности и нуклеофильности, а также функций Фукуи.

12) Была теоретически изучена природа катиона $[(2\text{-MeO-5-BrPh})_3Sb]^+$ как перспективного билдинг-блока для супрамолекулярного дизайна материалов на основе галогенных связей, а также потенциального органического катализатора, работающего за счёт нековалентных взаимодействий.

13) Был теоретически изучен феномен галогенных связей с участием галогенированных бензолов и неподелённой электронной пары атома углерода в молекуле изоцианида. Такие нековалентные взаимодействия существенно снижают неприятный запах изоцианидов, что потенциально может облегчать работу с данным реагентами в лаборатории.

14) Были теоретически изучены различные нековалентные взаимодействия галоген...галоген в кристаллах серии галогенированных ароматических дихлородиазидинов (достаточно редкий класс азо-красителей). Было показано, что за счёт таких нековалентных взаимодействий можно управлять особенностями кристаллической упаковки и супрамолекулярной организацией в твёрдой фазе.

15) Было проведено исследование стабилизации декабромид-аниона $\{Br_{10}\}^{2-}$ в структуре бромидного комплекса $Sb(V)$ $(4\text{-MePyC}_3)_2\{[SbBr_6]_2[Br_{10}]\}$ ($4\text{-MePyC}_3 = 1,1'$ (пропан-1,3-диил)-бис(4-метилпиридин)-1-иум дикатион) (потенциально перспективное соединение для создания инновационных функциональных материалов для нужд электроники и фотовольтаики). Природа и энергетические характеристики нековалентных взаимодействий $Br\cdots Br$ в данном соединении, отвечающих за супрамолекулярную организацию, были изучены теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности.

16) Было проведено фундаментальное теоретическое исследование идеализированных простейших модельных систем, способных участвовать в формировании таких нековалентных взаимодействий как галогенные связи. Было показано, что во многих случаях общее электростатическое взаимодействие между взаимодействующими частицами может быть дестабилизирующим, и делокализация электронной плотности и эффекты переноса заряда могут быть весьма существенными для стабилизации таких супрамолекулярных систем.

17) Было проведено исследование супрамолекулярных димеров в кристаллической структуре (Z)-1-((5-флюоропиридин-2-ил)амино)метиленафтален-2(1H)-она (вещество с потенциально ценными фотохромными/термохромными, антибактериальными и противоопухолевыми свойствами), связанных за счёт водородных связей C(sp²)-H...F. Природа данных нековалентных взаимодействий была изучена теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности, а также анализа поверхностей Хиршфельда на базе результатов рентгеноструктурных исследований.

18) Было проведено исследование супрамолекулярных 1D полимеров на основе координационных соединений золота(III) (комплекс trans-dibromogold(III)t-Bu-Xantphos). Природа и энергетика нековалентных взаимодействий Au–Br...Br–Au, за счёт которых образуются 1D цепочки в кристаллической фазе, были изучены теоретически с помощью квантово-химических расчётов высокого уровня в рамках теории функционала плотности.

Достигнутые научные результаты были представлены на следующих международных научных мероприятиях:

Первый год реализации проекта:

- 1) 2–6 сентября 2019 г. (Лиссабон, Португалия) - 1st International Conference on Noncovalent Interactions (ICNI 2019) (стендовый доклад на тему: "Theoretical studies of noncovalent interactions in chemical systems promising for catalysis, materials science, and medicine") [<https://icni2019.eventos.chemistry.pt/>]
- 2) 9–13 сентября 2019 г. (Санкт-Петербург, Россия) - Mendeleev 2019, the XI International Conference on Chemistry for Young Scientists (плeнарный доклад на тему: "Theoretical studies in organometallic and coordination chemistry: reactivity, catalysis, and non-covalent interactions") [<http://mendeleev.spbu.ru/>]
- 3) 20–23 октября 2019 г. (Ливерпуль, Великобритания) - Workshop "Dynamic self-assembly and quorum effects in chemistry and biology predicted by non-linear modelling algorithms" (устное выступление на тему: "Computer modeling in organometallic chemistry: reactivity, catalysis, and noncovalent interactions") [<http://dysa.itmo.ru/>]

Второй год реализации проекта:

- 1) 10–11 декабря 2020 г. - First Russian-German Virtual Conference on Interdisciplinary Natural Sciences: An Interactive Online G-RISC Event (устный доклад на тему: "Computer modeling of non-covalent interactions in chemical systems promising for materials science, catalysis and medicine") [https://www.g-risc.org/conferences_workshops/Digital-and-Online-Events/Virtual-Conference-2020.html]
- 2) 26–27 апреля 2021 г. - Онлайн-симпозиум по вычислительной химии памяти А. А. Грановского (устный доклад на тему: "Computer modeling in organometallic and coordination chemistry: reactivity and non-covalent interactions") [<https://chemport.ru/webconference2021/>]

Таким образом, запланированная работа по проекту РФФ № 19-73-00001 "Теоретические исследования нековалентных взаимодействий в химических системах, перспективных для нужд катализа, материаловедения и медицины" выполнена в полном объеме, и имеет место существенное перевыполнение плана. Все задачи проекта успешно решены. По итогам выполнения проекта было опубликовано 18 статей в ведущих профильных международных научных журналах (Nat. Commun.; Inorg. Chem.; Dalton Trans.; J. Comput. Chem.; Molecules; New J. Chem.; Tetrahedron; Inorg. Chim. Acta; J. Organomet. Chem.; J. Mol. Struct.; J. Coord. Chem.; Z. Kristallogr. Cryst. Mater.; Коорд. хим.; Журнал структурной химии). Результаты проведённых исследований докладывались и обсуждались на многочисленных международных научных мероприятиях в виде пленарного, устных и стендового докладов.

на английском языке

During the implementation of the RSF project No. 19-73-00001 "Theoretical studies of non-covalent interactions in chemical systems promising for catalysis, materials science, and medicine", the largest amount of work was focused on the main goal of the project - theoretical studies of non-covalent interactions (studying their nature and energies, qualitative and quantitative description of this phenomenon) in chemical systems that are promising for the needs of catalysis, materials science and medicine (in various inorganic, organic, organometallic and coordination compounds and their supramolecular associates).

The main scientific results obtained:

- 1) The nature and energy characteristics of non-covalent interactions Br•••Br responsible for the supramolecular organization of new coordination compounds of Sb(V): Cat[SbBr₆] (Cat = 1,3,4-MePy⁺, 1,4-MePy⁺) and Cat₂[[SbBr₆](Br₃)] (Cat = 1,2-MePy⁺, 1-Et-2-MePy⁺, 1-Et-4-MePy⁺) were theoretically studied. These compounds are potentially promising for the creation of innovative functional materials for the needs of electronics and photovoltaics.
- 2) The phenomenon of the presence of halogen bonds X•••O (X = Cl, Br, I) (the nature and energy characteristics of these non-covalent interactions) responsible for the supramolecular organization of isostructural coordination compounds

[(Bu₄N)₂{Ag(L)(DMF)}₂Mo₈O₂₆] (L = 3-chloro-, 3-bromo-, 3-iodopyridine) in the solid phase was theoretically studied. These compounds are promising for the needs of materials science.

3) A theoretical study of the nature and energy characteristics of the rare type of intermolecular hydrogen bonds C(sp²)-H...Hal and weak intermolecular non-covalent interactions N-H...Ph responsible for the formation of 1D supramolecular polymer chains in crystals of dichloroosazone complexes of palladium(II) was carried out.

4) The nature and energy of coordination and semicoordination bonds and stacking interactions in crystal of silver(I) coordination compound with 8-phenylquinoline ligand were studied by using high level quantum chemical calculations. Such coordination compounds are promising as catalysts for different processes of Csp³-H functionalization and various chemical reactions involving substrates with C=C and C≡C bonds. Intermolecular interactions in the solid phase were also additionally investigated by Hirschfeld surface analysis for the asymmetric unit in the crystal.

5) The nature and energy of coordination and semicoordination bonds Ni...I, halogen bonds and lp...π interactions in the adducts of square-planar nickel(II) dioximate complexes [Ni(bqoxH)₂] (bqoxH₂ = o-benzoquinonedioxime) with iodine and polyiodide anions (redox active systems, promising for creating innovative materials with conductive or semiconductor properties) were studied theoretically using high level quantum chemical calculations and specialized CrystalExplorer software package based on the result in X-ray diffraction studies.

6) The nature and energy of non-covalent interactions I...I in crystals of salts of pyridine derivatives with triiodide anions CatI₃ (Cat = 1,2-MePy and 1,2,6-MePy) were theoretically studied, which gives an understanding of the driving forces of supramolecular organization of these systems and opens up opportunities for crystal engineering design based on these building blocks.

7) It was theoretically proved that the intramolecular hydrogen bonds N-H...Cl stabilize the trans-configuration of the palladium(II) carbene complex, which can be a catalyst for the most important organic cross-coupling reactions – the Suzuki, Heck, Sonogashira, and others. Various intermolecular non-covalent interactions in the solid phase were also additionally investigated by Hirschfeld surface analysis for the obtained crystal structure of this palladium(II) carbene complex.

8) It was theoretically proved that the quasi-cyclic conformation of N-acylureas (organic compounds that are widely used in materials science [gels, nanotubes, nanosheets, polymers with nonlinear optical properties], catalysis of nucleophilic ring opening reactions in epoxides and the pharmacological industry [precursors for antidiabetic, antitumor and anti-inflammatory drugs]) is determined by intramolecular hydrogen bonds stabilized by electronic delocalization (resonance-assisted hydrogen bonding), while their dimerization in solid phase occurs due to the formation of intermolecular hydrogen bonds N-H...O and C-H...O. The nature and energy characteristics of these non-covalent interactions were studied using high level quantum chemical calculations. Various intermolecular non-covalent interactions in the solid phase were also additionally investigated by Hirschfeld surface analysis for the obtained crystal structures of N-acylureas.

9) The specific non-covalent interactions I...I and Br...I were found in the crystal structure of heteroleptic binuclear iodoacetate complexes of copper(II) with 3-bromopyridine [Cu₂(IOAc)₄(3-BrPy)₂]. These non-covalent interactions lead to the formation of supramolecular polymers. The nature and energy characteristics of these non-covalent interactions were studied theoretically using high level quantum chemical calculations.

10) The nature and energy of non-covalent interactions Br...Br in the supramolecular structure of polybromide-bromoantimonate (2,6-BrPy)₃[SbBr₆]{(Br)₂Br}•2H₂O were studied theoretically using high level quantum chemical calculations. A growing interest in such halide complexes of p-elements in significant degrees associated with the possibility of their usage as components of solar cells of the so-called perovskite type.

11) The mechanism and driving forces, kinetic and thermodynamic factors of the regio- and stereoselective cycloaddition reactions of N-allyl substituted polycyclic derivatives of isoindole-1,3-dione with nitrones were studied. The reactivity of these compounds was analyzed using the frontier molecular orbitals theory, global electrophilicity and nucleophilicity indices, and Fukui functions. These reactions lead to the formation of isoxazolidine heterocycles promising for creation of pharmaceuticals having inhibitory activity against the H1N1 influenza virus.

12) The theoretical study of the nature of [(2-MeO-5-BrPh)₃Sb]⁺ cation as a promising building block for supramolecular design of materials based on the halogen bonds as well as a potential organic catalyst operating through non-covalent interactions.

13) The phenomenon of halogen bonds with the participation of halogenated benzenes and the lone electron pair of the carbon atom in the isocyanide molecule was theoretically studied. These non-covalent interactions significantly reduce the unpleasant odor of isocyanides, which can potentially facilitate handling of these reagents in the laboratory.

14) Various non-covalent interactions halogen...halogen in crystals of a series of halogenated aromatic dichlorodiazadienes (a fairly rare class of azo-dyes) were theoretically studied. It was shown that due to such non-covalent interactions it is possible to control the peculiarities of crystal packing and supramolecular organization in the solid phase.

15) The stabilization of the {Br₁₀}²⁻ decabromide anion in the structure of the bromide complex Sb(V) (4-MePyC₃)₂{[SbBr₆]₂{Br₁₀}} (4-MePyC₃ = 1,10 (propane-1,3-diyl)- bis(4-methylpyridin)-1-ium dication) (a potentially

promising compound for creating innovative functional materials for the needs of electronics and photovoltaics) was theoretically studied. The nature and energy characteristics of non-covalent interactions Br...Br in this compound, which are responsible for the supramolecular organization, were studied theoretically using high-level quantum-chemical calculations within the framework of the density functional theory.

16) A fundamental theoretical study was carried out for idealized simplest model systems capable of participating in the formation of halogen bonds. It was shown that in many cases the general electrostatic interaction between interacting particles can be destabilizing, and the delocalization of the electron density and the effects of charge transfer can be very significant for the stabilization of such supramolecular systems.

17) A study of supramolecular dimers in the crystal structure of (Z)-1-(((4-fluoropyridine-2yl)amino)methylene)naphthalen-2(1H)-one (a substance with potentially valuable photochromic / thermochromic, antibacterial and antitumor properties) connected due to C(sp²)–H...F hydrogen bonds was carried out. The nature of these non-covalent interactions was studied theoretically using high-level quantum-chemical calculations in the framework of the density functional theory, as well as the analysis of Hirshfeld surfaces based on the results of X-ray structural studies.

18) A study of supramolecular 1D polymers based on gold(III) coordination compounds (trans-dibromogold(III)t-Bu-Xantphos complex) was carried out. The nature and energetics of noncovalent interactions Au–Br...Br–Au, due to which 1D chains are formed in the crystalline phase, were studied theoretically using high-level quantum-chemical calculations within the framework of the density functional theory.

The achieved scientific results were presented at the following international scientific events:

First year of the project:

- 1) September 2-6, 2019 (Lisbon, Portugal) - 1st International Conference on Noncovalent Interactions (ICNI 2019) (poster presentation: "Theoretical studies of noncovalent interactions in chemical systems promising for catalysis, materials science, and medicine") [<https://icni2019.eventos.chemistry.pt/>]
- 2) September 9–13, 2019 (St. Petersburg, Russia) - Mendeleev 2019, the XI International Conference on Chemistry for Young Scientists (plenary lecture: "Theoretical studies in organometallic and coordination chemistry: reactivity, catalysis, and non-covalent interactions") [<http://mendeleev.spbu.ru/>]
- 3) October 20-23, 2019 (Liverpool, Great Britain) - Workshop "Dynamic self-assembly and quorum effects in chemistry and biology predicted by non-linear modelling algorithms" (oral presentation: "Computer modeling in organometallic chemistry: reactivity, catalysis, and noncovalent interactions") [<http://dysa.itmo.ru/>]

Second year of the project:

- 1) December 10–11, 2020 - First Russian-German Virtual Conference on Interdisciplinary Natural Sciences: An Interactive Online G-RISC Event (oral presentation: "Computer modeling of non-covalent interactions in chemical systems promising for materials science, catalysis and medicine") [https://www.g-risc.org/conferences_workshops/Digital-and-Online-Events/Virtual-Conference-2020.html]
- 2) April 26–27, 2021 - Online Symposium on Computational Chemistry in Memory of A.A. Granovsky (oral presentation: "Computer modeling in organometallic and coordination chemistry: reactivity and non-covalent interactions") [<https://chemport.ru/webconference2021/>]

Thus, the planned work within the RSF project No. 19-73-00001 "Theoretical studies of non-covalent interactions in chemical systems promising for catalysis, materials science, and medicine" has been successfully done, and there is a significant over fulfillment of the plan. All project tasks have been successfully solved. As a result of the project implementation, 18 articles were published in leading specialized international scientific journals (Nat. Commun.; Inorg. Chem.; Dalton Trans.; J. Comput. Chem.; Molecules; New J. Chem.; Tetrahedron; Inorg. Chim. Acta; J. Organomet. Chem.; J. Mol. Struct.; J. Coord. Chem.; Z. Kristallogr. Cryst. Mater.; Russ. J. Coord. Chem.; J. Struct. Chem.). The results of the research were reported and discussed at various international scientific events as plenary, oral and poster presentations.

5.5. Перечень публикаций по проекту за весь срок выполнения проекта (заполняется автоматически на основании форм 20)

1. Adonin S.A., Bondarenko M.A., Novikov A.S., Plyusnin P.E., Korolkov I.V., Sokolov M.N., Fedin V.P. (Adonin S.A., Bondarenko M.A., Novikov A.S., Plyusnin P.E., Korolkov I.V., Sokolov M.N., Fedin V.P.) **Five new Sb(V) bromide complexes and their polybromide derivatives with pyridinium-type cations: Structures, thermal stability and features of halogen-halogen contacts in solid state** Inorganica Chimica Acta Inorganica Chimica Acta 502 (2020) 119278 <https://doi.org/10.1016/j.ica.2019.119278> (2020 г.)

2. Anastasia V. Chupina, Vladimir Shayapov, Alexander S. Novikov, Victoria V. Volchek, Enrico Benassi, Pavel A. Abramov, Maxim N. Sokolov (Anastasia V. Chupina, Vladimir Shayapov, Alexander S. Novikov, Victoria V. Volchek, Enrico Benassi, Pavel A. Abramov, Maxim N. Sokolov) **[[AgL]2Mo8O26]n- complexes: a combined experimental and theoretical study** Dalton Transactions Dalton Trans., 2020, 49, 1522–1530 <https://doi.org/10.1039/C9DT04043A> (2020 г.)
3. Andrey N. Usoltsev, Alexander S. Novikov, Boris A. Kolesov, Katerina V. Chernova, Pavel E. Plyusnin, Vladimir P. Fedin, Maxim N. Sokolov, Sergey A. Adonin (Andrey N. Usoltsev, Alexander S. Novikov, Boris A. Kolesov, Katerina V. Chernova, Pavel E. Plyusnin, Vladimir P. Fedin, Maxim N. Sokolov, Sergey A. Adonin) **Halogen•••halogen contacts in triiodide salts of pyridinium-derived cations: Theoretical and spectroscopic studies** Journal of Molecular Structure Journal of Molecular Structure 1209 (2020) 127949 <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.127949> (2020 г.)
4. Dmitrii S. Bolotin, Natalia S. Soldatova, Marina Ya. Demakova, Alexander S. Novikov, Daniil M. Ivanov, Irina S. Aliyarova, Alexander Sapegin, Mikhail Krasavin (Dmitrii S. Bolotin, Natalia S. Soldatova, Marina Ya. Demakova, Alexander S. Novikov, Daniil M. Ivanov, Irina S. Aliyarova, Alexander Sapegin, Mikhail Krasavin) **Pentacoordinated silver(I) complex featuring 8-phenylquinoline ligands: Interplay of coordination bonds, semicoordination, and stacking interactions** Inorganica Chimica Acta Inorganica Chimica Acta 504 (2020) 119453 <https://doi.org/10.1016/j.ica.2020.119453> (2020 г.)
5. Mariia M. Efremova, Alexander P. Molchanov, Alexander S. Novikov, Galina L. Starova, Anna A. Muryleva, Alexander V. Slita, Vladimir V. Zarubaev (Mariia M. Efremova, Alexander P. Molchanov, Alexander S. Novikov, Galina L. Starova, Anna A. Muryleva, Alexander V. Slita, Vladimir V. Zarubaev) **1,3-Dipolar cycloaddition of N-allyl substituted polycyclic derivatives of isoindole-1,3-dione with nitrones and nitrile oxides: An experimental and theoretical investigation** Tetrahedron Tetrahedron 76 (2020) 131104 <https://doi.org/10.1016/j.tet.2020.131104> (2020 г.)
6. Mikhail V. Il'in, Liana A. Lesnikova, Dmitrii S. Bolotin, Alexander S. Novikov, Vitalii V. Suslonov, Vadim Yu. Kukushkin (Mikhail V. Il'in, Liana A. Lesnikova, Dmitrii S. Bolotin, Alexander S. Novikov, Vitalii V. Suslonov, Vadim Yu. Kukushkin) **A one-pot route to N-acyl ureas: a formal four-component hydrolytic reaction involving aminonitrones and isocyanide dibromides** New Journal of Chemistry New J. Chem., 2020, 44, 1253 <https://doi.org/10.1039/c9nj05445f> (2020 г.)
7. Olga V. Repina, Alexander S. Novikov, Olesya V. Khoroshilova, Andreii S. Kritchenkov, Alexander A. Vasin, Alexander G. Tskhovrebov (Olga V. Repina, Alexander S. Novikov, Olesya V. Khoroshilova, Andreii S. Kritchenkov, Alexander A. Vasin, Alexander G. Tskhovrebov) **Lasagna-like supramolecular polymers derived from the PdII oszone complexes via C(sp2)–H•••Hal hydrogen bonding** Inorganica Chimica Acta Inorganica Chimica Acta 502 (2020) 119378 <https://doi.org/10.1016/j.ica.2019.119378> (2020 г.)
8. Vladimir N. Mikhaylov, Viktor N. Sorokoumov, Alexander S. Novikov, Maria V. Melnik, Alexander G. Tskhovrebov, Irina A. Balova (Vladimir N. Mikhaylov, Viktor N. Sorokoumov, Alexander S. Novikov, Maria V. Melnik, Alexander G. Tskhovrebov, Irina A. Balova) **Intramolecular hydrogen bonding stabilizes trans-configuration in a mixed carbene/isocyanide PdII complexes** Journal of Organometallic Chemistry Journal of Organometallic Chemistry 912 (2020) 121174 <https://doi.org/10.1016/j.jorganchem.2020.121174> (2020 г.)
9. Zarina M. Efimenko, Alexander S. Novikov, Daniil M. Ivanov, Alexandr V. Piskunov, Anatoly A. Vereshchagin, Oleg V. Levin, Nadezhda A. Bokach, Vadim Yu. Kukushkin (Zarina M. Efimenko, Alexander S. Novikov, Daniil M. Ivanov, Alexandr V. Piskunov, Anatoly A. Vereshchagin, Oleg V. Levin, Nadezhda A. Bokach, Vadim Yu. Kukushkin) **The (Dioximate)NiII/12 System: Ligand Oxidation and Binding Modes of Triiodide Species** Inorganic Chemistry Inorg. Chem. 2020, 59, 2316–2327 <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.9b03132> (2020 г.)
10. Адонин С.А., Новиков А.С., Федин В.П. (Adonin S.A., Novikov A.S., Fedin V.P.) **Гетеролептические биядерные иодоацетатные комплексы меди(II) с 3-бромпиридином и 4-этилпиридином: кристаллические структуры и особенности контактов галоген•••галоген** Координационная химия Координационная химия, 2020, том 46, № 2, с. 112–116 <https://doi.org/10.31857/S0132344X20020012> (2020 г.)
11. Бондаренко М.А., Адонин С.А., Новиков А.С., Соколов М.Н., Федин В.П. (Bondarenko M.A., Adonin S.A., Novikov A.S., Sokolov M.N., Fedin V.P.) **Супрамолекулярный полибромид-бромонамонат(V) (2,6-BrPyH)3[SbBr6]•2H2O: особенности контактов галоген•••галоген в кристаллической структуре** Координационная химия Координационная химия, 2020, том 46, № 5, с. 264–269 <https://doi.org/10.31857/S0132344X20040015> (2020 г.)
12. Bondarenko M.A., Novikov A.S., Fedin V.P., Sokolov M.N., Adonin S.A. (Bondarenko M.A., Novikov A.S., Fedin V.P., Sokolov M.N., Adonin S.A.) **The stabilization of decabromide {Br10}2- anion in the structure of Sb(V) bromide complex** JOURNAL OF COORDINATION CHEMISTRY J. Coord. Chem. 2020, V. 73. P. 3038. <https://doi.org/10.1080/00958972.2020.1837785> (2020 г.)
13. Mikherdov A.S., Novikov A.S., Boyarskiy V.P., Kukushkin V.Yu. (Mikherdov A.S., Novikov A.S., Boyarskiy V.P., Kukushkin V.Yu.) **The halogen bond with isocyano carbon reduces isocyanide odor** Nature Communications Nat. Commun. 2020, V. 11. P. 2921. <https://doi.org/10.1038/s41467-020-16748-x> (2020 г.)

14. Nenajdenko V.G., Shikhaliyev N.G., Maharramov A.M., Bagirova K.N., Suleymanova G.T., Novikov A.S., Khrustalev V.N., Tskhovrebov A.G. (Nenajdenko V.G., Shikhaliyev N.G., Maharramov A.M., Bagirova K.N., Suleymanova G.T., Novikov A.S., Khrustalev V.N., Tskhovrebov A.G.) **Halogenated diazabutadiene dyes: synthesis, structures, supramolecular features, and theoretical studies** *Molecules* 2020, V. 25. P. 5013. <https://doi.org/10.3390/molecules25215013> (2020 г.)
-
15. Sharutin V.V., Sharutina O.K., Novikov A.S., Adonin S.A. (Sharutin V.V., Sharutina O.K., Novikov A.S., Adonin S.A.) **Substituent-dependent reactivity of triarylantimony(III) toward I₂: isolation of [Ar₃SbI]⁺ salt** *New Journal of Chemistry* *New J. Chem.* 2020, V. 44. P. 14339. <https://doi.org/10.1039/D0NJ02774J> (2020 г.)
-
16. Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Kritchenkov A.S., Khrustalev V.N., Haukka M. (Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Kritchenkov A.S., Khrustalev V.N., Haukka M.) **Attractive halogen...halogen interactions in crystal structure of trans-dibromogold(III) complex** *Zeitschrift für Kristallographie – Crystalline Materials* *Z. Kristallogr. Cryst. Mater.* 2020, V. 235. P. 477. <https://doi.org/10.1515/zkri-2020-0045> (2020 г.)
-
17. Jiménez-Grávalos F., Gallegos M., Pendás Á.M., Novikov A.S. (Jiménez-Grávalos F., Gallegos M., Pendás Á.M., Novikov A.S.) **Challenging the electrostatic σ -hole picture of halogen bonding using minimal models and the interacting quantum atoms approach** *Journal of Computational Chemistry* *J. Comput. Chem.* 2021, V. 42. P. 676. <https://doi.org/10.1002/jcc.26488> (2021 г.)
-
18. Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Khrustalev V.N. (Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Khrustalev V.N.) **Identification of supramolecular dimers in the crystal structure of (Z)-1-(((5-fluoropyridin-2-yl)amino)methylene)naphthalen-2(1H)-one via C(sp²)–H...F hydrogen bonding: A combined experimental and theoretical study** *Журнал структурной химии ЖСХ*, 2021, Т. 62. С. 490. https://doi.org/10.26902/JSC_id69922 (2021 г.)
-

5.6. Возникли исключительные права на результаты интеллектуальной деятельности (РИД), созданные при выполнении проекта:

Нет

5.7. Публикационные показатели реализации проекта

(нарастающим итогом, данные формируются автоматически)

Показатели публикационной активности приводятся в отношении публикаций, имеющих соответствующую ссылку на поддержку Российского научного фонда.

Плановые значения указываются только для показателей, предусмотренных соглашением.

Показатели	Единица измерения	с 1 июля 2019 г. по 30 июня 2020 г.		с 1 июля 2019 г. по 30 июня 2021 г.	
		план	факт	план	факт
Количество публикаций по проекту членов научного коллектива в рецензируемых российских и зарубежных научных изданиях, индексируемых в базах данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (SCOPUS)	Ед.	1	11	3	18
в том числе в изданиях, входящих в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по SJR (принадлежность издания к Q1 в Scopus определяется по базе данных http://www.scimagojr.com/)	Ед.		3		7
Число цитирований публикаций по проекту членов научного коллектива в научных журналах, индексируемых в международной базе данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) в отчетном периоде	Ед.		1		39

5.8. Научным коллективом опубликовано с указанием на получение финансовой поддержки от Фонда по направлению научного исследования не менее 3 публикаций в изданиях, индексируемых в базах данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (Scopus):

да

Сведения о публикациях требуют корректировки (в том числе имеется дублирование)

нет

5.9. Возможность практического использования результатов проекта в экономике и социальной сфере (при наличии, в том числе формирование научных и технологических заделов, обеспечивающих экономический рост и социальное развитие Российской Федерации, создание новой или усовершенствование производимой продукции (товаров, работ, услуг), создание новых или усовершенствование применяемых технологий)

Настоящим подтверждаю:

- самостоятельность и авторство текста отчета о выполнении проекта;
- при обнародовании результатов, полученных в рамках поддержанного РНФ проекта, научный коллектив ссылался на получение финансовой поддержки проекта от РНФ и на организацию, на базе которой выполнялось исследование;
- согласие с опубликованием РНФ сведений из итогового отчета о выполнении проекта, в том числе в информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»;
- проект не имел других источников финансирования;
- проект не являлся аналогичным***** по содержанию проекту, одновременно финансируемому из других источников.

***** Проекты, аналогичные по целям, задачам, объектам, предметам и методам исследований, а также ожидаемым результатам. Экспертиза на совпадение проводится экспертным советом Фонда.

Подпись руководителя проекта _____/А.С. Новиков/