



## ИНЭОС РАН

### ПОРТФОЛИО АСПИРАНТА

Ф.И.О. Осипова Елена Сергеевна

ГОД ПОСТУПЛЕНИЯ 2014

---

### НАПРАВЛЕНИЕ

02.00.08 Химия элементоорганических соединений

02.00.04 Физическая химия

E-mail aosipova92@gmail.com

# 1. ТЕМА ДИССЕРТАЦИОННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

Тема исследования:

«Межмолекулярные взаимодействия  
и кислотно-основные реакции с  
участием пинцетных гидридов  
металлов 8-10 групп»



д.х.н., профессор  
РАН  
Белкова Н. В.



д.х.н., профессор  
Шубина Е. С.

Тема была утверждена ученым советом ИНЭОС РАН согласно протоколу  
№ 1 от 4 февраля 2015 года

## 2. ПУБЛИКАЦИИ В НАУЧНЫХ ИЗДАНИЯХ ВХОДЯЩИХ В ПЕРЕЧЕНЬ ВАК, НАУЧНЫЕ СТАТЬИ

| Наименование работы, ее вид                                                                                                                                                                                                                                           | Выходные данные *                                            | Соавторы                                                                                                                 |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1. Activation of M—H bond upon the complexation of transition metal hydrides with acids and bases                                                                                                                                                                     | Опубликовано в Russian Chemical Bulletin, 2014               | Filippov O.A., Golub I.E., Kirkina V.A., Gutsul E.I., Belkova N.V.                                                       |
| 2. Dihydrogen Bonding and Proton Transfer from MH and OH Acids to Group 10 Metal Hydrides [( <sup>t</sup> BuPCP)MH] [ <sup>t</sup> BuPCP = $\kappa^3$ -2,6-( <sup>t</sup> Bu <sub>2</sub> PCH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> ; M = Ni, Pd] | Опубликовано в European Journal of Inorganic Chemistry, 2016 | Belkova N.V., Epstein L.M., Filippov O.A., Kirkina V.A., Titova E.M., Rossin A., Peruzzini M., Shubina E.S.              |
| 3. Mild activation of Ir-Cl bond upon the interaction of Pincer Iridium Hydride ( <sup>t</sup> BuPCP)IrH(Cl) with acids and bases                                                                                                                                     | Опубликовано в Journal of Organometallic Chemistry, 2016     | Titova E.M., Gulyaeva E.S., Torocheshnikov V.N., Pavlov A.A., Silantyev G. A., Filippov O.A., Shubina E.S., Belkova N.V. |
| 4. Mechanism of Dimethylamine–Borane Dehydrogenation Catalyzed by an Iridium(III) PCP-Pincer Complex                                                                                                                                                                  | Опубликовано в ACS Catalysis, 2017                           | Titova E.M., Pavlov A.A., Filippov O.A., Safronov S.V., Shubina E.S., Belkova N.V.                                       |

### 3. УЧАСТИЕ В НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКИХ КОНФЕРЕНЦИЯХ

| Наименование работы, ее вид                                                                                                                              | Выходные данные *                                                                                                          | Соавторы                                                                                                        |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Устный доклад на тему: «Kinetics and thermodynamics of proton transfer between two transition metal hydrides (PCP)PdH and LW(CO) <sub>3</sub> H»         | Organometallic and Coordination Chemistry: Achievements and Challenges<br>Нижний Новгород, Россия<br>18 – 23 сентября 2015 | O. A. Filippov, V. A. Kirkina, E. I. Gutsul, N. V. Belkova, L. M. Epstein, E. S. Shubina                        |
| Стендовый доклад и флэш-презентация на тему: «M–H bond repolarization in hydrogen bonding and the proton transfer between two transition-metal hydrides» | The International School of Organometallic Chemistry 10th Edition,<br>Camerino, Italy<br>5 – 9 сентября 2015               | O.A. Filippov, V.A. Kirkina, E.I. Gutsul, N.V. Belkova, L.M. Epstein, E.S. Shubina                              |
| Стендовый доклад на тему «Iridium pincer complexes as catalysts of amine-boranes dehydrogenation»                                                        | 27th International Conference on Organometallic Chemistry, Melbourne, Australia<br>17 – 22 июля 2016                       | Yakurnova E.D., Filippov O.A., Gutsul E.I., Titova E.M., Belkova N.V., Epstein L.M., Shubina E.S.               |
| Устный доклад на тему: «Catalytic activity of new iridium(III) pincer hydride complex»                                                                   | European Conference on Boron Chemistry, Суздаль, Россия<br>4 – 8 сентября 2016                                             | E. Titova, O. Filippov, N. Belkova, L. Epstein, E. Shubina, G. Giambastiani, L. Luconi, A. Rossin, M. Peruzzini |
| Стендовый доклад на тему «Amine-borane dehydrocoupling catalyzed by iridium pincer hydride complexes»                                                    | European Inorganic Chemistry Conference, Copenhagen, Denmark<br>2 – 5 июля 2017                                            | E. Titova, O. Filippov, N. Belkova, L. Epstein, E. Shubina, G. Giambastiani, L. Luconi, A. Rossin, M. Peruzzini |

## 4. РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ АСПИРАНТОВ

### 1. Сдача кандидатских экзаменов

| Экзамен                       | Оценка  |
|-------------------------------|---------|
| История философии науки       | Отлично |
| Иностранный язык (английский) | Отлично |
| Экзамен по специальности      |         |

### 2. Оценки, полученные на экзаменах и зачетах

| Наименование дисциплины                   | Оценка  |
|-------------------------------------------|---------|
| Масс-спектрометрия                        | Хорошо  |
| Элементный анализ                         | Хорошо  |
| Спектральные методы исследования вещества | Хорошо  |
| ЯМР спектроскопия                         | Отлично |
| Хроматография                             | Отлично |
| Рентгеноструктурный анализ                | Хорошо  |

## 4. РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ АСПИРАНТОВ

### 3. Конференция-аттестация «Веснянка»

| Дата             | Доклад | Тезисы | Содоклад | Тезисы | Дискуссия | Посещение | Оценка |
|------------------|--------|--------|----------|--------|-----------|-----------|--------|
| 30.03-02.04.2015 | 4.67   | 0.93   | 5.0      | 0.97   | 1.5       | 1.0       | 14.0   |
| 28.03-01.04.2016 | 4.78   | 0.92   | 4.92     | 0.97   | 1.2       | 1.0       | 13.8   |
| 03.04-07.04.2017 | 4.86   | 0.97   | 5.0      | 1.0    | 0.5       | 1.0       | 13.5   |

### 4. Педагогическая практика

- Подготовлена курсовая работа ученицы СУНЦ им. Колмогорова Шенаевой Элины Грантовны на тему «Водородные связи»
- Подготовлена курсовая работа по органической химии студентки 3 курса Химфака МГУ Гуляевой Екатерины Сергеевны на тему «Синтез 1,4-дициано-2,3-диметоксициклопентадиена»

## 5. ЦЕЛЬ, ЗАДАЧИ И НАУЧНАЯ НОВИЗНА ДИССЕРТАЦИОННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

НАУЧНАЯ НОВИЗНА – Гидриды переходных металлов в роли кислот и оснований взаимодействуют с органическими субстратами в реакциях, имеющих важное значение в каталитических и биохимических процессах. Водородно-связанные комплексы различных типов являются интермедиатами этих процессов и могут определять направление и селективность реакций, стабилизировать или дестабилизировать образующиеся продукты. Исследования эффектов металла на реакционную способность гидридных комплексов, исследования механизмов в стехиометрических реакциях чрезвычайно актуальны, поскольку могут дать ключ к пониманию сути аналогичных процессов, проходящих в каталитических условиях, что в итоге может привести к более эффективному использованию гидридов металлов в органическом синтезе и промышленном катализе.

**ЦЕЛЬ РАБОТЫ** – исследовать межмолекулярные взаимодействия и кислотно-основные реакции с участием пинцетных гидридов металлов 8-10 групп

## 5. ЦЕЛЬ, ЗАДАЧИ И НАУЧНАЯ НОВИЗНА ДИССЕРТАЦИОННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

### ОСНОВНЫЕ ЗАДАЧИ

- Исследование взаимодействия гидридов переходных металлов 10-ой группы с различными протонодонорами ( $\text{XH}$  и  $\text{M}'\text{H}$ , где  $\text{M}'$  – переходный металл 6-ой группы) методами молекулярной спектроскопии в широком диапазоне температур
- Установление условий образования, спектральных и термодинамических характеристик диводородно-связанных комплексов  $\text{MH}\cdots\text{HX}$  и  $\text{MH}\cdots\text{HM}'$ , а также механизма переноса протона
- Исследование координационных свойств гидридов иридия при взаимодействии с различными органическими основаниями (напр.,  $\text{CH}_3\text{CN}$ ,  $\text{PhCN}$  и 2-гидроксиметилпиридин)
- Исследование активности гидридов иридия с различными пинцетными лигандами в реакциях каталитического дегидрирования амин-боранов ( $\text{NH}_3\text{-BH}_3$ ,  $\text{NH}_2t\text{Bu-BH}_3$ ,  $\text{NMe}_2\text{H-BH}_3$ )
- Установление механизма каталитического дегидрирования амин-боранов с использованием методов молекулярной спектроскопии и квантово-химических расчетов