

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 003.051.01 НА БАЗЕ  
Федерального государственного бюджетного учреждения науки  
Института неорганической химии имени А.В. Николаева  
Сибирского отделения Российской академии наук, ФАНО России  
ПО ДИССЕРТАЦИИ **Храмцовой Екатерины Андреевны**  
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ  
КАНДИДАТА ХИМИЧЕСКИХ НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_  
решение диссертационного совета от 26 октября 2016 года № 13

О присуждении *Храмцовой Екатерине Андреевне*, гражданке Российской Федерации ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «*Фотоиндуцированные процессы переноса заряда в хиральных связанных системах*» в виде рукописи по специальности 02.00.04 – физическая химия (химические науки) принята к защите *24 августа 2016 г., протокол № 9* диссертационным советом Д 003.051.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН), ФАНО (630090, г. Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, д. 3, действующего на основании приказа Минобрнауки РФ от 11.04.2012г. № 105/нк).

Соискатель Храмцова Екатерина Андреевна, 1992 года рождения, на момент защиты диссертации окончила очную аспирантуру на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук (ИХКГ СО РАН) (сентябрь 2013г. – август 2016г.). Диссертация подготовлена до окончания аспирантуры в лаборатории магнитных явлений ИХКГ СО РАН. В 2013 году соискатель окончила Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» по специальности – химия.

Диссертация выполнена в лаборатории магнитных явлений в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук.

*Научный руководитель* – доктор химических наук, профессор Лёшина Татьяна Викторовна работает в лаборатории магнитных явлений ИХКГ СО РАН в должности главного научного сотрудника.

*Официальные оппоненты:*

– *Багрянская Елена Григорьевна*, гражданка России, доктор физико-математических наук, профессор, директор Федерального государственного бюджетного

учреждения науки Новосибирского института органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск;

– *Мельников Михаил Яковлевич*, гражданин России, доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой химической кинетики химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», г. Москва; дали **положительные** отзывы на диссертацию.

*Ведущая организация*, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения РАН (ИК СО РАН), г. Новосибирск, в своем **положительном заключении**, подписанном к.ф.-м.н., доцентом с.н.с. лаборатории аэрозольного катализа Снытниковым Валерием Николаевичем и утверждённом директором ИК СО РАН академиком Бухтияровым Валерием Ивановичем указала, что «...диссертационная работа Храмцовой Е.А. «Фотоиндуцированные процессы переноса заряда в хиральных связанных системах» является законченной научно-квалификационной работой, выполненной на высоком научном уровне, отвечает паспорту специальности 02.00.04 – физическая химия и соответствует всем критериям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, установленным п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842, а её автор, Храмцова Екатерина Андреевна, безусловно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

...Отзыв на диссертацию и автореферат Храмцовой Е.А. заслушан и утвержден на проблемном семинаре отдела нетрадиционных каталитических процессов ИК СО РАН, протокол № 68 от 27 сентября 2016 года».

По теме диссертации соискатель имеет 4 работы, опубликованных в международных рецензируемых научных журналах; все публикации входят в перечень журналов, индексируемых в международной информационно-аналитической системе научного цитирования Web of Science. Общий объём опубликованных работ составляет 36 стр. (2,3 печ. л.), 14 работ опубликованы в материалах всероссийских и международных конференций и симпозиумов; публикаций в электронных научных изданиях – нет.

*Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:*

- 1. Magin I.M., Polyakov N.E., Khramtsova E.A., Kruppa A. I., Tsentalovich Yu. P., Leshina T.V., Miranda M.A., Nuin E., Marin M. L. Spin effects in intramolecular electron transfer in naproxen-N-methylpyrrolidine dyad // Chemical Physics Letters. – 2011. – V. 516. – N. 1-3. - P. 51-55.**
- 2. Magin I. M., Polyakov N.E., Khramtsova E. A., Kruppa A. I., Stepanov A.A., Purtov P. A., Leshina T.V., Tsentalovich Yu.P., Miranda M.A., Nuin E., Marin**

- M.L. Spin chemistry investigation of peculiarities of photoinduced electron transfer in donor–acceptor linked system // Applied Magnetic Resonance. – 2011. – V. 41. – N. 2-4. – P. 205-220.**
- 3. Khramtsova E.A., Plyusnin V.F., Magin I.M., Kruppa A. I., Polyakov N.E., Leshina T. V., Nuin E., Marin M. L., Miranda M. A. Time-resolved fluorescence study of exciplex formation in diastereomeric naproxen–pyrrolidine dyads // The Journal of Physical Chemistry B. – 2013. – V. 117. – N. 50. – P. 16206-16211.**
- 4. Khramtsova E. A., Sosnovsky D.V., Ageeva A.A., Nuin E., Marin M.L., Purtov P.A., Borisevich S.S., Khursan S.L., Roth H.D., Miranda M.A., Plyusnin V.F., Leshina T.V. Impact of chirality on the photoinduced charge transfer in linked systems containing naproxen enantiomers // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2016. – N. 18. – P. 12733-12741.**

На диссертацию и автореферат диссертации поступило 7 отзывов. Все отзывы положительные, 5 – с замечаниями, 2 – без замечаний. Отзывы поступили от: **д.х.н., профессора РАН Волчо К.П.**, главного научного сотрудника лаборатории физиологически активных веществ Федерального государственного бюджетного учреждения науки Новосибирского института органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (г. Новосибирск); **к.х.н. Остахова С.С.**, старшего научного сотрудника лаборатории химической физики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Уфимского института химии Российской академии наук (г. Уфа); **к.х.н. Морозовой О.Б.**, старшего научного сотрудника лаборатории магнитных и спиновых явлений Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Международный Томографический Центр» Сибирского отделения Российской академии наук (г. Новосибирск); **д.х.н. Кокорина А.И.**, главного научного сотрудника Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт химической физики им. Н.Н. Семенова» Российской академии наук (г. Москва); **д.х.н. Василевского С.Ф.**, главного научного сотрудника, руководителя группы спин-меченых и ацетиленовых соединений Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук (г. Новосибирск); **академика РАН д.ф.-м.н. Салихова К.М.**, научного руководителя института Федерального государственного бюджетного учреждения науки Казанский физиков-технический институт им. Е.К. Завойского Казанского научного центра Российской академии наук (г. Казань); **к.ф.-м.н., доцента Стася Д.В.**, старшего научного сотрудника лаборатории быстропротекающих процессов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук (г. Новосибирск).

Большинство замечаний к автореферату относятся к используемой терминологии и носят уточняющий характер; выражена заинтересованность в результатах дальнейших исследований. Все отзывы заканчиваются выводом, что диссертационная работа Е.А. Храмцовой **полностью соответствует** требованиям, которые ВАК РФ предъявляет к кандидатским диссертациям, а её автор Е.А. Храмцова заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

*Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается компетентностью оппонентов в области физико-химических процессов, протекающих в рассматриваемых системах: элементарные фотоиндуцированные процессы; и методах исследования, применяемых в диссертационной работе: химической поляризации ядер и флуоресцентная спектроскопия. Важен и значим вклад ведущей организации в область исследования хиральных соединений, в том числе в вопросе появления хиральных молекул. Данные компетенции подтверждаются наличием публикаций оппонентов и сотрудников ведущей организации в данной области исследований.*

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

*изучены фотоиндуцированные процессы с частичным и полным переносом заряда в связанных системах (диадах) с участием энантиомеров известного нестероидного противовоспалительного препарата напроксена и хирального донора электрона – (S)-N-метилпирролидина, соединённых различными типами мостиков (коротким, гибким и жёстким), методами спиновой химии и флуоресцентной спектроскопии;*

*на основании анализа кинетик флуоресценции установлены различия в скоростях частичного и полного переноса заряда для (R)- и (S)-энантиомеров напроксена в средах различной полярности (в смеси растворителей ацетонитрил и бензол);*

*обнаружены различия в величинах квантовых выходов флуоресценции локального возбужденного состояния и эксиплекса для (R,S)- и (S,S)-диастереомеров диад с напроксеном (стереодифференциация);*

*продемонстрирована связь стереодифференциации с длиной и строением мостика, связывающего энантиомеры напроксена с донором; установлено, что степень стереодифференциации растёт с уменьшением длины и увеличением жёсткости мостика, связывающего донор и акцептор электрона, а также зависит от полярности среды;*

*впервые показаны различия в эффектах химической поляризации диастереомеров исследованных диад;*

*в работе проведены сравнения обнаруженных различий в реакционной способности диастереомеров с данными биохимических исследований.*

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:**

*установлены* новые особенности переноса электрона, обусловленные влиянием хиральных центров;

*впервые обнаружены* различия в эффектах химической поляризации ядер, а, следовательно, в вероятностях рекомбинации радикальных пар, содержащих (R)- и (S)-энантиомеры;

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:**

полученные результаты продемонстрировали заметные различия в фотоиндуцированных процессах с переносом заряда при участии (R)- и (S)-напроксена, что даёт потенциальную возможность направленного изменения в свойствах лекарств, созданных на основе нестероидных противовоспалительных препаратов. В частности, на сегодняшний день обнаружено несколько направлений в лечебном действии этих препаратов, в которых лечебными свойствами обладает не только (S)-, но и (R)-изомер.

**Оценка достоверности результатов исследования**

*подтверждается* совместным использованием взаимодополняющих современных методов: химической поляризации ядер и времяразрешенной флуоресцентной спектроскопии. Кроме того, правильность предложенной схемы согласуется с расчётами зависимостей эффектов химической поляризации от диэлектрической проницаемости среды, выполненными в рамках теории радикальных пар (расчёты выполнены Д.В. Сосновским). Также *проведена* апробация работы на 12 научных конференциях различного уровня, включая специализированные международные; результаты работы успешно прошли рецензирование в тематических научных журналах.

**Личный вклад соискателя состоит** в получении и обработке спектров химической поляризации ядер, спектров и кинетических кривых флуоресценции в средах различной полярности для всех исследованных систем. Также, соискателем было проведено моделирование всех полученных экспериментальных кинетических кривых люминесценции, из которого были получены константы скоростей элементарных стадий фотоиндуцированного процесса. Соискатель также лично участвовал в постановке задач, обсуждении результатов, формулировке выводов и написании публикаций по теме диссертационной работы.

Диссертационный совет Д 003.051.01 на заседании 26 октября 2016 г., протокол №13 пришел к выводу о том, что диссертация соответствует п.9 «Положения о присуждении ученых степеней» от 24 сентября 2013г. №842, т.е. представляет собой законченную научно-квалификационную работу, в которой установлена полная схема фотоиндуцированного взаимодействия энантиомеров

напроксена с хиральным донором (S)-N-метилпирролидином в средах различной

полярности, и принял решение присудить *Храмцовой Екатерине Андреевне* ученую степень кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 26 (двадцать шесть) человек, из них 11 (одиннадцать) докторов наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, участвовавших в заседании и голосовании, из 33 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение учёной степени – 26 (двадцать шесть), против присуждения учёной степени – 0 (нет), недействительных бюллетеней – 0 (нет).

Зам. председателя диссертационного совета

д.ф.-м.н.

Козлова Светлана Геннадьевна

Ученый секретарь диссертационного совета

д.ф.-м.н.

Надолинный Владимир Акимович

26.10.201

П  
за  
У

