

ОТЗЫВ
НА АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ КОЛЧИНОЙ ГАЛИНЫ ЮРЬЕВНЫ
«ЗАКОНОМЕРНОСТИ «СТРУКТУРА-СВОЙСТВО» ДЛЯ АНАЛИЗА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ
СВОЙСТВ S,N,O-ГЕТЕРООРГАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ» НА СОИСКАНИЕ УЧЁНОЙ
СТЕПЕНИ ДОКТОРА ТЕХНИЧЕСКИХ НАУК ПО СПЕЦИАЛЬНОСТИ 1.4.3.
«ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

Диссертационная работа посвящена решению фундаментальной задачи установления корреляционных зависимостей «структура-свойства» как системы для интерпретации экспериментальных данных и прогнозирования функциональных свойств S,N,O-гетероорганических систем. Это становится особенно актуальным для направленного поиска и синтеза наиболее эффективных соединений, способных решать конкретные задачи в различных отраслях промышленности. Среди огромного разнообразия возможных объектов исследования автором были выбраны органические соединения, включающие в себя атомы кислорода, серы и азота. Органические вещества, содержащие гетероатомы, имеют практическое применение в качестве антиоксидантов, присадок, модификаторов к полимерам, маслам, топливу и другим важным продуктам. Традиционно сложившийся подход в поиске новых эффективных реагентов заключается в направленном синтезе целой серии близких по структуре соединений, часто гомологов, и дальнейшим их тестированием на способность проявлять то или иное свойство, например, снижать скорость коррозии, подавлять развитие бактерий, снижать скорость нежелательных реакций и т.д. Очевидно преимущество другого подхода – когда на основании расчётных методов, эмпирических данных удаётся сконструировать именно ту молекулу, которая сможет обеспечить наилучший практический результат. Это достаточно сложная задача сама по себе, поскольку прямые и очевидные зависимости свойства вещества и материала от состава и строения часто неочевидны. На практике ситуация осложняется ещё и трудностью получения молекул заданного состава, часто параллельно протекает несколько реакций, возникают трудности при выделении соединения в чистом виде для его последующего тестирования.

Поставленная в диссертационной работе цель достигалась вполне обоснованным подходом – всесторонним детальным исследованием отдельных классов соединений: направленным синтезом с изучением свойств, квантовохимическими расчётами, сравнением фактически полученных результатов по составу и свойствам веществ с расчётными и прогнозными значениями.

Несомненную ценность в качестве научных результатов представляет впервые осуществленный синтез сера- и селенсодержащих пространственно затруднённых бис-*p*-гидрокси-*m*- α -метилбензилфенолов, производных алкил- и арилсульфидов и дисульфидов, замещённых эфиров, содержащих алициклические кольца с гетероатомами. Практическая же ценность заключается в оценке способности данных соединений выступать в роли многофункциональных присадок.

Важным результатом исследований, полученным автором в ходе выполнения экспериментальной части диссертационной работы, являются выявленные закономерности изменения антиокислительной, биологической, антикоррозионной, антимикробной и противоизносной активностей у S,N,O-гетероорганических систем в зависимости от их структурных особенностей, которые могут быть использованы при синтезе новых S,N,O-функциональных соединений. Определены конкретные соединения, относящиеся к указанной группе веществ, способных проявлять

антиокислительную, бактерицидную, противокоррозионную, противоизносную активность. Полученные результаты, несомненно, имеют высокую практическую ценность, особенно в контексте ускоренного решения задачи по импортозамещению некоторых зарубежных присадок и функциональных добавок.

В частности, были синтезированы бис[*n*- α -метилбензил-*m*-метил-2-гидрокси-фенил]дисульфид(селенид)ы, для которых была предположена и в дальнейшем изучена бактерицидная и фунгицидная активность по отношению к бактериям и грибам, выявленных в составах моторных масел М-8 и М-11. В сравнении с применяемым биоцидом 8-оксихинолином, полученные пространственно затруднённые дисульфиды и диселениды показали существенно лучший бактерицидный эффект при меньшей концентрации. Через анализ молекулярных индексов реакционной способности (потенциал ионизации, химический потенциал, электроотрицательность и др.) была выявлена зависимость бактерицидной активности бис[*n*- α -метилбензил-*m*-метил-2-гидрокси-фенил]дисульфид (селенид)ов от значений энергии граничных молекулярных орбиталей. При помощи метода множественной регрессии были построены трёхмерные графики зависимостей бактерицидных и фунгицидных свойств от величин энергии высшей занятой и нижней свободной молекулярных орбиталей. Полученные в ходе исследований уравнения могут быть использованы для прогнозирования антимикробных свойств синтезированных соединений и других S,N,O-гетероорганических систем.

Достоверность полученных в ходе выполнения диссертационной работы результатов подтверждается применением физико-химических методов анализа для установления структуры и состава новых соединений, применением стандартных методик синтеза, сопоставлением с результатами контрольных экспериментов, соответствием с литературными данными, а также результатами квантовохимических расчётов с применением общепринятых методов. Дополнительным критерием оценки достоверности и качества проведённых исследований является участие автора во всероссийских и международных конференциях, публикация результатов в рецензируемых научных журналах, входящих в базы Web of Science, Scopus и рекомендованных перечнем ВАК. Полученные автором патенты подтверждают возможность практического применения полученных результатов.

В качестве замечаний и рекомендаций, не снижающих ценности, научной значимости и новизны работы, необходимо отметить следующие.

Для соединений, проявляющих функциональные свойства, рекомендуется проведение опытно-промышленных испытаний. Это было бы существенным усилением и подтверждением возможности практического применения синтезированных веществ.

Не проводится анализ опасности и степени воздействия полученных соединений на человека и окружающую среду. Вероятно, селенорганические соединения могут проявлять не только бактерицидную активность, но и быть опасными для высших живых организмов, что может затруднить их последующее внедрение.

В автореферате не приводятся фактические данные по биологической активности исследованных биомаркеров нафталанской нефти. Имеются только рассчитанные индексы реакционной способности и прогнозная антимикробная и антибактериальная активность. Большим плюсом работы могло бы стать выделение конкретных соединений из нефти и их дальнейшее исследование с целью оценки корректности полученных теоретических данных.

По совокупности изложенного, обоснованно можно заключить, что представленный в автореферате материал как по объёму, так и по содержанию характеризует диссертационную работу как комплексное, целостное и законченное научное исследование, подкрепленное экспериментальными данными, теоретическими расчётными, а также исследованиями функциональных свойств с практическими рекомендациями к промышленному применению. Сам автор работы Колчина Галина Юрьевна заслуживает присуждения степени доктора технических наук по специальности 1.4.3 – «Органическая химия».

Ведущий эксперт
центра компетенций по химизации
ООО «Газпромнефть НТЦ»
кандидат химических наук по
специальности
02.00.03 «Органическая химия»

РФ, 190000, Санкт-Петербург, наб. реки
Мойки, д.75-79
тел: +7(812) 313-69-24 (доб. (061) 3043)
факс: (812) 313-69-24
моб: +79179010565
Zhukov.AYur@gazpromneft-ntc.ru

