

## **ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА**

*на диссертационную работу Колчиной Галины Юрьевны  
«Закономерности «структура-свойство» для анализа функциональных  
свойств S,N,O-гетероорганических систем»,  
представленную на соискание ученой степени доктора технических наук  
по специальности 1.4.3. «Органическая химия»*

### **1. Актуальность выбранной темы диссертационной работы.**

Актуальность исследований в области органических соединений, содержащих электроотрицательные атомы (азот, кислород, серу) и фрагменты пространственно-затрудненных фенолов, обусловлена как особенностями их строения и поведения в химических реакциях, так и широким диапазоном их использования в ряде отраслей промышленности. Вещества, содержащие данные реакционные центры, могут выступать в качестве антиокислительных компонентов топлив и масел, пищевых продуктов, полимеров. Большое значение имеют органические соединения, содержащие гетероатомы, как компоненты для текстильных и полимерных материалов.

Вместе с тем, несмотря на достигнутые успехи в данной области органической химии, на современном этапе развития промышленности новые материалы и технологические процессы требуют создания высокоэффективных компонентов, обладающих комплексом функциональных свойств, что ставит задачу синтеза и изучения свойств новых представителей ряда S,N,O-гетероорганических соединений.

### **2. Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертационной работе.**

Научные положения, представленные в диссертационной работе, отражены в достаточно полном объеме, аргументированы и не противоречат современным теоретическим положениям в области органической химии.

Результаты диссертационной работы получены путем применения широко апробированных и запатентованных оригинальных инструментальных методов исследований, а также обрабатывались с использованием современных квантово-химических методов, теории эксперимента и математической статистики. Таким образом, достоверность полученных результатов не вызывает сомнений.

Полученные результаты глубоко проанализированы и обсуждались на международных и всероссийских научно-практических конференциях. Научные положения диссертации логично следуют из полученных теоретических и экспериментальных результатов.

### **3. Значимость полученных результатов для науки и практики.**

Диссертационная работа имеет ярко выраженную прикладную направленность, поскольку в ней решается одна из важных научно-технических проблем, а именно, поиск и выявление корреляционных зависимостей «структура-свойство» для интерпретации результатов исследований S,N,O-гетероорганических систем.

Представленные в диссертационной работе результаты исследований и сделанные обоснованные выводы имеют важное значение для науки и практического использования в области органической химии, разработки многофункциональных присадок для смазочных масел и смазочно-охлаждающих жидкостей, а также в процессах повышения качества синтезируемых присадок.

Автором выполнен большой объем теоретических и экспериментальных исследований, в результате которых получены S,N,O-гетероорганические вещества, обладающие различными видами активностей. Практическая значимость подтверждается рекомендациями по внедрению исследованных S,N,O-гетероорганических соединений в качестве многофункциональных присадок к смазочным маслам и смазочно-охлаждающим жидкостям и успешному применению научных результатов, представленных в диссертации Колчиной Г.Ю., в Научном центре ООО ПКФ «Полипласт» при прогнозировании функциональных свойств модификаторов и добавок к композиционным полимерным материалам.

#### **4. Достоверность и новизна научных положений, выводов и рекомендаций.**

Новизна проведенных исследований и полученных результатов заключается, прежде всего, в научном обосновании и экспериментальном подтверждении использования экспериментально-теоретического подхода для S,N,O-гетероорганических систем, обладающего прогностическим характером и позволяющего предсказывать различные виды активностей у данных классов соединений.

К числу наиболее существенных научных результатов диссертации, полученных автором, следует отнести следующие:

1) Проведение синтезов S- и Se-содержащих пространственно затрудненных бис-*n*-гидрокси-*m*- $\alpha$ -метилбензилфенолов, производных алкил- и арилсульфидов и дисульфидов, а также замещенных эфиров.

2) Выявление S,N,O-гетероорганических соединений, обладающие антиокислительными, биологическими, антикоррозионными, противоизносными, антимикробными видами активности.

3) Выявление закономерностей изменения различных видов активностей у S,N,O-гетероорганических систем в зависимости от их структурных особенностей, которые в дальнейшем могут быть использованы при направленном органическом синтезе данных классов соединений.

4) Разработка многофункциональной композиции, проявляющей как бактерицидные, так и ингибирующие свойства, которая в дальнейшем

может быть использована в качестве многофункциональной присадки к смазочным маслам и смазочно-охлаждающим жидкостям.

5) Выявление соединений среди биомаркерных молекул лечебной нафталанской нефти при проведении биоскрининге, проявляющих различные виды биологической активности при умеренной и низкой токсичности.

Завершают работу выводы, которые соответствуют поставленным задачам и в полной мере отражают полученные автором результаты. Достоверность и обоснованность основных выводов вытекает из использования апробированного набора современных методов исследования.

Достоверность полученных результатов обусловлена использованием современных методов исследования с привлечением аккредитованных аналитических (испытательных) лабораторий (центров) с использованием поверенных (калиброванных) средств измерений, аттестованного лабораторного оборудования для выполнения экспериментальных исследований и обработки полученных результатов измерений.

#### **5. Оценка содержания диссертационной работы, ее завершенность.**

Диссертационная работа написана хорошим научным языком с использованием общепринятой в научной и технической литературе терминологии. Результаты экспериментов и их обсуждения убедительны и согласуются с представленным графическим материалом. Материал изложен последовательно и логично. Рукопись диссертации хорошо оформлена.

Работа изложена на 318 страницах, состоит из введения, восьми глав, выводов, списка используемых источников, включающего 424 наименования и пяти приложений.

Таким образом, результаты работы соответствуют поставленной цели и достаточно полно опубликованы в открытой печати, а также в виде тезисов докладов на научных конференциях. Тема диссертации соответствует паспорту научной специальности 1.4.3. «Органическая химия», автореферат полностью отражает содержание работы.

#### **6. Основные замечания и рекомендации к диссертационной работе.**

1. В диссертационной работе представлены этапы экспериментально-теоретического подхода для прогнозирования функциональных свойств S,N,O-гетероорганических систем (рисунок 1). При этом нет описания переходов от одного этапа к другому.

2. Для изучения экспериментально-теоретического подхода в качестве объекта исследования выбраны соединения, обладающие антиокислительными, антимикробными, антикоррозионными и противоизносными активностями. В диссертационной работе не указано обоснование выбора именно этих объектов исследования.

3. На страницах 122-123 диссертации есть подробное описание пространственной структуры соединений фенольного типа. Применяется как анализ наличия функциональных групп и «мостиковых» связей, так и

оптимизация геометрии методами вычислительной химии. Однако не указано какие из этих факторов наиболее существенно влияют на практические свойства соединения.

4. В таблице 3.19 на странице 128 диссертации показаны результаты кинетических параметров и антиокислительной активности S-содержащих производных о-замещенных фенолов при концентрациях антиоксиданта 0,5 % масс. и 1,0 % масс. При этом нет обоснования выбора именно таких концентраций. Возможно, при более высоких концентрациях антиоксиданта кинетические параметры существенно изменились.

5. В главе 4 (страницы 168-175 диссертации) показаны результаты исследования антибактериальных свойств S,N,O-гетероорганических систем на бактериях *Pseudomonas fluorescences*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Nocardia*, *Mycobacterium lacticolium*, *Cladosporium resinae*. При этом не представлено обоснование выбора именно этих типов бактерий для изучения именно S,N,O-гетероорганических систем.

#### **7. Публикации, отражающие основное содержание работы.**

Основное содержание диссертации опубликовано в 85 научных трудах, в том числе 30 статьях в изданиях, входящих в перечень ВАК, 21 публикации в журналах, входящих в базы данных Web of Science и Scopus, трех монографиях и 5 патентах, что дополнительно свидетельствует о достоверности полученных результатов.

Считаю, что обоснованность и достоверность научных положений результатов работы и выводов не вызывают сомнений.

#### **8. Соответствие содержания автореферата основным идеям и выводам диссертации.**

Содержание и оформление автореферата соответствует всем требованиям ВАК, предъявляемым к авторефератам диссертаций на соискание ученой степени доктора технических наук, и полно отражает основные идеи и выводы диссертационной работы. Результаты представленной научно-квалификационной работы логичны и полностью обоснованы.

#### **9. Заключение о соответствии диссертационной работы критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней.**

Считаю, что представленная Колчиной Галиной Юрьевной диссертационная работа на тему «Закономерности «структура-свойство» для анализа функциональных свойств S,N,O-гетероорганических систем» является законченным самостоятельным научно-квалификационным исследованием, в котором на основе достаточного экспериментального и теоретического материала получены достоверные и значимые для теории и практики результаты, обладающие научной новизной. Она содержит новые научно обоснованные технические решения по эффективному применению экспериментально-теоретического подхода, с помощью которого возможно использование корреляционных зависимостей «структура-свойство» S,N,O-гетероорганических систем, выявленные в работе, для оценки эффективности новых разрабатываемых органических соединений в

качестве многофункциональных присадок к смазочным маслам и смазочно-охлаждающим жидкостям, что вносит существенный вклад в развитие химической и нефтехимической индустрии страны, и поэтому удовлетворяет критериям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в ред. постановления Правительства РФ от 21.04.2016 г. № 335), а ее автор Колчина Галина Юрьевна заслуживает присуждения ей ученой степени доктора технических наук по специальности 1.4.3. «Органическая химия».

**Официальный оппонент**  
**Николаев Александр Игоревич**

Доктор технических наук по специальности 02.00.13 – Нефтехимия, доцент профессор кафедры технологий нефтехимического синтеза и искусственного жидкого топлива имени А.Н. Баширова Института тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет»

Николаев Александр Игоревич

«10» мая 2023 г.

**Адрес:**

Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет»

119454, г. Москва, проспект Вернадского, 78

Телефон: +7(499)215-65-65

E-mail: [nikolaev\\_a@mirea.ru](mailto:nikolaev_a@mirea.ru)

Согласен на обработку моих персональных данных и размещение моего отзыва на диссертацию на сайте ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет».

Подпись Николаева А.И. заверяю

