

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.428.04,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФГБОУ ВО «УФИМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
НЕФТЯНОЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ» МИНИСТЕРСТВА НАУКИ
И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 20 июня 2023 г. № 3

О присуждении **Колчиной Галине Юрьевне**, гражданке Российской Федерации, ученой степени доктора технических наук.

Диссертация «Закономерности «структура-свойство» для анализа функциональных свойств S,N,O-гетероорганических систем» на соискание ученой степени доктора технических наук по специальности 1.4.3. «Органическая химия» принята к защите 6 марта 2023 года, протокол № 2 диссертационным советом 24.2.428.04, созданным на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет» Минобрнауки РФ (450064, г. Уфа, ул. Космонавтов, д. 1; приказ № 1325/нк от 24 октября 2022 г.).

Соискатель Колчина Галина Юрьевна 1988 года рождения.

Диссертацию на соискание ученой степени кандидата химических наук на тему: «Синтез и квантовохимические исследования некоторых производных нитрилов» по специальности 02.00.13 – «Нефтехимия» защитила в 2013 году в диссертационном совете Д 212.289.01, созданном на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет».

Колчина Галина Юрьевна в 2020 г. получила ученое звание доцента по специальности «Органическая химия» (приказ от 19 марта 2020 г. №373/нк-2).

Колчина Галина Юрьевна работает доцентом кафедры химии и химической технологии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий», Стерлитамакский филиал.

Диссертационная работа выполнена на кафедре химии и химической технологии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий», Стерлитамакский филиал.

Научный консультант – доктор химических наук, профессор Мовсумзаде Эльдар Мирсамедович, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет», кафедра общей, аналитической и прикладной химии, профессор.

Официальные оппоненты:

1. Берлин Александр Александрович – академик РАН, доктор химических наук, профессор, ФГБУН «Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук», научный руководитель;

2. Николаев Александр Игоревич – доктор технических наук, доцент, Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет», профессор кафедры технологий нефтехимического синтеза и искусственного жидкого топлива им. А.Н. Башкирова;

3. Бермешев Максим Владимирович – доктор химических наук, доцент, ФГБУН Ордена Трудового Красного Знамени «Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук», заведующий лабораторией кремнийорганических и углеводородных циклических соединений

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Российский государственный университет нефти и газа (национальный исследовательский

университет) имени И.М. Губкина» (г. Москва), в своем положительном отзыве, подписанном Винокуровым Владимиром Арнольдовичем, доктором химических наук, профессором, заведующим кафедрой физической и коллоидной химии, указала, что диссертационная работа Колчиной Г.Ю. удовлетворяет требованиям ВАК РФ, предъявляемым к докторским диссертациям (п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 года №842), а её автор Колчина Галина Юрьевна заслуживает присуждения ученой степени доктора технических наук по специальности 1.4.3. «Органическая химия».

Диссертация содержит новые научно обоснованные технические решения по эффективному применению разработанного подхода, позволяющего использовать выявленные корреляционные закономерности «структура-свойство» для оценки эффективности разрабатываемых многофункциональных присадок на основе S,N,O-гетероорганических систем к смазочным маслам и смазочно-охлаждающим жидкостям.

Соискатель имеет 156 опубликованных работ, в том числе 85 публикаций (общий объем 1055 стр., доля автора 611 стр.) по теме диссертации, из них 30 в соавторстве объемом 179 стр. (доля автора 132 стр.) в журналах, рекомендованных ВАК; 21 статья в журналах, индексируемых в базах данных Scopus и Web of Science объемом 250 стр. (доля автора 124 стр.); 5 патентов в соавторстве; 3 монографии в соавторстве объемом 358 стр. (доля автора – 286 стр.); 1 глава в 1 монографии, объемом 203 стр. (доля автора – 8 стр.); 4 статьи в тематических сборниках научных трудов в соавторстве, объемом 25 стр. (доля автора – 24 стр.); 21 работа в прочих изданиях и в материалах международных и всероссийских конференций, объемом 40 стр. (доля автора – 37 стр.).

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Kolchina, G.Yu. Effect of α -methylbenzylphenol derivatives on the antioxidant and anticorrosion characteristics of lubricating oils / G.Yu. Kolchina, E.M. Movsumzade, R.R. Tukhvatullin, E.R. Babayev // DGMK Tagungsbericht. – 2017. – P. 245-251.

2. Tukhvatullin, R.F. Synthesis and research of geometry and electronic density of hindered phenols used as antioxidant additives for lubricating oils / R.F. Tukhvatullin, G.Y. Kolchina, E.M. Movsumzade, P.S. Mamedova, E.R. Babaev // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология. – 2018. – V. 61. – N 4-5. – P. 84-92.

3. Lapidus, A.L. Dependence of reactivity on the structural and physicochemical characteristics of heavy highly viscous oil components / A.L. Lapidus, A.M. Gyulmaliev, O.Y. Poletaeva, G.Y. Kolchina, S.N. Guseynova, E.M. Movsumzade // Solid Fuel Chemistry. – 2019. – V. 53. – N 2. – P. 83-89.

4. Колчина, Г.Ю. Изучение структурных особенностей и термодинамических параметров целлюлозы и некоторых ее производных / Г.Ю. Колчина, О.Х. Каримов, И.А. Четвертнева, Г.А. Тептерева, Э.М. Мовсумзаде, Э.Х. Каримов // Промышленное производство и использование эластомеров. – 2019. – № 4. – С. 17-21.

5. Колчина, Г.Ю. Исследование влияния строения молекул многофункциональных присадок на эффективность их действия в нефтях и нефтепродуктах / Г.Ю. Колчина, О.Ю. Полетаева, Э.М. Мовсумзаде, Э.Р. Бабаев, А.Ю. Бахтина, П.Ш. Мамедова // Башкирский химический журнал. – 2020. – Т. 27. – № 1. – С. 28-32.

6. Kolchina, G.Yu. Comparative features of structure and properties of biomarkers Naphthalan petroleum / G.Yu. Kolchina, E.M. Movsumzade // ChemChemTech. – 2020. – V. 63. – N 7. – P. 82-87.

7. Колчина, Г.Ю. Квантовохимические расчеты гетероциклических систем в нефтехимии / Г.Ю. Колчина, А.Ю. Бахтина, И.З. Мухаметзянов, Э.М. Мовсумзаде // Москва: Изд-во "ОБРАКАДЕМНАУКА". – 2020. – 106 с.

8. Колчина, Г.Ю. Физико-химическое обоснование бальнеологических свойств составляющих нафталанской нефти / Г.Ю. Колчина, В.А. Адигёзалова, Э.М. Мовсумзаде // Москва: Изд-во "ОБРАКАДЕМНАУКА". – 2021. – с. 160.

9. Колчина, Г.Ю. Расчеты и определение параметров составляющих нафталанских нефтей и установление их состояния и предположительных

активностей / Г.Ю. Колчина, А.Ю. Бахтина, М.М. Мовсумзаде, М.Е. Логинова // Нефтегазохимия. – 2022. – № 1-2. – С. 30-35.

10. Колчина, Г.Ю. Гетероатомные модификаторы в процессах адсорбции и мембранной диффузии / Г.А. Тептерева, О.Х. Каримов, Е.В. Чуйко, Э.Х. Каримов, Э.М. Мовсумзаде, М.Е. Логинова // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология. – 2022. – Т. 65. – № 6. – С. 12-19.

На автореферат и диссертацию поступило 7 положительных отзывов с замечаниями из следующих организаций:

1. ООО «Газпромнефть – Технологические партнерства», Блок по разработке трудноизвлекаемых запасов, подписал руководитель направления, доктор технических наук (05.17.04) Прочухан К.Ю. (1. Проводили ли экспериментально для синтезированных образцов определение кислотного числа до введения и после введения присадок? 2. Эффективность фенольных антиокислителей зависит от их строения: она возрастает, если алкильные группы замещаются две в *o*- и одна в *n*-положениях, и еще более усиливается, если *o*-заместителем являются третичные алкильные группы. Замещаются на что? По сравнению с чем? (с. 20-21 автореферата);

2. ООО «Газпромнефть НТЦ», подписал ведущий эксперт центра компетенций по химизации, кандидат химических наук (02.00.03) Жуков А.Ю. (1. Для соединений, проявляющих функциональные свойства, рекомендуется проведение опытно-промышленных испытаний. Это было бы существенным усилением и подтверждением возможности практического применения синтезированных веществ. 2. 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. 3. 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);

3. Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, подписал заведующий кафедрой «Химическая технология основного органического и нефтехимического синтеза», доктор химических наук (05.17.04) Козловский Р.А. (При рассмотрении антиокислительной активности на странице 18 автореферата доказано влияние значения ROH и наличие серы в структуре молекулы, при этом не рассматривается эффективность этих двух факторов в отдельности);

4. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, подписал академик РАН, заведующий лабораторией металлокомплексных и наноразмерных катализаторов, доктор химических наук (02.00.03) Анаников В.П. (1. На стр. 22 автореферата указано, что значения констант скоростей реакций соединений с кумилпероксидными радикалами достаточно высоки. Однако нет уточнения относительно какого значения приводится данное сравнение. 2. По результатам расчетов параметров триазинов в разделе 7 установлено, что наибольшей стабильностью обладает анион под номером 6. При этом нет указаний на практическое применение данного соединения. 3. Было бы интересно провести корреляцию между параметрами ароматичности и относительной энергией представленных $-S-S-$ и $-S-Se-S-$ содержащих пространственно затрудненных фенолов);

5. Федеральное государственное автономное образовательное учреждение «Российский государственный университет нефти и газа (национальный исследовательский университет) имени И.М. Губкина, подписал проректор по учебной работе, заведующий кафедрой Органической химии и химии нефти, доктор химических наук (02.00.03) Кошелев В.Н. (1. На III этапе (стр. 14-15 автореферата) показано, что значения индексов глобальной электрофильности (ω , эВ) исследуемых соединений значительно превышают

аналогичное значение у фенола в 8-9 раз и дано развернутое обоснование этим результатам. При этом обоснование корреляции с антимикробными свойствами представлено слабо. 2. На стр. 16 автореферата показано доказательство, что нельзя применять линейную зависимость при описании биологической активности, а также роста жесткости молекулы путем сопротивления деформации из-за электрического поля и эффекта химических реакций. В таком случае рекомендуется предложить другую зависимость, альтернативную линейной);

6. ФГБУН «Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН», подписал заведующий лабораторией каталитических реакций оксидов углерода, доктор химических наук (02.00.13) Елисеев О.Л. (1. На странице 17 автореферата для дисульфидов нет обоснования увеличения значения $R(OH)$ в ряду соединений 7a-7c с последующим уменьшением для 7d. 2. В восьмой главе подробно рассматриваются устойчивость геометрической формы и конформация колец биомаркеров нафталанской нефти. При этом нет пояснения эффективности свойств каждой формы соединения в отдельности);

7. Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», подписал профессор кафедры химической энзимологии химического факультета, доктор химических наук (03.01.04) Тишков В.И. (Без замечаний).

Выбор официальных оппонентов обоснован их компетентностью в данной отрасли науки, что подтверждается имеющимися у них публикациями в сфере исследований соискателя.

Берлин Александр Александрович – известный учёный в области физики и химии высокомолекулярных соединений и композиционных материалов, автор более 1400 научных работ и более 100 авторских свидетельств и патентов;

Николаев Александр Игоревич – признанный специалист в области нефтехимического синтеза, автор более 300 научных работ;

Бермешев Максим Владимирович – специалист в области гетероорганических циклических соединений, автор более 200 научных публикаций.

Ведущая организация широко известна своими разработками и достижениями в области исследований органической химии. Заведующий кафедрой физической и коллоидной химии Винокуров Владимир Арнольдович - специалист в области физической органической химии и химии поверхностно-активных веществ, автор более 400 публикаций.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработан и апробирован экспериментально-теоретический алгоритм, позволяющий с вероятной степенью надежности (не менее 96%) спрогнозировать предполагаемые свойства S,N,O-гетероорганических систем, а также вести направленный органический синтез веществ с заранее определенными свойствами;

предложена модель для интерпретации экспериментальных данных и прогнозирования функциональных свойств S,N,O-гетероорганических соединений;

доказаны и теоретически обоснованы закономерности, связывающие индекс реакционной способности (корреляционный параметр) и эксплуатационные свойства в рядах S,N,O-гетероорганических систем;

введены корреляции антиокислительной, биологической, противоизносной, антикоррозионной, антимикробной активностей у S,N,O-гетероорганических соединений от их структурных особенностей, которые могут быть получены при синтезе новых S,N,O-функциональных соединений.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказаны новые расчетные схемы и экспериментально-теоретический подход на S,N,O-гетероорганических системах, сочетающие физико-химический эксперимент и его корреляцию с квантовохимическими расчетами теоретических значений основных параметров оптимизированных структур, обладающие прогностическим характером, позволяющим с достаточно высокой

степенью надежности предсказывать виды активностей у изученных классов соединений;

применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов) использован комплекс существующих базовых методов исследования, в т.ч. численных методов, экспериментальных методик для синтеза и исследования физико-химических свойств дитио- и дитиоселенсодержащих пространственно затрудненных фенолов α -метилбензильными группами, производных алкил- и арилсульфидов и дисульфидов, замещенных эфиров, содержащих алициклические кольца с гетероатомами, и тритерпенов;

изложен комплексный анализ научных работ, посвященных исследованию проявляемых многофункциональных свойств соединений, рекомендуемых в качестве присадок к смазочным маслам и смазочно-охлаждающим жидкостям;

раскрыты корреляционные зависимости изменения антиокислительной, биологической, антикоррозионной, противоизносной, антимикробной активностей у S,N,O-гетероорганических соединений в зависимости от их строения и структурных особенностей, которые могут быть использованы при синтезе новых S,N,O-функциональных соединений;

изучены физико-химические показатели и свойства дитио- и дитиоселенсодержащих пространственно затрудненных фенолов α -метилбензильными группами, производных алкил- и арилсульфидов и дисульфидов, замещенных эфиров, содержащих алициклические кольца с гетероатомами, и тритерпенов, влияние их строения и структурных особенностей на антиокислительную, антикоррозионную, противоизносную, биологическую и антимикробную виды активностей;

проведена модернизация методов вычислительной химии в виде алгоритма, обеспечивающего получение новых результатов по изучению физико-химических свойств S,N,O-гетероорганических систем.

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

разработаны и внедрены многофункциональные материалы, имеющие практическое подтверждение эффективных антиокислительных, антикоррозионных, противоизносных, антимикробных и бактерицидных свойств;

определены новые технические решения, значительно расширяющие диапазон эффективного применения S,N,O-гетероорганических соединений как многофункциональных присадок к смазочным маслам и смазочно-охлаждающим жидкостям;

создана система практических рекомендаций, сочетающая физико-химический эксперимент и его трактовку с прямыми квантовохимическими расчетами теоретических значений основных параметров S,N,O-гетероорганических систем;

представлены рекомендации по дальнейшему совершенствованию и поиску корреляционных закономерностей «структура-свойство» для интерпретации экспериментальных данных и прогнозирования функциональных свойств S,N,O-гетероорганических систем на основе методов вычислительной химии.

Другие научные достижения, свидетельствующие о научной новизне и значимости полученных результатов внедрены в области использования антиоксидантов в производстве полимерных материалов для медицинской, автомобильной и строительной отраслей. Обоснованность проведенных исследований подтверждены 5 патентами Российской Федерации и Азербайджанской республики.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

для экспериментальных работ исследования были осуществлены на оборудовании, прошедшем государственную поверку;

теория согласуется с опубликованными экспериментальными данными по теме диссертации;

идея базируется на поиске, рассмотрении и анализе работ ученых в области синтеза, определения и изучения физико-химических свойств S,N,O-гетероорганических систем;

использованы современные методы органического синтеза, выделения и очистки полученных соединений; структура и чистота синтезированных веществ установлены с помощью физико-химических методов анализа;

установлены высокоуровневые квантово-химические расчеты в рамках теории функционала плотности для определения основных параметров S,N,O-гетероорганических систем и сравнения их с экспериментальными данными с привлечением высокопроизводительных вычислительных машин с использованием стандартных квантово-химических программ.

Личный вклад соискателя состоит в:

непосредственном участии соискателя по рассмотрению проблемных вопросов и системному анализу литературных данных, планированию и проведению всех этапов теоретических расчетных и экспериментальных работ, их последующему анализу, обработке и апробации результатов проведенных исследований.

Диссертация соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается последовательным изложением материала и взаимосвязью выводов с поставленными задачами.

Диссертационная работа Колчиной Галины Юрьевны соответствует критериям п.9–п.14 «Положения о присуждении ученых степеней» ВАК Министерства науки и высшего образования РФ, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года №842 (в ред. Постановления Правительства РФ от 21.04.2016 №335), предъявляемым к докторским диссертациям, и является научно-квалификационной работой.

В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации. В диссертации не используется заимствованный материал без ссылки на автора и источник заимствования.

В ходе защиты диссертации не было высказано критических замечаний.

На заседании 20 июня 2023 года диссертационный совет 24.2.428.04 принял решение присудить Колчиной Галине Юрьевне ученую степень доктора

технических наук по специальности 1.4.3. «Органическая химия» за научно обоснованные технические решения по эффективному применению разработанного алгоритма, позволяющего использовать выявленные корреляционные закономерности «структура-свойство» для оценки эффективности разрабатываемых многофункциональных присадок на основе S,N,O-гетероорганических систем к смазочным маслам и смазочно-охлаждающим жидкостям, внедрение которых вносит значительный вклад в развитие страны.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 18 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 17, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель
диссертационного совета
доктор технических наук

Шаммазов Айрат Мингазович

Ученый секретарь
диссертационного совета
кандидат физико-математических наук



Логина Марианна Евгеньевна

20 июня 2023 г.