

**«УТВЕРЖДАЮ»**

Врио Председателя Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, доктор экономических наук



Р.Р. Ахунов

«25» *января* 2019 г.

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

**Федерального государственного бюджетного научного учреждения  
Уфимского федерального исследовательского центра  
Российской академии наук**

Диссертационная работа на тему «Молекулярная и кристаллическая структура ряда  $\alpha,\omega$ -алкан-дитиолов, 1,5,3-дитиазепанов и 1,2-бензо-1,5,3-дитиазепинов» выполнена в Институте нефтехимии и катализа - обособленном структурном подразделении Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (ИНК УФИЦ РАН).

В период подготовки диссертации Мещерякова Екатерина Сергеевна обучалась в очной аспирантуре Института нефтехимии и катализа Российской академии наук. С 2017 г. по настоящее время работает младшим научным сотрудником лаборатории структурной химии ИНК УФИЦ РАН.

Мещерякова Екатерина Сергеевна в 2012 г. окончила с отличием Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Башкирский государственный университет» по квалификации «Биолог».

**Удостоверение о сдаче кандидатских экзаменов и справка об обучении**  
выданы 20 марта 2019 г. Федеральным государственным бюджетным научным учреждением Уфимским федеральным исследовательским центром Российской академии наук.

**Научный руководитель** – Халилов Леонард Мухибович, доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории структурной химии Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (ИНК УФИЦ РАН).

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

**Оценка выполненной соискателем работы**

Диссертационная работа Мещеряковой Е.С. является самостоятельной законченной научно-исследовательской работой и отвечает критериям пп. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

**Наиболее существенные научные результаты,  
полученные лично соискателем**

Личный вклад автора диссертации заключается в сборе и анализе литературных данных по теме диссертации, реализации поставленных в работе задач, анализе результатов и формулировании выводов. Диссертация написана автором самостоятельно. Автором методами рентгеноструктурного анализа получены новые данные о молекулярном и кристаллическом строении соединений ряда практически важных классов  $\alpha,\omega$ -алкан-дитиолов, 1,5,3-дитиазепанов и 1,2-бензо-1,5,3-дитиазепинов. Материалы исследований подготовлены для публикации в научной печати и представления на научных конференциях.

**Достоверность полученных результатов**

Результаты, полученные в диссертационной работе, удовлетворяют необходимым критериям воспроизводимости и получены с использованием современных физико-химических методов исследования на сертифицированном

оборудовании. Достоверность результатов работы не вызывает сомнений и подтверждается данными, полученными с применением современных методов идентификации: монокристальной рентгеновской дифрактометрии, 1D- и 2D-спектроскопии ядерного магнитного резонанса  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  и квантово-химических расчетов.

### **Научная новизна полученных результатов**

Впервые осуществлен систематический анализ молекулярного и кристаллического строения циклических и ациклических производных  $\alpha,\omega$ -алкан- и 1,2-бензо-дитиолов.

Установлено, что производные  $\alpha,\omega$ -бис-сульфанилалканов в кристаллическом состоянии имеют преимущественно плоскую зигзагообразную конформацию независимо от числа метиленовых звеньев.

Впервые выявлено, что центры молекул  $\alpha,\omega$ -бис-сульфанилалканов с четным числом  $\text{CH}_2$ -групп в метиленовой цепи в преобладающем числе случаев располагаются на инверсионных центрах кристалла («частное положение»), тогда как с нечетным – между элементами симметрии («общее положение»).

Установлена молекулярная и кристаллическая структура восьми новых аминокислотных производных 1,5,3-дитиазепанов и впервые обнаружено влияние стереоэлектронных эффектов гетероатомных фрагментов N–C–S в 1,5,3-дитиазепановом цикле.

Выявлена взаимосвязь между наличием асимметричного углеродного атома в заместителе и типом формируемого «синтона» в ряду аминокислотных производных 1,5,3-дитиазепана, которая заключается в образовании циклических димеров аминокислотными остатками без асимметричного углеродного атома и цепей за счет аминокислотных фрагментов с асимметричным углеродным атомом.

Впервые изучена молекулярная и кристаллическая структуры пяти новых галогенфенильных производных бензо-1,5,3-дитиазепинов и обнаружено влияние стереоэлектронных эффектов на двух геминальных N–C–S фрагментах, которые выражены в симбатном увеличении длины C–S и укорочении C–N связей.

## **Практическая значимость и ценность результатов**

Установленные закономерности пространственного строения соединений ряда  $\alpha,\omega$ -бис-сульфанилалканов, 1,5,3-дитиазепанов и бензо-1,5,3-дитиазепинов, а также обнаруженные и изученные в этом ряду соединений стереоэлектронные эффекты будут способствовать выявлению взаимосвязи «структура – активность» при разработке препаратов для сельского хозяйства, а также лигандов для создания эффективных катализаторов.

## **Полнота изложения материалов диссертации в опубликованных работах**

По материалам диссертации опубликовано 8 научных трудов, из них 6 статей опубликованы в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК для размещения материалов диссертации и тезисы 2 докладов в сборниках материалов конференций.

### **Список статей:**

1. Khalilov L. M., Structure of  $\alpha,\omega$ -bis-(pentane-2,4-dione-3-ylmethylsulfanyl)-alkanes and even/odd crystallization effects / L. M. Khalilov, A. R. Tulyabaev, **E. S. Mescheryakova**, N. S. Akhmadiev, Y. I. Timirov, O. A. Skaldin, V. R. Akhmetova // J. Cryst. Growth. – 2015. – V. 426. – P. 214–220.
2. Tulyabaev, A. R. Intermolecular interactions and chiral crystallization effects in (1,5,3-dithiazepan-3-yl)-alkanoic acids / A. R. Tulyabaev, **E. S. Mescheryakova**, G. R. Khabibullina, L. M. Khalilov // Cryst. Eng. Comm. – 2016. – V. 18. – P. 5686–5696.
3. Khabibullina, G. R. A green synthesis in water of novel (1,5,3-dithiazepan-3-yl)alkanoic acids by the multicomponent reaction of amino acids, CH<sub>2</sub>O and 1,2-ethanedithiol / G. R. Khabibullina, E. S. Fedotova, V. R. Akhmetova, **E. S. Mescheryakova**, L. M. Khalilov, A. G. Ibragimov // Mol. Divers. – 2016. – V. 20. – P. 557–565.
4. Akhmetova, V. R. Catalytic multicomponent thiomethylation of aliphatic 1,3-diketones as efficient one-pot synthesis of novel bis(1,3-diketone-2-ylmethylsulphanyl)alkanes / V. R. Akhmetova, N. S. Akhmadiev, Z. A. Starikova, A. R. Tulyabaev, **E. S. Mescheryakova**, A. G. Ibragimov // Tetrahedron. – 2015. – V. 71. – P. 7722–7728.

5. Ахметова, В.Р. Мультикомпонентный синтез и биологическая активность (сульфанилалкил)замещенных азагетероциклов / В.Р. Ахметова, Н.С. Ахмадиев, **Е.С. Мещерякова**, Л.М. Халилов, А.Г. Ибрагимов // Химия гетероциклических соединений. – 2014. – Т. 50. – С. 806–815.
6. Махмудиярова, Н.Н. Эффективный синтез циклофанов, включающих атомы N, S, циклоаминометилированием бензолдитиолов с участием катализаторов на основе Sm / Н.Н. Махмудиярова, Г.М. Киямутдинова, **Е.С. Мещерякова**, А.Г. Ибрагимов, У.М. Джемилев // ЖОрХ. – 2016. – Т. 52. – С. 1430–1437.

#### **Соответствие содержания диссертации паспорту специальности**

Диссертация Мещеряковой Е.С. соответствует паспорту научной специальности 02.00.04 – Физическая химия, а именно пунктам: 1. «Экспериментальное определение и расчет параметров строения молекул и пространственной структуры веществ»; 4. «Теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия».

Диссертация «Молекулярная и кристаллическая структура ряда  $\alpha,\omega$ -алкан-дитиолов, 1,5,3-дигидрапанов и 1,2-бензо-1,5,3-дигидрапинов» Мещеряковой Екатерины Сергеевны рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Заключение принято на заседании объединенного научного семинара Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук.

Присутствовало на заседании 30 человек. Результаты голосования: «за» – 30 чел., «против» – нет, «воздержалось» – нет, протокол № 2 от 4 марта 2019 г.

Председатель объединенного семинара ИНК УФИЦ РАН,  
д.х.н., проф., чл.-корр. РАН

  
Джемилев Усеин Меметович

Секретарь объединенного семинара ИНК УФИЦ РАН,  
к.х.н., доцент

  
Савченко Римма Гафуровна