

Председателю диссертационного совета
Д 002.198.02 при УФИЦ РАН
д.х.н., проф., академику РАН Юнусову М.С.

**Заключение экспертной комиссии диссертационного совета Д.002.198.02
по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание
ученой степени доктора наук на базе Федерального государственного бюджетного
научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра
Российской академии наук**

от «16» апреля 2019 года по ознакомлению с диссертационной работой
Мещеряковой Екатерины Сергеевны, представленной на соискание
ученой степени кандидата химических наук по специальности
02.00.04 – «Физическая химия»

Председатель комиссии – д.х.н., проф. Хурсан Сергей Леонидович.

Члены комиссии:

д.х.н. проф. Шарипов Глюс Лябибович

д.х.н. Сабиров Денис Шамилевич

Комиссия диссертационного совета Д.002.198.02, ознакомившись с диссертационной работой младшего научного сотрудника лаборатории структурной химии Института нефтехимии и катализа - обособленного структурного подразделения ФГБНУ УФИЦ РАН Мещеряковой Екатерины Сергеевны на тему «Молекулярная и кристаллическая структура ряда α,ω -алкан-дитиолов, 1,5,3-дитиазепанов и 1,2-бензо-1,5,3-дитиазепинов» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия», пришла к следующему заключению:

1. Актуальность темы

Известно, что химические, физико-химические и биологические характеристики соединений напрямую зависят от конформационного строения молекул. В плане изучения конформационной подвижности органических соединений большой интерес представляют этан-1,2-дитиолы в составе широкого класса производных 1,2-дизамещенных этанов, на основе которых были выявлены основные закономерности

конформационного поведения ациклических соединений. Этан-1,2-дитиолы являются фрагментами конформационно заторможенных циклических соединений, находящих широкое применение в качестве лигандов в катализических системах, элементов молекулярной электроники, а также служат объектами для моделирования биохимических процессов.

Несмотря на то, что на основе этан-1,2-дитиолов получено большое разнообразие соединений с отличающейся конформационной подвижностью, в мировой литературе практически отсутствуют исследования, посвященные изучению влияния конформации исходных молекул на кристаллическую структуру 1,2-дитиоловых производных.

Диссертационное исследование Мещеряковой Е.С. посвящено изучению молекулярной и кристаллической структуры ряда α,ω -алкан-дитиолов, 1,5,3-дитиазепанов и 1,2-бензо-1,5,3-дитиазепинов. Полученные результаты будут способствовать выявлению связей «структура – активность» при разработке препаратов для сельского хозяйства, а также при поиске стратегии синтеза подходящих лигандов для создания эффективных катализаторов.

2. Личное участие соискателя в получении результатов, изложенных в диссертации

Личный вклад Мещеряковой Е.С. состоит в непосредственном участии в постановке задачи исследования, осуществлении вычислительных экспериментов, обработке исходных экспериментальных данных, интерпретации полученных результатов, их апробации, подготовке и написании статей и диссертации.

3. Достоверность результатов проведенных исследований

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

4. Научная новизна и практическая значимость

Впервые проведен систематический анализ молекулярного и кристаллического строения циклических и ациклических производных α,ω -алкан- и 1,2-бензо- дитиолов, отличающихся конформационным состоянием общего структурного фрагмента S–(CH_n)_m–S в исходных молекулах.

Установлено, что производные α,ω -бис-сульфанилалканов в кристаллическом состоянии имеют преимущественно плоскую зигзагообразную конформацию независимо от числа метиленовых звеньев. Впервые выявлено, что α,ω -бис-сульфанилалканы с четным числом CH_2 -групп в метиленовой цепи в преобладающем числе случаев занимают частное положение в кристалле, т.е. центры молекул занимают центры симметрии в кристаллах, тогда как нечетное число метиленовых групп приводит к упаковке молекул в общем положении.

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.

Установленные закономерности пространственного строения соединений ряда α,ω -бис-сульфанилалканов, 1,5,3-дитиазепанов и бензо-1,5,3-дитиазепинов, а также проявлений стереоэлектронных эффектов будут способствовать выявлению взаимосвязи «структура – активность» при разработке препаратов для сельского хозяйства, а также при формировании подходящих лигандов для создания эффективных катализаторов.

5. Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных соискателем

Автором опубликовано 8 печатных работ по теме диссертации, в том числе 6 статей в рецензируемых изданиях из Перечня ВАК РФ, что соответствует требованиям пп. 11 и 13 «Положения о порядке присуждения ученых степеней».

Наиболее значимыми являются следующие работы:

1. Khalilov L. M., Structure of α,ω -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 // CrystEngComm. – 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, CH₂O and 1,2-ethanedithiol / G. R. Khabibullina, E. S. Fedotova, V. R. Akhmetova, E. S. Mesheryakova, 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. Mesheryakova, 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 // ХГС. – 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.

6. Специальность, которой соответствует диссертация

Диссертационное исследование 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».

7. Ценность научных работ соискателя.

Полученные данные о роли стереоэлектронных эффектов в стабилизации реализующихся конформаций гетероциклов в ряду *α,ω*-*bis*-сульфанилалканов, аминокислотных производных 1,5,3-дитиазепанов и бензо-1,5,3-дитиазепинов представляют интерес для понимания конформационной предпочтительности в классах соединений, содержащих полярные связи и неподеленные электронные пары. Полученные результаты будут способствовать целенаправленному дизайну препаратов для сельского хозяйства, а также формированию подходящих лигандов для создания эффективных катализаторов. Выявленная взаимосвязь между наличием асимметричного углеродного

атома в заместителе и типом формируемого синтона в ряду аминокислотных производных 1,5,3-дитиазепана позволит получать кристаллы с определенной супрамолекулярной организацией, что представляет большой интерес в области инженерии кристаллов.

8. Научная зрелость соискателя

Мещерякова Екатерина Сергеевна в ходе выполнения диссертационной работы проявила себя высококвалифицированным специалистом, способным самостоятельно ставить задачи исследования и эффективно их решать, владеющим обширными знаниями в области химии, свободно ориентирующимся в специализированной отечественной и зарубежной литературе, имеющим многолетний опыт рентгеноструктурных исследований на монокристаллах, организации и проведения научных исследований. Мещерякова Е.С. является зрелым, компетентным специалистом, владеющим необходимыми навыками практической и научной деятельности, по своей квалификации заслуживающим степени кандидата химических наук.

9. Проверка диссертации на наличие заимствованного материала без ссылки на авторов.

В тексте диссертации соискатель ссылается на авторов и источники заимствования материалов и отдельных результатов, также отмечает полученные лично и (или) в соавторстве результаты, что соответствует п. 14 «Положения ...». Итоговая оценка оригинальности по системе проверки использования заимствованного материала без ссылки на автора составила 82.28 % (заключение экспертной комиссии и автоматический отчет прилагаются)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ:

Экспертная комиссия единогласно решила, что диссертационная работа **Мещеряковой Екатерины Сергеевны** «Молекулярная и кристаллическая структура ряда α,ω-алкан-дитиолов, 1,5,3-дитиазепанов и 1,2-бензо-1,5,3-дитиазепинов», представленная на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия», представляет собой научно-квалификационную работу, которая полностью соответствует критериям п. 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, отмечено отсутствие в диссертации заимствованного материала без ссылок на авторов или источники заимствования. Диссертационная работа **Мещеряковой Екатерины Сергеевны** «Молекулярная и кристаллическая структура ряда

α,ω-алкан-дитиолов, 1,5,3-дитиазепанов и 1,2-бензо-1,5,3-дитиазепинов» может быть рекомендована к официальной защите на Диссертационном совете Д 002.198.02 по специальности 02.00.04 – «Физическая химия».

Утвердить официальными оппонентами:

Литвинова Игоря Анатольевича – доктора химических наук, профессора, главного научного сотрудника лаборатории дифракционных методов исследований Института органической и физической химии им. А.Е. Арбузова – Обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук» (420088, г. Казань, ул. Академика Арбузова, 8, тел.+7(843)273-93-65, e-mail: litvinov@iopc.ru, сайт: <http://www.iopc.ru>);

Вакулина Ивана Валентиновича – доктора химических наук, профессора кафедры органической и биоорганической химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет» (450076, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32, тел.: 8(347)272-63-70, сайт: <http://www.bashedu.ru>)

Утвердить ведущую организацию:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Новосибирский Институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН) (630090, г. Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 9, тел.: +7(383)330-88-50, Факс: +7 (383)330-97-52, e-mail: benzol@nioch.nsc.ru, сайт: <http://www.nioch.nsc.ru>).

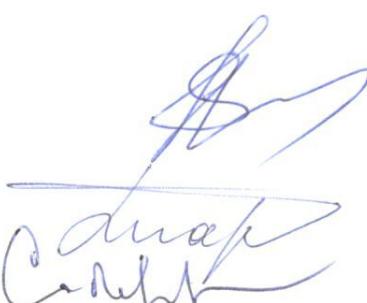
Председатель экспертной комиссии:

д.х.н., проф. Хурсан С.Л.

Члены комиссии

д.х.н. проф. Шарипов Г.Л.

д.х.н. Сабиров Д.Ш.



«16 » апреля 2019 г.

Заключение

о допустимости выявленного объема текстовых совпадений между текстом диссертации и источниками, авторство которых установлено, для рассмотрения рукописи диссертации как оригинальной научной (квалификационной) работы

по диссертации Мещеряковой Екатерины Сергеевны, выполненной на тему: «Молекулярная и кристаллическая структура ряда α,ω -алкан-дитиолов, 1,5,3-дитиазепанов и 1,2-бензо-1,5,3-дитиазепинов» представленной на соискание ученой степени кандидата наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия».

Экспертная комиссия в составе д.х.н., проф. Хурсана С.Л., д.х.н., проф. Шарипова Г.Л., д.х.н. Сабирова Д.Ш. рассмотрела представленный для проведения экспертизы комплект документов в составе:

1. Копия рукописи диссертации.
2. Распечатка текста диссертации.
3. Автоматический отчет системы «Антиплагиат» о выявленных текстовых совпадениях с указанием ссылок на источники совпадающих фрагментов.

Отчет о выявленных текстовых совпадениях и о количественно оцененной степени близости каждого выявленного совпадения, проведенной в системе Антиплагиат (www.antiplagiat.ru) выявил 16.92 % текстовых совпадений. Содержательная экспертиза текстовых совпадений с учетом ссылок на источники совпадающих фрагментов, детальной информации о совпадающих фрагментах показала, что выявленные совпадения представляют собой цитаты собственных материалов и корректное цитирование источников, с указанием ссылок на них.

Таким образом, на основании анализа информации о совпадающих фрагментах, их источниках и количество оцененной степени близости каждого выявленного совпадения комиссия постановила, что выявленный объем текстовых совпадений 16.92 % допустим для рассмотрения рукописи диссертации как оригинальной научной работы. Диссертация Мещеряковой Екатерины Сергеевны, выполненная на тему: «Молекулярная и кристаллическая структура ряда α,ω -алкан-дитиолов, 1,5,3-дитиазепанов и 1,2-бензо-1,5,3-дитиазепинов» представленной на соискание ученой степени кандидата наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия» может считаться полностью оригинальной работой.

Приложение: Автоматический отчет о проверке на плагиат диссертации Мещеряковой Екатерины Сергеевны «Молекулярная и кристаллическая структура ряда α,ω -алкан-дитиолов, 1,5,3-дитиазепанов и 1,2-бензо-1,5,3-дитиазепинов» представленной на соискание ученой степени кандидата наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия» (система антиплагиат www.antiplagiat.ru).

Пояснения к автоматическому отчету:

1. Источники № 6, 7, 9, 15 – являются ссылками на научную литературу по данной тематике, оформленные по ГОСТ.
2. Источники № 2, 3, 5, 4, 11, 16, 19 – содержат общепринятые аббревиатуры и расшифровки, часто употребляемые фразы и словосочетания, не являющиеся предметом авторской работы.
3. Источник № 1 – ссылки на публикации автора диссертации.
4. Источник № 20 – цитаты из научной литературы, оформленные по ГОСТ.

Председатель экспертной комиссии:

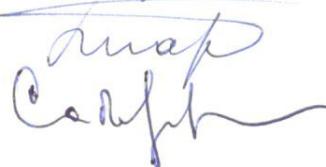
д.х.н., проф. Хурсан С.Л.



члены комиссии:

д.х.н., проф. Шарипов Г.Л.

д.х.н. Сабиров Д.Ш.



Председатель диссертационного совета Д 002.198.02,

д.х.н., проф., академик РАН Юнусов М.С.



Ученый секретарь диссертационного совета Д 002.198.02,

д.х.н. Фризен А.К.





Отчет о проверке на заимствования №1



Автор: katusha2974@gmail.com / ID: 6395929
Проверяющий: katusha2974@gmail.com / ID: 6395929

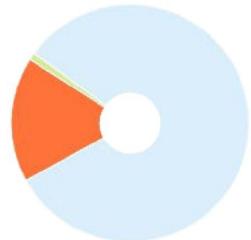
Отчет предоставлен сервисом «Антиплагиат» - <https://users.antiplagiat.ru>

ИНФОРМАЦИЯ О ДОКУМЕНТЕ

№ документа: 14
Начало загрузки: 20.03.2019 11:05:37
Длительность загрузки: 00:00:02
Имя исходного файла:
2019_1_Mescheryakova_dissertatsiya
Размер текста: 1367 кб
Символов в тексте: 112053
Слов в тексте: 13183
Число предложений: 617

ИНФОРМАЦИЯ ОБ ОТЧЕТЕ

Последний готовый отчет (ред.)
Начало проверки: 20.03.2019 11:05:39
Длительность проверки: 00:00:02
Комментарии: не указано
Модули поиска: Модуль поиска Интернет, Цитирование



Заимствования — доля всех найденных текстовых пересечений, за исключением тех, которые система отнесла к цитированию, по отношению к общему объему документа.
Цитирования — доля текстовых пересечений, которые не являются авторскими, но система посчитала их использование корректным, по отношению к общему объему документа. Сюда относятся оформленные по ГОСТу цитаты; общепотребительные выражения; фрагменты текста, найденные в источниках из коллекций нормативно-правовой документации.
Текстовое пересечение — фрагмент текста проверяемого документа, совпадающий или почти совпадающий с фрагментом текста источника.
Источник — документ, проиндексированный в системе и содержащийся в модуле поиска, по которому проводится проверка.
Оригинальность — доля фрагментов текста проверяемого документа, не обнаруженных ни в одном источнике, по которым шла проверка, по отношению к общему объему документа.
Заимствования, цитирования и оригинальность являются отдельными показателями и в сумме дают 100%, что соответствует всему тексту проверяемого документа.
Обращаем Ваше внимание, что система находит текстовые пересечения проверяемого документа с проиндексированными в системе текстовыми источниками. При этом система является вспомогательным инструментом, определение корректности и правомерности заимствований или цитирований, а также авторства текстовых фрагментов проверяемого документа остается в компетенции проверяющего.

№	Доля в отчете	Источник	Ссылка	Актуален на	Модуль поиска
[01]	11,11%	Скачать	https://ipc-ras.ru	06 Дек 2017	Модуль поиска Интернет
[02]	3,28%	Скачать	https://ipc-ras.ru	07 Дек 2017	Модуль поиска Интернет
[03]	0,39%	Скачать	https://ipc-ras.ru	31 Янв 2018	Модуль поиска Интернет
[04]	0,12%	Полный текст диссертации	http://iopc.ru	11 Дек 2016	Модуль поиска Интернет
[05]	0,24%	http://docspace.kubsu.ru/docspace/bitstream/handle/1/796/%d0%94%d0%b8%d1%81...	http://docspace.kubsu.ru	14 Сен 2018	Модуль поиска Интернет
[06]	0,55%	не указано	http://pereplet.ru	раньше 2011	Модуль поиска Интернет
[07]	0,55%	выступление	http://studfiles.ru	28 Июл 2016	Модуль поиска Интернет
[08]	0%	Диссертация_Нетреба_Е.Е..pdf	http://science.vsu.ru	15 Дек 2016	Модуль поиска Интернет
[09]	0,35%	не указано	http://douguo.ru	08 Окт 2016	Модуль поиска Интернет
[10]	0%	Диссертация...	http://ich.dvo.ru	05 Дек 2016	Модуль поиска Интернет
[11]	0,05%	https://esu.citis.ru/dissertation/16dc00KB23715JGh-2cLb00	https://esu.citis.ru	21 Mar 2018	Модуль поиска Интернет
[12]	0%	тексты	http://book.uraic.ru	25 Ноя 2017	Модуль поиска Интернет
[13]	0%	Межмолекулярные взаимодействия в кристаллах изоциануратов - скачать бесплатно...	http://fizmathim.com	17 Мая 2016	Модуль поиска Интернет
[14]	0,12%	https://esu.citis.ru/dissertation/QIARFNJT76C7II8HRP0DV6KJ	https://esu.citis.ru	20 Mar 2018	Модуль поиска Интернет
[15]	0,04%	http://dspace.kpfu.ru/xmlui/bitstream/handle/net/108444/Uchebnoe_posobie_EM_elek..	http://dspace.kpfu.ru	14 Сен 2018	Модуль поиска Интернет
[16]	0,06%	Текст диссертации	http://ipac.ac.ru	06 Дек 2016	Модуль поиска Интернет
[17]	0%	Диссертация (PDF, 5.72 MB)	http://isuct.ru	11 Янв 2017	Модуль поиска Интернет
[18]	0%	Полный текст диссертации (2/2)	https://ineos.ac.ru	24 Мая 2018	Модуль поиска Интернет
[19]	0,06%	https://ineos.ac.ru/files/scisecr/nelyubina/diss.pdf	https://ineos.ac.ru	06 Ноя 2018	Модуль поиска Интернет
[20]	0,8%	не указано	не указано	раньше 2011	Цитирование