

**«УТВЕРЖДАЮ»**

Председатель Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, доктор химических наук, профессор



  
В.П. Захаров

2021 г.

## **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

**Федерального государственного бюджетного научного учреждения**

**Уфимского федерального исследовательского центра**

**Российской академии наук**

Диссертация «Хемилюминесценция в реакции ароматических нитрозосоединений с трифенилфосфином» выполнена в Уфимском Институте химии – обособленном структурном подразделении Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (УфИХ УФИЦ РАН), в лаборатории химической кинетики.

В период подготовки диссертации соискатель Шамукаев Вадим Анатольевич обучался в очной аспирантуре (17.11.2009 – 16.11.2012) Института органической химии Уфимского научного центра Российской академии наук (ИОХ УНЦ РАН). С декабря 2009 г. по январь 2010 г. работал в должности инженера-исследователя, а с января 2010 г. по март 2018 г. в должности младшего научного сотрудника лаборатории химической кинетики УфИХ УФИЦ РАН. С апреля по октябрь 2018 г. занимал должность начальника цеха производства сополимера в филиале АО «Научно-производственное объединение по медицинским иммунобиологическим препаратам «Микроген» в г. Уфа «Имунопрепарат» (Филиал АО «НПО «Микроген» в г. Уфа «Имунопрепарат»), затем вернулся для продолжения работы в лаборатории химической кинетики УфИХ УФИЦ РАН в должности младшего

научного сотрудника. С ноября 2019 г. по настоящее время занимает должность старшего научного сотрудника 2-категории лаборатории катализаторов и адсорбентов дирекции Нефтехимия и катализ ООО «НИОСТ» группа компаний «СИБУР» в г. Томск.

В 2009 году Шамукаев Вадим Анатольевич окончил химический факультет Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Башкирский государственный университет» с присуждением степени магистра химии по направлению «Химия».

**Удостоверение о сдаче кандидатских экзаменов №15/652.3**, выданное Федеральным государственным бюджетным научным учреждением Уфимским федеральным исследовательским центром Российской академии наук 5 марта 2020 г., содержит сведения о сдаче кандидатских экзаменов по следующим дисциплинам: английский язык («хорошо», 27 мая 2010 г.), специальности 02.00.04 – Физическая химия («отлично», 3 июня 2011 г.). **Удостоверение о сдаче кандидатского экзамена №5-20**, выданное Федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования «Башкирский государственный университет» 11 марта 2020 г., содержит сведения о сдаче кандидатского экзамена по дисциплине: история и философия науки (химические науки) («отлично», 16 июня 2010 г.).

**Научный руководитель** – Сафиуллин Рустам Лутфуллович, доктор химических наук, старший научный сотрудник, заведующий лабораторией химической кинетики, директор Уфимского Института химии – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук.

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

#### **Оценка выполненной соискателем работы**

Диссертационная работа Шамукаева В.А. является цельной, самостоятельной и законченной научно-исследовательской работой, выполненной на высоком

профессиональном уровне, 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 Шамукаева В.А. заключается в изучении литературы по теме диссертации, выполнении экспериментов, квантово-химических расчетов свойств объектов, исследованных в диссертационной работе, анализе полученных данных и формулировании выводов, подготовке публикаций по теме диссертационной работы. Соискатель является подготовленным специалистом в области физической химии. В ходе выполнения диссертационной работы автором исследована хемилюминесценция в реакции ароматических нитрозосоединений с трифенилфосфином, предложен и доказан эмиттер излучения. На основе явления хемилюминесценции в изучаемом процессе разработан новый метод изучения реакционной способности триплетных фенилнитренов.

### **Достоверность полученных результатов**

Применение современных надежных экспериментальных и квантово-химических методов обеспечивает достоверность и надежность результатов, которая подтверждается хорошим соответствием между результатами и выводами, полученными в настоящей работе, и литературными экспериментальными данными о строении и свойствах триплетных фенилнитренов и ароматических нитрооксидов.

### **Научная новизна полученных результатов**

Впервые было обнаружено явление хемилюминесценции в реакции трифенилфосфина с нитрозобензолом и его *пара*-нитро и *пара*-метокси производными. При взаимодействии ароматических нитрозосоединений с трифенилфосфином в присутствии кислорода протекает цепная реакция. Этот цепной процесс существует вследствие взаимодействия *транс*-изомеров нитрооксидов, образующихся в данной системе, с трифенилфосфином с

регенерацией исходного нитрозобензола. Исходя из этого, можно сделать вывод, что изучение количественного состава продуктов реакции может дать искаженную картину о скоростях взаимодействия фенилнитрена с молекулярным кислородом и исходными реагентами. Принимая во внимание этот факт можно утверждать, что предлагаемый нами «хемилюминесцентный метод» является на сегодняшний день единственным методом измерения бимолекулярных констант скоростей реакции взаимодействия триплетного фенилнитрена с нитрозосоединением по отношению к константе скорости фенилнитрена с кислородом.

Поскольку само явление хемилюминесценции в реакции трифенилфосфина с нитрозобензолом ранее описано не было, то разработка хемилюминесцентного метода для определения констант скоростей в изучаемом процессе может считаться уникальной.

### **Практическая значимость и ценность результатов**

Практическая значимость проведенных исследований заключается в разработке нового хемилюминесцентного метода изучения реакционной способности триплетных фенилнитренов. Данным методом были впервые установлены кинетические параметры взаимодействия триплетного *пара*-метоксифенилнитрена с *пара*-метоксинитрозобензолом и трифенилфосфином. Использование этого метода открывает новые возможности для экспериментального изучения таких сложных и интересных объектов как триплетные фенилнитрены.

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

По материалам диссертации опубликовано 6 статей в научных журналах, рекомендованных ВАК, из которых 4 статьи включены в базы данных Web of Science и Scopus, и тезисы 7 докладов в сборниках материалов конференций.

### **Список статей:**

1. Чайникова, Е.М. Хемилюминесценция при деоксигенировании нитрозобензола трифенилфосфином / Е.М. Чайникова, А.Н. Терегулова, В.А.

**Шамукаев, Р.Л. Сафиуллин** // Химия высоких энергий. – 2009. – Т. 43. – № 2. – С. 191-192.

2. **Шамукаев, В.А.** Хемилюминесценция в реакции ароматических нитрозосоединений с трифенилфосфином / **В.А. Шамукаев, А.Н. Терегулова, С.С. Остахов, Р.Л. Сафиуллин** // Химия высоких энергий. – 2013. – Т. 47 – № 1. – С. 66-70.

3. **Хурсан, В.С.** Кинетика и механизм дезоксигенирования нитрозобензолов соединениями трехвалентного фосфора / **В.С. Хурсан, В.А. Шамукаев, Е.М. Чайникова, С.Л. Хурсан, Р.Л. Сафиуллин** // Известия АН. Серия Химическая. – 2013. – № 11. – С. 2477-2486.

4. **Шамукаев, В.А.** Квантово-химическое исследование механизма образования эмиттера хемилюминесценции в реакции нитрозобензола с трифенилфосфином / **В.А. Шамукаев, А.Н. Терегулова, Р.Л. Сафиуллин** // Вестник Башкирского университета. – 2015. – Т. 20. – № 2. – С. 423-425.

5. **Шамукаев, В.А.** Синтез (2E)-[(5E)-1-ацетил-5-(гидроскиимино)-1,5-дигидро-2H-пиррол-2-илиден]этанола дезоксигенированием 4-нитрозоацетанилида трифенилфосфином в присутствии кислорода / **В.А. Шамукаев, Е.М. Чайникова, А.Н. Терегулова, Р.Л. Сафиуллин** // Вестник Башкирского университета. – 2018. – Т. 23. – № 3. – С. 666-668.

6. **Шамукаев, В.А.** Хемилюминесцентный метод определения констант скорости реакций триплетных ароматических нитренов/ **В.А. Шамукаев, Е.М. Чайникова, А.М. Идрисова, Р.Л. Сафиуллин** // Химия высоких энергий. – 2018. – Т. 52. – № 2. – С. 109-115.

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

Диссертация Шамукаева В.А. соответствует паспорту научной специальности 1.4.4. Физическая химия, а именно пунктам: 7. Макрокинетика, механизмы сложных химических процессов, физико-химическая гидродинамика, растворение и кристаллизация; 9. Элементарные реакции с участием активных частиц; 10. Связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями осуществления химической реакции.

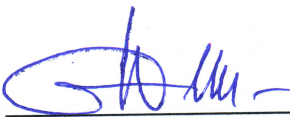
Диссертация «Хемилюминесценция в реакции ароматических нитрозосоединений с трифенилфосфином» Шамукаева Вадима Анатольевича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия, отрасль науки – Химические науки.

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

Присутствовало на заседании 52 человека. Принимало участие в голосовании 52 человека.

Результаты голосования: «за» – 52 чел., «против» – 0, «воздержалось» – 0; протокол № 6 от 30 июня 2021 г.

Председатель объединенного научного семинара УФИХ УФИЦ РАН, д.х.н.

 Р.Л. Сафиуллин

Секретарь объединенного научного семинара УФИХ УФИЦ РАН, к.х.н.

 Е.В. Карасева