

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе
федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего образования

«Уфимский университет науки и технологий»

Шарафуллин Ильдус Фанисович

« 25 » сентября 2026 г.



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий»

Диссертация «Энантоселективность хиральных кристаллов по отношению к ряду монотерпенов в процессах адсорбции» Шарафутдиновой Юлии Фанилевны на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – Физическая химия выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» (УУНиТ) на кафедре аналитической химии Института химии и защиты в чрезвычайных ситуациях.

В период подготовки диссертации соискатель Шарафутдинова Ю.Ф. обучалась в аспирантуре (очная форма обучения) по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, направленность Аналитическая химия. С 2023 года по настоящее время работает в должности ассистента кафедры аналитической химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий».

В 2019 г. окончила Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Башкирский

государственный университет» по направлению подготовки 04.04.01 Химия с присвоением квалификации «Химик». В 2025 г. окончила аспирантуру по очной форме обучения Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки с присвоением квалификации «Исследователь. Преподаватель-исследователь». Диплом об окончании аспирантуры выдан Федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» в 2025 г.

Справка об обучении со сведениями о сданных кандидатских экзаменах выдана Федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» в 2026 г.

Научный руководитель – Гуськов Владимир Юрьевич, доктор химических наук, доцент, заведующий кафедрой аналитической химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий».

Диссертация Шарафутдиновой Ю.Ф. была заслушана на расширенном заседании кафедры аналитической химии УУНиТ 26 января 2026 года (протокол № 10).

По итогам обсуждения диссертационной работы «Энантоселективность хиральных кристаллов по отношению к ряду монотерпенов в процессах адсорбции» принято следующее заключение:

Актуальность работы. К энантиоморфным (хиральным) относят кристаллы, атомная структура которых не совмещается со своим зеркальным отражением посредством вращения или поступательного перемещения. Они кристаллизуются в одной из 65 пространственных групп симметрии Зонке. Образование таких кристаллов возможно как в процессе кристаллизации изначально хиральных молекул, так и из ахиральных соединений. В последнем случае происходит кристаллизация рацемической смеси,

включающей равное количество право- и левовращающих кристаллов. Для синтеза гомохиральных кристаллов из ахиральных соединений Виедма в 2005 году предложил механизм спонтанного нарушения хирального равновесия при кристаллизации с интенсивным размешиванием. Данный процесс, называемый «созреванием Виедмы», основан на полном нарушении хирального равновесия благодаря сочетанию вторичной нуклеации, автокаталитического процесса Франка и созревания Оствальда. Кристаллы, синтезированные в условиях созревания Виедмы, проявляют хиральность на супрамолекулярном уровне, где элемент асимметрии имеет размер, значительно превышающий размер исходных молекул. Несмотря на наличие в литературе сведений о протекании созревания Виедмы для любых энантиоморфных кристаллов ахиральных веществ, способность поверхности таких кристаллов к хиральному распознаванию в процессах адсорбции остаётся неясной. Также остаётся неизученным вопрос о том, как строение, свойства (полярность и пористость) и условия получения хиральных кристаллов влияют на энантиоселективность. Установление этих закономерностей представляет научный интерес.

Научная новизна полученных результатов:

Впервые изучены физико-химические закономерности адсорбции энантиомеров лимонена, α -пинена и ментола на хиральных кристаллах из ахиральных веществ без асимметрического атома углерода: гиппуровой кислоты, флороглюцина, бромтрифенилметана, γ -глицина, CsCuCl_3 , а также металлоорганических структур $[\{\text{Cu}_{12}^{\text{I}}(\text{trz})_8\} 4\text{Cl} \cdot 8\text{H}_2\text{O}]_n$ и SU-MB. Установлено, что хиральное распознавание на поверхностях таких кристаллов не является универсальным. Для непористых кристаллов энантиоселективность проявляется только в области нелинейной изотермы адсорбции. Экспериментально подтверждено, что поверхность с супрамолекулярной хиральностью распознаёт не отдельные молекулы адсорбата, а их группы, стабилизированные латеральными взаимодействиями. Наличие спиралевидных пор у кристаллов не усиливает

энантиоселективность, но расширяет диапазон парциальных давлений и температур, где она наблюдается. Выявлена взаимосвязь между сигналом кругового дихроизма и предпочтительной адсорбцией: на кристаллах гиппуровой кислоты с отрицательным сигналом [CD(-)] преимущественно адсорбируется S-(-)-лимонен, а на кристаллах с положительным сигналом [CD(+)] – R-(+)-лимонен. На кристаллах с нулевым сигналом кругового дихроизма, полученных вне условий созревания Виедмы, энантиоселективность отсутствовала. Определены критерии высокой энантиоселективности по изостерическим теплотам адсорбции (Q_{st} , кДж/моль) энантиомеров лимонена на изученных кристаллах: минимальное различие Q_{st} энантиомеров $\geq 1,5$ кДж/моль; с ростом покрытия Q_{st} приближается к теплоте конденсации L ; степень заполнения поверхности должна быть достаточно высока, чтобы соответствовать области, в которой реализуются латеральные взаимодействия.

Теоретическая и практическая значимость результатов. Впервые установлена взаимосвязь между энантиоселективностью кристаллов с супрамолекулярной хиральностью при адсорбции и закономерностями изменения изостерических теплот адсорбции энантиомеров. Показано, что высокая энантиоселективность требует не только различий в теплотах адсорбции, но и приближения Q_{st} к теплоте конденсации при достаточной степени заполнения поверхности для латеральных взаимодействий. Полученные результаты развивают представления о хиральных кристаллах как перспективных энантиоселективных адсорбентах. Предложенные новые хиральные неподвижные фазы и адсорбенты применимы в хиральной хроматографии для выделения оптически чистых веществ и контроля энантиомерной чистоты.

Ценность научных работ подтверждается опубликованием результатов в международных журналах, индексируемых в Scopus и Web of Science: «New Journal of Chemistry», «Physical Chemistry Chemical Physics», «Symmetry», «Adsorption»

Наиболее существенные научные результаты, полученные лично соискателем. Автором были получены следующие существенные научные результаты, которые можно квалифицировать как научное достижение. Было установлено, что энантиоселективность хиральных кристаллов не универсальна. Была обнаружена взаимосвязь между сигналом кругового дихроизма и преимущественной адсорбцией энантиомеров лимонена. Установлено, что наличие спиралевидных пор расширяет температурный диапазон проявления энантиоселективности. На пористых кристаллах хиральное распознавание наблюдается не только в области высоких парциальных давлений, но и в области Генри. Величина энантиоселективности определяется изменением изостерических теплот адсорбции. Выявлено, что высокая энантиоселективность достигается только при одновременном соблюдении трёх условий: различие изостерических теплот адсорбции (Q_{st}) энантиомеров должно составлять не менее 1.5 кДж/моль; по мере роста величины адсорбции Q_{st} должна приближаться к теплоте конденсации (L); а степень заполнения поверхности должна соответствовать нелинейному участку изотермы адсорбции.

Достоверность полученных результатов подтверждается имеющимися в литературе данными о надмолекулярном строении изучаемых кристаллов. Хиральность кристаллов подтверждена спектрами кругового дихроизма. Проведена широкая апробация результатов диссертационной работы на международных и всероссийских научных конференциях.

Личный вклад автора. Личное участие автора в получении научных результатов состоит в систематическом изучении литературных источников, постановке целей и задач научного исследования, непосредственном участии в выполнении экспериментальных исследований, обработке экспериментальных данных, проведении расчётов физико-химических и хроматографических характеристик, систематизации полученных результатов и формулировке выводов, написании научных статей.

По теме диссертации опубликованы 5 статей в журналах,

рекомендованных ВАК и индексируются системами Web of Science / Scopus, 8 тезисов в сборниках конференций:

1. Gus'kov V. Yu., Shayakhmetova R. Kh., Allayarova D. A., **Sharafutdinova Yu. F.**, Gilfanova E. L., Pavlova I. N., Garipova G. Z. Mechanism of chiral recognition by enantiomorphous cytosine crystals during enantiomer adsorption // *Phys. Chem. Chem. Phys.* — 2021. — Vol. 23. — P. 11968–11979.

2. Gus'kov V. Yu., Gallyamova G. A., Sairanova N. I., **Sharafutdinova Yu. F.**, Khalilov L. M., Mukhametzyanov T. A., Zinoviev I. M., Gainullina Yu. Yu. Possibility of chiral recognition by adsorption on enantiomorphous crystals: the impact of crystal surface polarity // *Phys. Chem. Chem. Phys.* — 2022. — Vol. 24. — P. 26785–26794.

3. Zinovyev I. M., Ermolaeva E. K., **Sharafutdinova Yu. F.**, Gilfanova E. L., Khalilov L. M., Pavlova I. N., Guskov V. Yu. Manifestation of Supramolecular Chirality during Adsorption on CsCuCl₃ and γ -Glycine Crystals // *Symmetry.* — 2023. — Vol. 15. — Art. 498.

4. **Sharafutdinova Yu. F.**, Balandina K. S., Pavlova I. N., Agliullin M. R., Guskov V. Yu. Chiral recognition during adsorption on MOF [$\text{Cu}_{12}(\text{trz})_8 \cdot 4\text{Cl} \cdot 8\text{H}_2\text{O}$]_n, obtained from achiral building blocks without an external source of chirality // *New J. Chem.* — 2023. — Vol. 47. — P. 11086–11094.

5. **Sharafutdinova Yu. F.**, Sufiyarova K. M., Samarina A. S., Bagdanova D. O., Agliullin M. R., Mukhametzyanov T. A., Guskov V. Yu. Enantioselective adsorption of limonenes and α -pinenes on germanium oxide metal-organic framework // *Adsorption.* — 2026. — Vol. 32. — Art. 11.

6. Гуськов В. Ю., Аллаярова Д. А., Шаяхметова Р. Х., **Шарафутдинова Ю. Ф.** Адсорбенты с супрамолекулярной хиральностью: механизм разделения энантиомеров и применение в аналитической химии // VI Всероссийский симпозиум «Разделение и концентрирование в аналитической

химии и радиохимии» с международным участием : тез. докл. – Краснодар, 2021. – С. 180.

7. Гуськов В. Ю., Аллаярова Д. А., Шаяхметова Р. Х., **Шарафутдинова Ю. Ф.** Механизм хирального распознавания адсорбентов с супрамолекулярной хиральностью // Физико-химические методы в междисциплинарных экологических исследованиях : Всерос. симп. и shk.-конф. мол. Ученых : сб. тр. – Севастополь, 2021. – С. 71-72.

8. Ермолаева Е. К., **Шарафутдинова Ю. Ф.** Разделение рацемата ментола на неподвижной фазе на основе γ -глицина // Материалы Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2023»: тез. докл. – Москва, 2023.– С. 22.

9. **Шарафутдинова Ю. Ф.**, Баландина К. С., Суфиярова К. М., Акушев А. Г., Гуськов В. Ю. Изучение возможности хирального распознавания на микропористом MOF на основе меди и гидрата 3-амино-1H-1,2,4-триазол-5-карбоновой кислоты // Физико-химические методы в междисциплинарных экологических исследованиях : Всерос. конф. и shk.-конф. мол. ученых. – Севастополь, 2023.– С. 62-63.

10. **Шарафутдинова Ю. Ф.**, Ахатова Г. И., Гуськов В. Ю. Адсорбция энантиомеров на кристаллах гипсуровой кислоты, полученных в условиях созревания Виедмы с использованием температурного градиента // Поверхностные явления в дисперсных системах : Всерос. конф.: тез. докл. – Москва, 2023. – С. 47.

11. Баландина К. С., **Шарафутдинова Ю. Ф.**, Гуськов В. Ю. Изучение возможности хирального распознавания на микропористом MOF $[\{Cu_{12}^I(trz)_8\} \cdot 4Cl \cdot 8H_2O]_n$ // X Международный симпозиум «Дизайн и синтез супрамолекулярных архитектур» : тез. докл. – Казань, 2024. – С. 101.

12. **Шарафутдинова Ю. Ф.** Изучение способности MOF-а на основе оксида германия к хиральному распознаванию в процессах адсорбции // XXI Российская ежегодная конференция молодых научных сотрудников и

аспирантов «Физико-химия и технология неорганических материалов» : сб. тр. – Москва, 2024 – С. 211-212.

13. **Шарафутдинова Ю. Ф.**, Гуськов В. Ю. Закономерности изменения изостерических теплот при адсорбции энантиомеров лимонена на энантиоморфных кристаллах // III Всероссийская конференция с международным участием и школа молодых ученых «Физико-химические методы в междисциплинарных экологических исследованиях» : сб. тез. докл. – Севастополь, 2025. – С. 87–89.

Соответствие содержания диссертации паспорту специальности. Диссертационная тема Шарафутдиновой Ю.Ф. соответствуют пункту 3 «Определение термодинамических характеристик процессов на поверхности, установление закономерностей адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях» паспорта специальности 1.4.4. Физическая химия

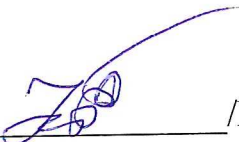
Диссертационная работа Шарафутдиновой Ю.Ф. «Энантиоселективность хиральных кристаллов по отношению к ряду монотерпенов в процессах адсорбции» является цельной, самостоятельной и законченной научно-исследовательской работой.

Работа выполнена на высоком профессиональном уровне, и отвечает критериям п.п. 9-14 Постановления Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения ученых степеней», предъявляемым к кандидатским диссертациям. В диссертации отсутствуют заимствованный материал без ссылок на автора и (или) источник заимствования.

Таким образом, диссертация «Энантиоселективность хиральных кристаллов по отношению к ряду монотерпенов в процессах адсорбции» Шарафутдиновой Ю.Ф. рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Заключение принято на расширенном заседании кафедры аналитической химии Института химии и защиты в чрезвычайных ситуациях Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий». Присутствовало на заседании 11 человек. Принимало участие в голосовании 11 человек. Результаты открытого голосования: «за» – 11 чел.; «против» – 0 чел., «воздержалось» – 0 чел. (протокол № 10 от 26 января 2026 г.).

Профессор кафедры физической химии и химической экологии
Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Уфимский университет науки и технологий»,
профессор, доктор химических наук


_____/Ю.С. Зимин

