

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА
Д 002.107.01, СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО
ЗНАМЕНИ ИНСТИТУТА ХИМИИ СИЛИКАТОВ ИМ. И.В. ГРЕБЕНЩИКОВА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА ХИМИЧЕСКИХ НАУК

аттестационное дело № _____
дата защиты 06.06.2018 протокол № 154

О присуждении **Кондратенко Юлии Андреевне**, гражданке Российской Федерации, ученой степени **кандидата химических наук**.

Диссертация «Синтез, строение и свойства новых внутрикомплексных соединений трис(2-гидроксиэтил)амин» в виде рукописи **по специальности 02.00.04 – физическая химия, химические науки, принята к защите «4»** апреля 2018 года, **протокол № 153**, диссертационным советом **Д 002.107.01**, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Ордена Трудового Красного Знамени Института химии силикатов им. И.В. Гребенщикова Российской академии наук (199034, г. Санкт-Петербург, наб. Адм. Макарова, д. 2, приказ о создании диссертационного совета от «19» июня 2014 года № 346/нк).

Соискатель Кондратенко Юлия Андреевна, 24 октября 1991 года рождения, в 2014 году окончила Федеральное государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный университет», Институт химии, кафедра химии высокомолекулярных соединений, с присуждением квалификации (степень) «Химик» по профилю «Химическое материаловедение».

Кондратенко Ю.А. является аспирантом очной формы обучения в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Ордена Трудового Красного Знамени Институте химии силикатов им. И.В. Гребенщикова Российской академии наук (приказ №99-к от 04.08.2014) с 04.08.2014 г. по настоящее время.

Работает в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Ордена Трудового Красного Знамени Институте химии силикатов им. И.В. Гребенщикова Российской академии наук, в лаборатории кремнийорганических соединений и материалов младшим научным сотрудником.

Диссертация выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Ордена Трудового Красного Знамени Институте химии силикатов им.

И.В. Гребенщикова Российской академии наук, в лаборатории кремнийорганических соединений и материалов.

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор Кочина Татьяна Александровна, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Трудового Красного Знамени Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова Российской академии наук, лаборатория кремнийорганических соединений и материалов, заведующая лабораторией.

Официальные оппоненты:

Малинина Елена Анатольевна, доктор химических наук, доцент, ведущий научный сотрудник лаборатории химии легких элементов и кластеров Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук;

Рамш Станислав Михайлович, доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой химической технологии органических красителей и фототропных соединений Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)»

дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена» **дала положительный отзыв** на диссертационную работу Кондратенко Ю.А., подготовленный и подписанный заведующей кафедрой неорганической химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена», доктором химических наук, профессором Бойцовой Татьяной Борисовной и утвержденный проректором по научной работе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена», доктором психологических наук, член-корреспондентом РАО Цветковой Ларисой Александровной. Отзыв ведущей организации обсужден на заседании кафедры неорганической химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена», протокол № 6 от 11 мая 2018 г. **В отзыве отмечается следующее.** Диссертационная работа Кондратенко Ю. А. является целостной и завершенной научной квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований

содержится решение актуальной научной задачи получения и исследования строения и свойств новых биологически активных соединений. Диссертация написана автором самостоятельно, содержит комплекс новых данных.

Автором проведена значительная экспериментальная и реферативная работа, требующая высокого уровня профессиональной подготовки в области синтеза представителей класса атранов, исследовании их структуры, реакционной способности и биологической активности. Научная новизна диссертационной работы не вызывает сомнений.

Достоверность и обоснованность полученных результатов обусловлены применением широкого арсенала экспериментальных методов исследования (элементный анализ, ИК-спектроскопия, ЯМР ^1H , $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$, масс-спектроскопия, рентгеноструктурный анализ, термический анализ и т.д.).

Автореферат полностью отражает основное содержание диссертации. Полученные результаты многократно докладывались и обсуждались на международных и всероссийских конференциях.

С результатами работы следует ознакомить ряд организаций, ведущих исследования в области органического синтеза и координационной химии: Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Санкт-Петербургский государственный университет, Новосибирский государственный университет, Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева (Москва), Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН (Москва), Институт высокомолекулярных соединений РАН Санкт-Петербург).

По объему, актуальности, новизне, научному уровню, теоретической и практической значимости полученных результатов диссертационная работа «Синтез, строение и свойства новых внутрикомплексных соединений трис(2-гидроксиэтил)амин» полностью соответствует требованиям п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор, **Кондратенко Юлия Андреевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.**

Вопросы и замечания. 1) В диссертации и автореферате для записи одних и тех же соединений широко используются как буквенные обозначения лигандов, так и рациональные формульные, что часто затрудняет чтение. Например, $[\text{Co}_2(\text{TEA})_2\text{Cl}_2]\text{Cl}_2$ и $[\text{Co}_2(\text{N}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH})_3)_2\text{Cl}_2]^{2+}$ (стр. 93). 2) В Главе 3 указано, что комплексный

термический анализ комплексов ТЕА и тетраakis(2-гидроксиэтил)аммониевых солей осуществлялся в атмосфере воздуха, тогда как анализ трис(2-гидроксиэтил)аммониевых солей – в атмосфере азота и аргона. Требуется пояснения критерий, на основании которого задавалась газовая атмосфера. **3)** В диссертации представлены результаты синтеза галогенидов тетраakis(2-гидроксиэтил)аммония. При этом из текста не ясны причины выбора в качестве анионов только фторид- и хлорид-ионов. Проблемы и перспективы синтеза бромидов и иодидов в диссертационной работе не освещены. **4)** Не до конца понятно влияние комплексообразователей – меди(II), кобальта(II) и цинка(II) – на структуру синтезированных комплексов, в частности, схожесть строения моноядерных катионных комплексов меди и кобальта ($[\text{Cu}(\text{TEA})_2]^{2+}$ и $[\text{Co}(\text{TEA})_2]^{2+}$) и отсутствие подобных катионов цинка.

Кондратенко Юлия Андреевна имеет 29 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 23 работы, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 8 работ. Опубликованные работы, в которые диссертант внес основной вклад, полностью отражают содержание диссертационной работы.

Основные работы:

1. **Кондратенко, Ю. А.** Триэтаноламмониевые соли биологически активных карбоновых кислот / Ю. А. Кондратенко, Т. А. Кочина, В. С. Фундаменский, Ю. Г. Власов // ЖОХ. – 2015. – Т. 85. – №12. – С. 1978-1983.

2. **Kondratenko, Y.** Triethanolammonium salicylate – protic alkanolammonium ionic liquid / Y. Kondratenko, T. Kochina, V. Fundamensky, I. Ignatyev, T. Panikorovskii, G. Nyanikova // J. Mol. Liq. – 2016. – Vol. 221. – P. 1218-1224.

3. **Кондратенко, Ю. А.** Протонные алканоламмониевые ионные жидкости на основе триэтаноламмониевых солей карбоновых кислот / Ю. А. Кондратенко, Т. А. Кочина, В. С. Фундаменский // ФХС. – 2016. – Т. 42. – №6. – С. 807-814.

4. Fundamensky, V. S. Ionic liquids based on triethanolammonium salts of dicarboxylic acids (oxalic, malonic, succinic). Crystal structure and cation-anion interaction / V. S. Fundamensky, T. A. Kochina, **Y. A. Kondratenko**, A. A. Zolotarev, Yu. G. Vlasov, I. S. Ignatyev // J. Mol. Liq. – 2017. – Vol. 230. – P. 113–120.

5. **Кондратенко, Ю. А.** Синтез, строение и термическое поведение комплекса $\{\text{Co}_2[\text{N}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH})_3]_2\text{Cl}_2\}\text{Cl}_2$ / Ю. А. Кондратенко // ЖОХ. – 2017. – Т. 87. – №4. – С. 698-700.

6. **Kondratenko, Y.** Synthesis and crystal structure of two zinc-containing complexes of triethanolamine / Y. Kondratenko, V. Fundamensky, I. Ignatyev, A. Zolotarev, T. Kochina, V. Ugolkov // Polyhedron. – 2017. – Vol. 130. – P. 176–183.

7. **Кондратенко, Ю. А.** Характеристика протонных ионных жидкостей на основе триэтаноламмониевых солей биологически активных карбоновых кислот и их влияние на ростовые свойства гриба *Rhizopus oryzae* / Ю. А. Кондратенко, Г. Г. Няникова, К. В. Молчанова, Т. А. Кочина // ФХС. – 2017. – Т. 43. – №5. – С. 496-503.

8. Ignatyev, I. Synthesis and characterization of cobalt(II) complexes with triethanolamine and succinate and/or nitrate anions / I. Ignatyev, **Y. Kondratenko**, V. Fundamensky, T. Kochina // Transition Metal Chemistry. – 2018. – Vol. 43. – No. 2. – P. 127-136.

На автореферат диссертации Ю.А. Кондратенко поступило 12 отзывов, **все положительные**. В отзывах указывается, что представляемая диссертационная работа является научной квалификационной работой, которая отвечает всем требованиям пп. 9-14 (раздел II) «Положения о присуждении ученых степеней» (утверждено постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г.), предъявляемым ВАК к диссертациям на соискание ученой кандидата наук, а ее автор, Кондратенко Юлия Андреевна, заслуживает присуждения искомой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

1. Кукушкин Вадим Юрьевич, член-корреспондент РАН, профессор, доктор химических наук, заведующий кафедрой физической органической химии Института химии ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет». Отзыв без замечаний.

2. Негребецкий Вадим Витальевич, профессор РАН, доктор химических наук, заведующий кафедрой химии, заведующий отделом медицинской химии и токсикологии ФГБОУ ВО «Российский национальный исследовательский медицинский университет имени Н.И. Пирогова» *Замечания:* К сожалению, представленное в автореферате описание раздела 2.4 представляется чрезмерно лаконичным. Действительно, утверждение автора о том, что «практически все исследованные соединения проявили заметную активность по отношению к бактерии *Staphylococcus aureus* (золотистый стафилококк)...», с указанием достаточно низких доз, необходимо подкрепить данными для соответствующего препарата сравнения.

3. Груздев Матвей Сергеевич, кандидат химических наук, старший научный сотрудник лаборатории структуры и динамики молекулярных и ион-молекулярных растворов ФГБУН Института химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук. *Вопросы и замечания:* **1).** Из автореферата не совсем понятно, какие кислоты и в каком синтезе использовал соискатель (автореферат, стр. 9). Автор дал просто брутто-формулы и номера исследуемых солей. Понять какая использована кислота и какая получена соль достаточно проблематично. Нет упоминаний как проводилось выделение веществ **1-14** из реакционной массы. Дается лишь упоминание о двух триплетах в области 2.64-3.28 м.д. и 3.46-3.77 м.д. у

синтезированных солей. Но ведь и у исходного соединения в ^1H ЯМР спектре будет два триплета 2.57 и 3.46, соответственно. Из текста автореферата не понятно, что происходит с протонами НО-групп, которые вступают в реакцию образования протатрана. Как смещается сигнал протона вступившей в реакцию кислоты? Ничего не говорится о доказательстве строения и чистоты полученных соединений другими методами (^{13}C ЯМР, ИК, ЕА, хроматография). 2). На странице 10 автореферата автор пишет, что ИК спектры протатранов 1-14 характеризуются наличием широких полос с максимумами в области $3360\text{-}3190\text{ см}^{-1}$ валентных колебаний $\nu(\text{OH})$ групп катионов. Соискатель приводит соотнесение сигналов только к катиону ($-\text{CH}_2-$ алифатические фрагменты). Встает вопрос, где колебания ароматических протонов кислот с бензойным кольцом (коричная, бензойная, салициловая). Изменения ИК-спектров соединений должны показать наличие данных анионов в составе солей. 3). Автор делает вывод, что в ик-спектрах солей отдельные пики при 3150 см^{-1} и в области $3100\text{-}2800\text{ см}^{-1}$, относятся к валентным колебаниям $\nu(\text{NH}^+)$ и $\nu(\text{CH}_2)$ групп (автореферат, стр. 10). Стоит не согласиться и отметить, что протонированный третичный амин (соль) дает ряд полос низкой и средней интенсивности в области $2800\text{-}2500\text{ см}^{-1}$. А интенсивная полоса 3150 см^{-1} характеризует внутримолекулярную водородную связь образования прототрановой структуры.

4. Лазарева Наталья Федоровна, доктор химических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории элементарноорганических соединений ФГБУН Иркутского института химии им. А. Е. Фаворского Сибирского отделения Российской академии наук. *Замечания:* на стр. 9 автор пишет: «... синтезированы ... соли, $[\text{NH}(\text{C}_2\text{H}_4\text{OH})_3]_n\text{X}$, 1-14 ... $\text{X} = \text{C}_9\text{H}_7\text{O}_2$ (1), $\text{C}_7\text{H}_5\text{O}_2$ (2); $\text{C}_7\text{H}_5\text{O}_3$ (3); C_2O_4 (4); C_2HO_4 (5); $\text{C}_3\text{H}_2\text{O}_4$ (6); $\text{C}_3\text{H}_3\text{O}_4$ (7); $\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_4$ (8); $\text{C}_4\text{H}_5\text{O}_4$ (9); $\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_5$ (10); $\text{C}_4\text{H}_5\text{O}_5$ (11); $\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7$ (12); $\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_7$ (13) и $\text{C}_6\text{H}_7\text{O}_7$ (14); $n = \dots$ ». Представление кислотных остатков в виде структурных формул привело бы к более быстрому и легкому пониманию дальнейшего текста читателям.

5. Иванов Иван Александрович, кандидат технических наук, директор ФГАОУ ВО «Озёрский технологический институт – филиал НИЯУ МИФИ». Отзыв без замечаний.

6. Биляченко Алексей Николаевич, кандидат химических наук, старший научный сотрудник лаборатории гидридов металлов ФГБУН Института элементарноорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук. *Замечания:* Следует отметить, что в тексте автореферата встречается несколько неудачных выражений и опечаток. Кроме того, по автореферату диссертации Ю. А. Кондратенко можно сделать несколько замечаний: - п. 2 «Основных результатов» указывает, что «показана возможность реализации *эндо-* и *эндо-экзо-*конформации трис(2-гидроксиэтил)аммониевого катиона в зависимости от характера внутри- и межмолекулярных взаимодействий». Текст автореферата не позволяет однозначно

понять, какие факторы управляют формированием более редкой *эндо-экзо*-конформацией. - результаты термогравиметрического исследования продуктов 17-29 (рис. 10, слева) демонстрируют резкую (ступенчатую) потерю массу соединением 23, нехарактерную для остальных изученных объектов. В тексте автореферата не приводится обсуждение этого факта и возможных причин такого поведения.

7. Голикова Евгения Викторовна, профессор, доктор химических наук, старший научный сотрудник кафедры коллоидной химии Института химии ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет». *Замечания:* В качестве основного замечания по автореферату, связанного с оформлением, можно отметить, что на стр. 9 перечислены синтезированные трис(2-гидроксиэтил)аммониевые соли и указаны их численные обозначения (1-14). При этом анионы используемых карбоновых кислот обозначены только брутто-формулами, что затрудняет восприятие информации и понимание того, какая именно кислота использовалась в конкретном синтезе.

8. Егорочкин Алексей Николаевич, профессор, доктор химических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории физико-химических методов исследования ФГБУН Института металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева Российской академии наук и **Кузнецова Ольга Владимировна**, кандидат химических наук, старший научный сотрудник лаборатории физико-химических методов исследования ФГБУН Института металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева Российской академии наук. *Замечания:* по мнению диссертантки (стр. 5), благодаря этой активности «... полученные соединения могут найти широкое применение...». В связи с этим раздел, посвященный биологической активности, следовало бы изложить подробнее.

9. Верещагина Яна Александровна, профессор, доктор химических наук, профессор кафедры физической химии Химического института им. А.М. Бутлерова ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет». Вопросы и замечания: 1) На странице 10 автор описывает *эндо*- и *эндо-экзо*-конформации протатранов 3, 5, 7, 9 и 8, возникающие в результате вращения гидроксиэтильных фрагментов. Вероятно, в случае соединения 8 правильнее было бы говорить об *эндо,эндо,экзо*-ориентации трех гидроксиэтильных заместителей у атома азота. На странице 12 читаем: «...конформация трех гидроксиэтильных ветвей близка к *гош*-конформации и одной ветви - к *транс*-конформации», тогда как приведенные здесь же величины торсионных углов свидетельствуют именно о *гош*- или *транс*-конформации - без какого-либо «приближения». 2) Непонятно подробное приведение известных литературных ссылок на методы квантово-химических расчетов в тексте автореферата. 3) Выводы (Основные результаты) 6 и 8 можно было бы объединить.

10. Химич Николай Николаевич, доктор химических наук, заведующий кафедрой химии ФГБВОУ ВПО «Военно-медицинская академия им. С.М. Кирова». *Вопросы и замечания:*

1) Зачем излишне усложнять название исходного соединения трис(2- гидроксипропил)амин (ТГА)? Триэтаноламин - проще и понятней. 2) Цинк не рассматривается как переходный металл. 3) Не совсем понятны данные табл. 3. Получается, что, например, для протатранов 1, 3, 7 ростостимулирующее действие увеличивается при уменьшении их концентрации? 4) В разделе практическая значимость написано: «Благодаря уникальной циклической структуре соединений, а также содержанию биологически активных компонентов, атраны обладают широким спектром полезного действия». Эта фраза не совсем корректна. Биологическая активность определяется для всего соединения в целом, а не является суммой активностей каких-то отдельных компонентов.

11. Корлюков Александр Александрович, профессор РАН, доктор химических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории рентгеноструктурных исследований ФГБУН Института элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук. *Замечания:* **1.** В работе широко используются данные рентгеновской дифракции и квантовохимические расчеты. Определенное удивление вызывает тот факт, что для расчета комплексов переходных металлов использованы различные базисные наборы (сс-pVDZ и 6-31 G(d), тогда как можно было бы использовать один (что облегчило бы объективное сравнение расчетных данных как между собой, так и с экспериментом). **2.** Согласие между расчетом и экспериментом в случае структурных данных для комплексов переходных металлов можно считать удовлетворительным. Однако, некоторые межатомные расстояния M-N и M-O достаточно сильно расходятся с экспериментом. Эта проблема ранее отмечалась для атранов. Достаточно хорошо работающим решением этой проблемы является использование метода РСМ. В данной работе его следовало бы использовать, чтобы улучшить согласие между экспериментом и расчетом. **3.** На рис. 1 (б) нарисованы две половинки сукцинат-аниона. Специалисту в области структурного анализа понятно, что в структуре оба аниона лежат на элементе симметрии. Тем не менее, неспециалистов будет смущать наличие в кристалле частицы H_2CCOO . При рисовании данного рисунка в программе OLEX2 следовало бы используя режим View →Symmetry generation→Packing дорисовать недостающие части анионов. **4.** В табл. 1 приведены значения с разным количеством знаков после запятой и ничего не сказано про стандартные отклонения. Это мешает провести корректное сравнение длин связей и межатомных расстояний.

12. Скворцов Николай Константинович, профессор, доктор химических наук, профессор кафедры химической технологии полимеров ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)». *Замечания:* **1)** В

разделе 2.2.3. рассмотрено взаимодействие солей 15 и 16 с этоксисиланами $\text{RSi}(\text{OEt})_3$ с образованием малорастворимых солей. Из автореферата не ясно с какой целью проводились эти исследования, тем более что полученные соединения недостаточно охарактеризованы. 2) При рассмотрении биологической активности полученных соединений хотелось бы видеть сравнение их характеристик с известными препаратами. 3) Не понятно откуда автор взял термин переходные биометаллы.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается профилем их специализации, близкой к теме диссертации, наличием публикаций в рецензируемых научных изданиях по теме диссертации, а также возможностью дать объективную оценку диссертационной работе.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработаны новые подходы к синтезу внутрикомплексных соединений трис(2-гидроксиэтил)амин – трис(2-гидроксиэтил)аммониевых солей биологически активных карбоновых кислот (протатранов) и комплексов трис(2-гидроксиэтил)амин с солями переходных биометаллов (Co(II), Cu(II) и Zn(II));

установлена *эндо*-конформация трис(2-гидроксиэтил)аммониевого катиона в солях: салицилата, гидрооксалата, гидромалоната и гидросукцината трис(2-гидроксиэтил)аммония и редкая *эндо-экзо*-конформация катиона в соли сукцината трис(2-гидроксиэтил)аммония;

разработан одностадийный метод синтеза галогенидов (F, Cl) *тетракис*(2-гидроксиэтил)аммония;

установлена кристаллическая структура галогенидов (F, Cl) *тетракис*(2-гидроксиэтил)аммония ($[\text{N}(\text{C}_2\text{H}_4\text{OH})_4]\text{Cl}$ и $[\text{N}(\text{C}_2\text{H}_4\text{OH})_4]\text{F}$), моно- и биядерных Zn(II), Cu(II) и Co(II) комплексов трис(2-гидроксиэтил)амин;

показано, что деструкция большинства исследуемых комплексов трис(2-гидроксиэтил)амин начинается в интервале температур 150-190 °С.

доказано, что экспериментально обнаруженная геометрия октаэдра CoN_2O_4 в комплексе $[\text{Co}(\text{TEA})_2](\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_4)$ наиболее близка к таковой, полученной теоретическими расчетами для квартетного состояния.

обнаружено, что большинство синтезированных протатранов и комплексов трис(2-гидроксиэтил)амин обладают заметной активностью по отношению к бактерии *Staphylococcus aureus*.

показано, что исследуемые трис(2-гидроксиэтил)аммониевые соли коричной, бензойной и малоновой кислот оказывают положительное влияние на прорастание семян и ростовые характеристики проростков кресс-салата сорта Ажур.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

разработаны способы и синтезирован с их использованием ряд ранее неизвестных соединений трис(2-гидроксиэтил)аммина – трис(2-гидроксиэтил)аммониевых солей биологически активных карбоновых кислот, галогенидов *тетраakis*(2-гидроксиэтил)аммония и комплексов трис(2-гидроксиэтил)аммина с солями переходных биометаллов (Co(II), Cu(II) и Zn(II));

показана возможность реализации *эндо*- и *эндо-экзо*-конформации трис(2-гидроксиэтил)аммониевого катиона в зависимости от характера внутри- и межмолекулярных взаимодействий;

обнаружено, что внутрикомплексные соединения трис(2-гидроксиэтил)аммина обладают высокой противомикробной активностью по отношению к бактерии *Staphylococcus aureus* и оказывают положительное влияние на ростовые характеристики семян кресс-салата сорта Ажур.

Полученные результаты расширяют представления о координационной химии N,O-донорных лигандов и химии атранов, вносят вклад в бионеорганическую, координационную и физическую химию.

Применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов) использован комплекс современных физико-химических методов исследования: ЯМР (^1H , $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$) ИК спектроскопия, рентгеноструктурный анализ, масс-спектрометрия, элементный анализ, расчетные методы (B3LYP), комплексный термический анализ, который позволил провести идентификацию, а также получить информацию о структурных особенностях и свойствах синтезированных соединений трис(2-гидроксиэтил)аммина.

исследовано взаимодействие трис(2-гидроксиэтил)аммина с биологически активными карбоновыми кислотами, 2-галогенэтанолами и солями переходных металлов (Co(II), Cu(II) и Zn(II));

идентифицирован ряд новых внутрикомплексных соединений трис(2-гидроксиэтил)аммина: трис(2-гидроксиэтил)аммониевые соли, галогениды *тетраakis*(2-гидроксиэтил)аммония и комплексы трис(2-гидроксиэтил)аммина с солями переходных биометаллов (Co(II), Cu(II) и Zn(II)) комплексом физико-химических методов;

исследовано взаимодействие галогенидов *тетраakis*(2-гидроксиэтил)аммония с этоксисиланами $\text{RSi}(\text{OEt})_3$ ($\text{R}=\text{CH}_3, \text{OEt}$) и солями переходных металлов MX_2 ($\text{Cu}(\text{II}), \text{Co}(\text{II}), \text{Zn}(\text{II})$);

исследована термическая устойчивость синтезированных трис(2-гидроксиэтил)аммониевых солей биологически активных карбоновых кислот, галогенидов *тетраakis*(2-гидроксиэтил)аммония и комплексов трис(2-гидроксиэтил)аммина с солями переходных биометаллов ($\text{Co}(\text{II}), \text{Cu}(\text{II})$ и $\text{Zn}(\text{II})$).

изучена биологическая активность (влияние на рост и развитие грибов и бактерий; ростовые характеристики растений) новых соединений на основе трис(2-гидроксиэтил)аммониевых солей и $\text{Zn}(\text{II}), \text{Cu}(\text{II}), \text{Co}(\text{II})$ комплексов трис(2-гидроксиэтил)аммина.

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

Предложены удобные подходы к синтезу новых соединений трис(2-гидроксиэтил)аммина, представляющих интерес для координационной, бионеорганической и физической химии.

Представлены результаты исследования биологической активности целевых соединений трис(2-гидроксиэтил)аммина, которые отражают перспективность применения синтезированных соединений в медицине, фармацевтике, сельском хозяйстве, микробиологии и других областях.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

результаты получены на сертифицированном оборудовании в ФГБУН Ордена Трудового Красного Знамени Институте химии силикатов им. И.В. Гребенщикова Российской академии наук (ИХС РАН, г. Санкт-Петербург) и в ресурсных центрах ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет» («Оптические и лазерные методы исследования вещества», «Рентгенодифракционные методы исследования», «Методы анализа состава вещества», «Термогравиметрические и калориметрические методы исследования», «Магнитно-резонансные методы исследования»);

показана воспроизводимость результатов исследования;

достоверность полученных результатов основана на применении известных современных взаимодополняющих физико-химических методов исследования;

выводы обоснованы и экспериментально подтверждены в диссертационной работе; они согласуются с современными принципами и представлениями координационной и физической химии.

Личный вклад автора заключается в работе с литературными источниками; постановке эксперимента; разработке методов синтеза, получении и характеристике большинства внутрикомплексных соединений трис(2-гидроксиэтил)амин, выращивании кристаллов. Автор принимал непосредственное участие в анализе данных рентгеноструктурного анализа, и структур из CCDC, интерпретации экспериментальных данных (ИК, ЯМР спектроскопия, ТГ, ДСК и др.) и подготовке всех публикаций.

Работа поддержана грантом программы «У.М.Н.И.К.» Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере (автор – руководитель проекта).

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается ее последовательностью и комплексным характером, включающим 1) изучение структурных особенностей и свойств ранее неизвестных трис(2-гидроксиэтил)аммониевых солей биологически активных карбоновых кислот; 2) разработку одностадийного способа получения галогенидов (F, Cl) *тетракис*(2-гидроксиэтил)аммония без образования побочных продуктов с целью исследования их строения, свойств и реакционной способности в образовании новых внутрикомплексных соединений; 3) разработку новых подходов к синтезу моно- и биядерных Cu(II), Co(II), Zn(II) комплексов трис(2-гидроксиэтил)амин и исследование их строения и термической устойчивости; 4) изучение биологической активности (влияние на рост и развитие грибов и бактерий; ростовые характеристики растений) трис(2-гидроксиэтил)аммониевых солей и Zn(II), Cu(II), Co(II) комплексов трис(2-гидроксиэтил)амин.

Содержание и название диссертации соответствует паспорту специальности 02.00.04 – физическая химия в п. 1 (экспериментальное определение и расчет параметров строения молекул и пространственной структуры веществ) и п. 10 (связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями осуществления химической реакции).

Диссертация Кондратенко Юлии Андреевны на тему: «Синтез, строение и свойства новых внутрикомплексных соединений трис(2-гидроксиэтил)амин» является научно-квалификационной работой в области физической химии, в которой решена фундаментальная задача исследования структурных особенностей и свойств трис(2-гидроксиэтил)аммониевых солей биологически активных карбоновых кислот, галогенидов *тетракис*(2-гидроксиэтил)аммония и комплексов трис(2-гидроксиэтил)амин с солями переходных биометаллов (Co(II), Cu(II) и Zn(II)), представляющих практический интерес для медицины, фармацевтики и сельского хозяйства. Полученные результаты вносят вклад в развитие координационной, бионеорганической и физической химии.

Диссертационным советом сделан вывод о том, что по актуальности, новизне, практической значимости диссертация соответствует критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней (п. 9-14), утвержденных постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (ред. от 28.08.2017 г.).

На заседании 06 июня 2018 года диссертационный совет принял решение присудить Кондратенко Юлии Андреевне ученую степень кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, химические науки.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них 14 докторов наук (отдельно по каждой специальности рассматриваемой диссертации), участвовавших в заседании, из 21 человека, входящих в состав совета (из них 0 человек дополнительно введены на разовую защиту), проголосовали: за - 15, против - нет, недействительных бюллетеней - нет.

Зам. председателя
диссертационного совета, д.х.н.



Ефименко Людмила Павловна

Ученый секретарь
диссертационного совета, к.х.н.

Масленникова Татьяна Петровна

06.06.2018 г.