

ЗАКЛЮЧЕНИЕ диссертационного совета **24.1.225.01**,
созданного на базе Федерального государственного бюджетного учреждения
науки «Федеральный исследовательский центр
«Казанский научный центр Российской академии наук»
Министерства науки и высшего образования Российской Федерации
по диссертации на соискание ученой степени **кандидата наук**

Аттестационное дело № _____

Решение диссертационного совета от 14 декабря 2022 г., протокол № 30

о присуждении **Осельской Виктории Юрьевне**, гражданке Российской Федерации, учёной степени кандидата химических наук.

Диссертация **«Соотношения «структура-свойство» для активизирующей и конкурирующей роли воды в клатратообразовании нативных циклодекстринов»** по специальности 1.4.4. Физическая химия принята к защите 05 октября 2022 г., протокол № 18, диссертационным советом 24.1.225.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук» (ФИЦ КазНЦ РАН) Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 420111, Республика Татарстан, г. Казань, ул. Лобачевского, д. 2/31, приказ Минобрнауки РФ № 553/нк от 23.05.2018.

Соискатель **Осельская Виктория Юрьевна**, 30.01.1995 года рождения, в 2018 г. окончила Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет» (ФГАОУ ВО КФУ) по специальности «Химия». В 2018-2022 гг. обучалась в очной аспирантуре ФГАОУ ВО КФУ по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки.

Диссертация **выполнена** на кафедре физической химии Химического института им. А.М. Бутлерова ФГАОУ ВО КФУ.

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор **Горбачук Валерий Виленович**, профессор кафедры физической химии Химического института им. А.М. Бутлерова ФГАОУ ВО КФУ.

Официальные оппоненты:

Гуськов Владимир Юрьевич, доктор химических наук, профессор кафедры аналитической химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» (организация была образована путем слияния ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет» (в котором работал Гуськов В.Ю.), и ФГБОУ ВО «Уфимский государственный авиационный технический университет» (организация поставлена на учет в налоговом органе по месту ее нахождения 1 ноября 2022 года));

Добрынин Алексей Борисович, кандидат химических наук, научный сотрудник 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», дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «**Казанский национальный исследовательский технологический университет**» – в своём положительном заключении, составленном и подписанном профессором кафедры физической и коллоидной химии, доктором химических наук Селивановой Натальей Михайловной, указала, что диссертационная работа «обладает актуальностью, научной новизной, практической значимостью, обоснованностью выводов и достоверностью полученных результатов, соответствует требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013 года (в ред. от

11.09.2021), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, и является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи установления роли гидратации в структурном состоянии твердых циклодекстринов в процессах образования комплексов включения с органическими соединениями, что имеет существенное значение для развития физико-химии природных макроциклических олигосахаридов. Ее автор - Осельская Виктория Юрьевна – заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия».

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается общностью тематики и областью научных интересов ведущей организации и официальных оппонентов, а именно: исследованиями в области физической химии твердофазных процессов.

На автореферат диссертации поступило 5 отзывов, все положительные. Отзывы получены от:

- д.х.н. Грачева М.К. (Московский педагогический государственный университет, г. Москва), *в отзыве имеются вопросы по термину «высокоэнергетическая вода»;*
- д.х.н. Делягиной Е.С. (Ивановский государственный университет, г. Иваново), *в отзыве имеются вопросы по доказательству полноты связывания индометацина, а также по названию диссертации;*
- к.ф.-м.н. Глуховского Е.Г. (Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, г. Саратов), *без замечаний;*
- д.х.н. Манаков А.Ю. (Институт неорганической химии имени А.В. Николаева СО РАН, г. Новосибирск), *в отзыве имеются замечания к формулировке выводов, а также оформлению автореферата;*
- к.х.н. Сафонова Е.А. (Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург), *в отзыве имеются вопросы по влиянию размера полости циклодекстрина на эффект исключения*

«гостя» по объему, по параметрам изотерм сорбции и соотношению полиморфов несвязанного индометацина, а также данным, приведенным в таблице 3.

Соискатель является соавтором 5 статей, 4 из них – по теме диссертации, все опубликованы в журналах, индексируемых в международных информационно-аналитических системах научного цитирования Web of Science и Scopus. Общий объём опубликованных по теме диссертации работ составляет 33 стр. Работы написаны соискателем в соавторстве с другими исследователями, личный вклад диссертанта заключается в экспериментальном определении параметров изотерм сорбции воды и летучих органических соединений циклодекстринами, определении состава, термостабильности, а также изучении кристаллических упаковок полученных соединений включения, анализе литературных данных, обобщении полученных результатов и написании статей.

Диссертационная работа не содержит недостоверных сведений об опубликованных соискателем работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации.

Основное содержание диссертации изложено в следующих публикациях:

1) Gatiatulin, A.K. Size exclusion effect in binary inclusion compounds of α -cyclodextrin / A.K. Gatiatulin, **V.Y. Osel'skaya**, M.A. Ziganshin, V.V. Gorbatchuk // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2018. – Vol. 20, № 41. – P.26105-26116.

2) Gatiatulin, A.K. Smart control of guest inclusion by alpha-cyclodextrin using its hydration history / A.K. Gatiatulin, **V.Y. Osel'skaya**, M.A. Ziganshin, V.V. Gorbatchuk // RSC Advances. – 2019. – Vol. 9, № 65. – P.37778-37787.

3) Gatiatulin, A.K. Guest exchange in anhydrous inclusion compounds of α -cyclodextrin and its amorphization / A.K. Gatiatulin, **V.Y. Osel'skaya**, M.A. Ziganshin, V.V. Gorbatchuk // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. – 2021. – Vol. 146, № 6. – P. 2417-2422.

4) Гатиатулин, А.К. Приготовление соединений включения γ -циклодекстрина методом твердофазного замещения гостя / А.К. Гатиатулин, В.Ю. Осельская, М.А. Зиганшин, В.В. Горбачук // Журнал общей химии. – 2022. – Т. 92, № 7. – С. 1093-1098.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– **показано**, что при твердофазном связывании летучих органических веществ и воды сухими α - и γ -циклодекстринами проявляется эффект исключения «гостя» по объему, который заключается в уменьшении количества связываемого «гостя», а также в повышении энергии Гиббса клатратообразования с ростом размера молекул «гостя»;

– **показано**, что увеличение степени гидратации α - и γ -циклодекстринов повышает их сродство к летучим органическим соединениям, но уменьшает их сорбционную емкость;

– **показано**, что история гидратации α -циклодекстрина существенно влияет на его упаковку и рецепторную емкость по отношению к органическим «гостям»: промежуточный гидрат, приготовленный гидратацией безводного α -циклодекстрина, имеет более плотную упаковку и бóльшую рецепторную емкость, чем аналогичный промежуточный гидрат, приготовленный дегидратацией насыщенного гидрата α -циклодекстрина;

– **показано**, что ряд органических веществ могут выполнять активирующую роль при связывании органических «гостей» α - и γ -циклодекстринами: для α -циклодекстрина такими веществами являются этанол, 2-пропанол и ацетонитрил, а для γ -циклодекстрина лучшим уходящим «гостем» является этанол;

– **показано**, что в гидратах γ - и β -циклодекстринов вода может играть конкурирующую роль при связывании лекарственного вещества индометацина в условиях твердофазного диспергирования.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

– обнаруженные закономерности влияния воды на сродство и рецепторную емкость циклодекстринов по отношению к органическим «гостям», возможность использования органических соединений вместо воды в качестве активирующего агента, а также наблюдаемое влияние истории гидратации существенно расширяют имеющиеся в литературе теоретические представления о движущих силах процесса твердофазной инкапсуляции органических «гостей» с участием циклодекстринов.

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

– полученные данные об активирующей и конкурирующей роли воды в связывании органических веществ твердыми нативными циклодекстринами и о применении для этой цели летучих органических соединений вместо воды могут быть использованы для оптимизации технологических процессов инкапсуляции биологически активных веществ циклодекстринами.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что достоверность результатов подтверждается использованием современного оборудования, согласованностью экспериментальных данных, полученных в диссертационной работе разными методами, и имеющихся в литературе.

Личный вклад соискателя заключается в получении всех экспериментальных данных, представленных в работе, в математической обработке экспериментальных данных, в сборе и анализе литературных данных, в обобщении полученных результатов совместно с научным руководителем, а также в подготовке публикаций по теме диссертационного исследования.

В ходе защиты Осельская В.Ю. исчерпывающе ответила на вопросы, заданные в ходе заседания диссертационного совета. Критических замечаний высказано не было.

На заседании 14 декабря 2022 г. диссертационный совет принял решение присудить Осельской Виктории Юрьевне ученую степень кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия за решение

научной задачи установления роли гидратации в структурном состоянии твердых циклодекстринов в процессах образования комплексов включения с органическими соединениями, что имеет существенное значение для развития физико-химии природных макроциклических олигосахаридов.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 8 докторов наук по специальности 1.4.4. Физическая химия, участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовали за – 17, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель диссертационного совета

доктор химических наук, академик

Олег Герольдович Синяшин

Ученый секретарь диссертационного совета

кандидат химических наук

Асия Васильевна Торопчина

14 декабря 2022 года