

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.285.08 НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО АВТОНОМНОГО
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО
ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ «УРАЛЬСКИЙ
ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ ПЕРВОГО ПРЕЗИДЕНТА
РОССИИ Б.Н. ЕЛЬЦИНА», МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 02.11.2015 г. № 14

О присуждении Горбуновой Татьяне Ивановне, гражданство Российской Федерации, ученой степени доктора химических наук.

Диссертация «Полихлорированные бифенилы в реакциях замещения» по специальности 02.00.03 – Органическая химия принята к защите 08 июня 2015 г., протокол № 9 диссертационным советом Д 212.285.08 на базе ФГА-ОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Минобрнауки России, 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19; созданным приказом Минобрнауки России № 105/нк от 11.04.2012 г.

Соискатель, Горбунова Татьяна Ивановна, 1966 года рождения.

Диссертацию на соискание ученой степени кандидата химических наук «Синтез и свойства несопряженных α,ω -полифтордиенов» защитила в 1996 году в диссертационном совете, созданном на базе Уральского государственного технического университета, г. Екатеринбург; работает в должности старшего научного сотрудника лаборатории фторорганических соединений ФГБУН Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения Российской академии наук (г. Екатеринбург), Федеральное агентство научных организаций.

Диссертация выполнена в лаборатории фторорганических соединений ФГБУН Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения Российской академии наук (ИОС УрО РАН), Федеральное агентство научных организаций.

Научный консультант – доктор химических наук, академик РАН, Чухачин Олег Николаевич, ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», кафедра органической химии, заведующий кафедрой.

Официальные оппоненты:

Кучин Александр Васильевич, доктор химических наук, профессор, член-корреспондент РАН, ФГБУН Институт химии Коми научного центра Уральского отделения Российской академии наук (г. Сыктывкар), директор;

Злотин Сергей Григорьевич, доктор химических наук, профессор, ФГБУН Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук (г. Москва), заместитель директора;

Боярский Вадим Павлович, доктор химических наук, доцент, ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет», кафедра физической органической химии, профессор,

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», г. Москва, в своем положительном заключении, подписанном Мажугой Александром Георгиевичем, доктором химических наук, доцентом, доцентом кафедры органической химии химического факультета, Ненайденко Валентином Георгиевичем, доктором химических наук, профессором, заведующим кафедрой органической химии химического факультета, Белоглазкиной Еленой Кимовной, доктором химических наук, профессором, профессором кафедры органической химии химического факультета, указала, что диссертационная работа Горбуновой Т.И. является научно-квалификационной работой высокого уровня, которая содержит обоснованную актуальность, научную и практическую значимость, обладает

достаточной новизной, полученные результаты вносят значимый вклад в развитие химической отрасли, а также в развитие теоретических основ органической химии в целом и химии хлорароматических соединений, в частности. Перечисленная совокупность достоинств диссертационной работы соответствует требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к докторским диссертациям, а автор диссертации, Горбунова Татьяна Ивановна, заслуживает присуждения ей ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.03 – Органическая химия.

Соискатель имеет 168 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации – 55 работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях – 19.

Другие публикации по теме диссертации представлены в виде 3 патентов Российской Федерации на изобретение; 2 монографий (одна коллективная); 10 статей, опубликованных в сборниках научных трудов; 21 тезиса докладов, опубликованных в сборниках материалов всероссийских (14) и международных (7) научных конференций. Общий объем опубликованных работ – 48,2 п.л., авторский вклад – 11,7 п.л.

Наиболее значительные научные работы по теме диссертации:

1. Горбунова, Т.И. Химические методы превращений полихлорбифенилов / Т.И. Горбунова, В.И. Салоутин, О.Н. Чупахин // Успехи химии. – 2010. – Т. 79, № 6. – С. 565–586 (1,80 п.л./0,60 п.л.).

2. Горбунова, Т.И. Пример междисциплинарного подхода к проблеме обезвреживания техногенных полихлорбифенилов / Т.И. Горбунова, М.Г. Первова, А.А. Панюкова, Д.О. Егорова, В.И. Салоутин, В.А. Демаков, О.Н. Чупахин // Доклады Российской академии наук. – 2014. – Т. 454, № 4. – С. 411–416 (0,52 п.л./0,08 п.л.).

3. Bacterial Degradation of a Mixture Obtained through the Chemical Modification of Polychlorinated Biphenyls by Polyethylene Glycols / D.O. Egorova, T.I. Gorbunova, M.G. Pervova, V.A. Demakov // Appl. Biochem. Microbiol. 2014. – V. 50, N 7. – P. 722–729 (0,64 п.л./0,16 п.л.).

4. Полихлорбифенилы: корреляция между экспериментальными данными и квантово-химическими расчетами / Т.И. Горбунова, Ю.О. Субботина, В.И. Салоутин, О.Н. Чупахин // Журн. общ. химии. – 2014. – Т. 84, № 3. – С. 428–437 (0,72 п.л./0,18 п.л.).

5. Термодинамическое моделирование взаимодействия полихлорированных бифенилов с метоксидом натрия / Т.В. Куликова, А.В. Майорова, К.Ю. Шуняев, Т.И. Горбунова, В.И. Салоутин, О.Н. Чупахин // Журн. общ. химии. – 2013. – Т. 83, № 5. – С. 754–762 (0,66 п.л./0,11 п.л.).

6. Взаимодействие полихлорированных бензолов и бифенилов с неопентилгликолем / М.Г. Первова, Т.И. Горбунова, М.А. Саморукова, В.И. Салоутин, О.Н. Чупахин // Журн. общ. химии. – 2012. – Т. 82, № 3. – С. 435–442 (0,60 п.л./0,12 п.л.).

7. Особенности реакционной способности конгенов полихлорбифенилов в реакциях нуклеофильного замещения / Т.И. Горбунова, М.Г. Первова, В.И. Салоутин, О.Н. Чупахин // Журн. общ. химии. – 2012. – Т. 82, № 1. – С. 142–147 (0,44 п.л./0,11 п.л.) (0,47 п.л./0,12 п.л.).

8. Reactivity of polychlorinated biphenyls in nucleophilic and electrophilic substitutions / T.I. Gorbunova, J.O. Subbotina, V.I. Saloutin, O.N. Chupakhin // J. Hazard. Mater. – 2014. – V. 278. – P. 491–499 (0,64 п.л./0,16 п.л.).

9. Горбунова, Т.И. Полихлорбифенилы. Проблемы экологии, анализа и химической утилизации: монография / Т.И. Горбунова, М.Г. Первова, О.Н. Забелина, В.И. Салоутин, О.Н. Чупахин. – М.: Красанд, 2011. – 400 с. (25,00 п.л./5,00 п.л.).

10. Пат. 2175964 Российская Федерация, МПК⁷ C07C17/395, C07C25/18. Способ химической утилизации (переработки) полихлорированных дифенилов / О.Н. Чупахин, А.Я. Запевалов, Т.И. Горбунова, В.И. Салоутин, В.Я. Бершадский; заявитель и патентообладатель Институт органического синтеза УрО РАН (RU). – № 99117620/04; заявл. 10.08.1999; опубл. 20.11.2001 // Изобретения. Полезные модели. – 2001. – № 32, Ч. II. – С. 187.

На автореферат поступили положительные отзывы:

1. Одинокова Виктора Николаевича, д-ра хим. наук, профессора, главного научного сотрудника лаборатории органического синтеза и Джемилева Усейна Меметовича, чл.-корр. РАН, д-ра хим. наук, профессора, директора ФГБУН Институт нефтехимии и катализа РАН (г. Уфа). Без замечаний.

2. Октябрьского Олега Николаевича, д-ра биол. наук, профессора, зав. лабораторией физиологии и генетики микроорганизмов ФГБУН Институт экологии и генетики микроорганизмов УрО РАН (г. Пермь). Без замечаний.

3. Чапуркина Виктора Васильевича, д-ра хим. наук, профессора кафедры органической химии ФГБОУ ВПО «Волгоградский государственный технический университет». Содержит вопросы: 1. Автор не приводит сравнительного анализа эффективности представленных им способов обезвреживания ПХБ и неясно, насколько полезна информация о реакционной способности хлорированных бифенилов для их обезвреживания. 2. Вывод, что при нитровании ПХБ впервые установлено, что количество введенных электрофильных групп находится в обратной зависимости от количества атомов хлора в исходных соединениях, очевиден.

4. Каабака Леонида Владимировича, д-ра хим. наук, профессора, главного научного сотрудника лаборатории № 56 ФГУП «Государственный научно-исследовательский институт органической химии и технологии» (г. Москва). Содержит замечания: 1. Ни одно из «основных положений, выносимых на защиту» не является установленным автором научным положением, а скорее названием направления или этапа исследования. 2. Название главы 4 «Полихлорированные бифенилы в реакциях радикального типа» не вполне соответствует содержанию, так как ее значительная часть посвящена реакциям хлорбензолов. 3. Первый вывод (стр. 43) представляется убедительным только относительно реакций нуклеофильного замещения. 4. Не указана использованная аналитическая аппаратура.

5. Осипова Сергея Николаевича, д-ра хим. наук, зав. лабораторией экологической химии (№ 126) и Чканикова Николая Дмитриевича, д-ра хим. на-

ук, зав. лабораторией физиологически активных фторорганических соединений (№ 115) ФГБУН Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН (г. Москва). Содержит вопросы и замечания: 1. В работе автор показывает три принципиальных направления химической функционализации конгенов ПХБ, а микробиологическая деструкция производных ПХБ исследована только на соединениях, синтезированных в результате нуклеофильного замещения. Уместной была бы демонстрация бактериальной деструкции других производных. 2. Какие взаимодействия ПХБ, неисследованные в работе, автор считает перспективными?

6. Бардина Вадима Викторовича, д-ра хим. наук, ведущего научного сотрудника лаборатории галоидных соединений ФГБУН Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения РАН (г. Новосибирск). Содержит замечания: 1. Термин «конгенер» является транслитерацией слова «congener», и он не является общеупотребимым в русскоязычной химической литературе. Нужно пояснить значение, в котором его использует автор. 2. В нескольких местах автореферата упоминается возможность образования нежелательных продуктов, ПХДД и ПХДФ, но нигде нет указаний, что в условиях, более жестких по сравнению с использованными в работе, такие продукты действительно образуются в значимых количествах. 3. На с. 21 написано, что «... при температурах 110 и 140 °С, конверсия соединений смеси С13 составила 82 и 40% соответственно». Но из схемы 2 следует, что продолжительность реакции при 110 °С – 7.5 ч, а при 140 °С – 2 ч. Насколько правомочно обсуждать результаты, полученные в разных условиях.

7. Трегера Юрия Анисимовича, д-ра хим. наук, профессора, генерального директора ООО «Научно-исследовательский инженерный центр “Синтез”» (г. Москва). Без замечаний.

8. Карпова Виктор Михайловича, д-ра хим. наук, главного научного сотрудника лаборатории галоидных соединений ФГБУН Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения РАН

(г. Новосибирск). Замечание: единица измерения заряда q вызывает некоторое недоумение.

9. Талипова Рифката Фаатовича, д-ра хим. наук, зав. кафедрой органической и биоорганической химии и Вакулина Ивана Валентиновича, д-ра хим. наук, профессора кафедры органической и биоорганической химии ФГБОУ ВПО «Башкирский государственный университет» (г. Уфа). Содержит вопросы и замечания: 1. В работе рассматривается важнейшая тема утилизации ПХБ. Изучение только лишь реакционной способности не может рассматриваться как разработка нового метода (не указаны значения конверсии ПХБ, границы применимости метода, возможность образования ПХДД, ПХДФ и т.д.). 2. Использование термина «дескриптор» в качестве параметра оценки электрофильности и нуклеофильности не вполне корректно. 3. П.5 выводов предсказуем и хорошо согласуется с общеизвестными положениями о протекании реакций электрофильного замещения в ароматическом ряду. 4. Не вполне понятна необходимость применения метода Бенсона для расчета термодинамических параметров. Квантово-химические методы позволяют вычислять термодинамические параметры с существенной большей точностью.

10. Таран Оксаны Павловны, д-ра хим. наук, доцента, ведущего научного сотрудника лаборатории каталитических методов преобразования солнечной энергии и Пармона Валентина Николаевича, д-ра хим. наук, профессора, академика РАН, заведующего лабораторией каталитических методов преобразования солнечной энергии, научного руководителя ФГБУН Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения РАН (г. Новосибирск). Содержит вопросы и замечания: 1. В диссертации наиболее полно исследована реакционная способность производных ПХБ в реакциях нуклеофильного замещения. Относительно реакций электрофильного замещения высказано сожаление о вероятной сложности и длительности квантово-химических расчетов, а теоретическая интерпретация результатов исследования радикальных процессов в автореферате не упоминается. 2. В разделе 2.5.1. автореферата упоминается каталитическое действие полиэтиленгликоля как открытоцепного

аналога краун-эфиров на реакцию нуклеофильного замещения. Поясните механизм такого каталитического действия. 3. В тексте автореферата имеются неудачные выражения.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их широкой известностью своими достижениями в области органической химии, их высокой научной компетентностью в области химии хлорароматических соединений, в том числе полихлорированных бифенилов (ПХБ), и способностью определить научную и практическую ценность диссертации.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– **предложен** оригинальный научный подход к оценке реакционной способности конгенов ПХБ в процессах нуклеофильного замещения с использованием дескрипторов, найденных с помощью квантово-химических расчетов;

– экспериментально **доказано**, что квантово-химические расчеты для конгенов ПХБ более достоверны по сравнению с термодинамическими;

– **разработаны** методы алкоксилирования, гидроксирования, нитрования и перфторалкилирования конгенов ПХБ, в том числе технических смесей ПХБ, протекающих в диапазоне температур до 200 °С;

– **предложен** новый междисциплинарный подход к проблемам обезвреживания токсичных ПХБ, заключающийся в комбинации химических и микробиологических методов.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

– **доказаны** положения, вносящие существенный вклад в расширение представлений о реакционной способности хлорароматических соединений;

– **применительно к проблематике диссертации эффективно использован** комплекс существующих базовых расчетных, экспериментальных и аналитических методов органической химии;

– **раскрыт** богатый потенциал химической модификации ПХБ с помощью реакций замещения.

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

– **разработаны** методы химической модификации ПХБ как стадии подготовки токсичных отходов для последующего уничтожения с помощью микробиологической деструкции;

– **представлены** данные по бактериальной деструкции алкокси- и гидроксипроизводных технических ПХБ, протекающей без накопления токсичных соединений;

– **установлены** производные технических ПХБ, не обладающие острой токсичностью, которые целесообразно использовать в ресурсосберегающих технологиях.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

экспериментальные работы проведены с использованием стандартной техники и являются воспроизводимыми; теория построена на известных проверяемых данных, согласуется с опубликованными экспериментальными данными по теме диссертации; идеи базируются на анализе практики и обобщении передового опыта; использовано сравнение авторских данных и данных, полученных ранее по рассматриваемой тематике, установлено качественное совпадение авторских данных с результатами в независимых источниках; идентификация соединений проведена с помощью современного высокоточного оборудования; использовано современное программное обеспечение для расчетов.

Личный вклад соискателя состоит в непосредственном участии на всех этапах процесса: получении исходных данных, самостоятельно выполненной экспериментальной части, личном участии в апробации результатов, обработке и интерпретации экспериментальных данных, подготовке всех публикаций, формулировании выводов и защищаемых положений диссертации.

На заседании 02 ноября 2015 г. диссертационный совет принял решение присудить Горбуновой Т.И. ученую степень доктора химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 21 человека, из них 15 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 21, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Заместитель председателя
диссертационного совета



Бакулев Василий Алексеевич

Ученый секретарь
диссертационного совета



Поспелова Татьяна Александровна

02.11.2015 г.