

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.092.02
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ИНСТИТУТА
ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ ИМ. Н.Д. ЗЕЛИНСКОГО РОССИЙСКОЙ
АКАДЕМИИ НАУК
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА НАУК

Аттестационное дело № _____

Решение диссертационного совета от 02.12.2025 г. № 17

О присуждении Патиль Екатерине Дмитриевне (гражданину Российской Федерации) учёной степени кандидата химических наук.

Диссертация «Количественный анализ и механистическое исследование процессов R-NHC-сочетания в палладиевых каталитических системах» по специальности 1.4.4. (Физическая химия) принята к защите 30 сентября 2025 г., протокол № 10, диссертационным советом 24.1.092.02 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук (ИОХ РАН). Диссертационный совет создан в соответствии с приказом ВАК № 105/нк от 11.04.2012 (о создании совета) и № 516 от 26 мая 2017 года (о внесении изменений в составы советов). Состав диссертационного совета Д 002.222.02 утвержден в количестве 22 человек на период действия номенклатуры специальностей научных работников, утвержденной приказом Минобрнауки России № 59 от 25.02.2009 г. Переименован в 24.01.092.02 в соответствии с номенклатурой научных специальностей, по которым присуждаются ученые степени, утвержденной приказом № 118 от 24 февраля 2021 года. В соответствии с приказом № 2153/нк от 27 ноября 2023 года (о внесении изменений в составы советов) состав совета утвержден в количестве 24 человек.

Соискатель Патиль Екатерина Дмитриевна 1993 года рождения, в 2017 году с отличием окончила химический факультет Национального исследовательского Томского государственного университета, диплом магистра с отличием № 107008 0005426. Прошла обучение в аспирантуре ИОХ РАН с 15 сентября 2017 года по 14 сентября 2021 года, диплом № 107704 0158483. В настоящее время работает ведущим инженером Ученого секретариата ИОХ РАН.

Диссертация выполнена в Лаборатории металлокомплексных и наноразмерных катализаторов № 30 ИОХ РАН; научный руководитель — академик РАН, доктор химических наук, заведующий Лабораторией металлокомплексных и наноразмерных катализаторов № 30 **Анаников Валентин Павлович**.

Официальные оппоненты:

Ларионов Владимир Анатольевич (доктор химических наук, ведущий научный сотрудник, заведующий Лабораторией стереонаправленного синтеза биоактивных соединений ИНЭОС РАН);

Сидоров Алексей Анатольевич (доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник Лаборатории химии координационных полиядерных соединений ИОНХ РАН)

дали **положительные отзывы** на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева Российской академии наук в своем **положительном заключении**, подписанном Скатовой Александрой Анатольевной (доктор химических наук, профессор РАН, ведущий научный сотрудник, заведующий Лабораторией лиганд-промотируемых реакций) указала, что диссертационная работа Е.Д. Патиль по поставленным задачам, уровню их решения, актуальности и научной новизне безусловно удовлетворяет всем требованиям «Положения о порядке присуждения учёных степеней» (утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от

24.09.2013 г. № 842 с изменениями Постановлений Правительства РФ от: 21.04.2016 г. № 335; 02.08.2016 г. № 748; 29.05.2017 г. № 650; 20.03.2021 г. № 426), предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата наук, а её автор, Патиль Екатерина Дмитриевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 — Физическая химия.

Соискатель имеет **8 опубликованных работ по теме диссертации**, из которых **3 статьи** — в изданиях, включенных в наукометрические базы данных Scopus и Web of Science.

В диссертационной работе отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем учёной степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. 1. Kostyukovich A.Yu., Tsedilin A.M., **Sushchenko E.D.**, Eremin D.B., Kashin A.S., Topchiy M.A., Asachenko A.F., Nechaev M.S., Ananikov V.P. *In situ* transformations of Pd/NHC complexes with N-heterocyclic carbene ligands of different nature into colloidal Pd nanoparticles // *Inorganic Chemistry Frontiers*. – 2019. – Т. 6, № 2. – С. 482-492. **IF – 5,934 (Q1)**;

2. Kostyukovich A.Yu., **Patil E.D.**, Burykina J.V., Ananikov V.P. Transformations of Pd/(N-Heterocyclic Carbene) Molecular Complexes into a Nanosized Catalyst System in the Mizoroki–Heck Reaction // *Kinetics and Catalysis*. – 2023. – Т. 64, № 1. – С. 44-54. **IF – 1,3 (Q3)**;

Patil E.D., Burykina J.V., Eremin D.B., Boiko D.A., Shepelenko K.E., Ilyushenkova V.V., Chernyshev V.M., Ananikov V.P. Quantitative determination of active species transforming the R-NHC coupling process under catalytic conditions // *Inorganic Chemistry*. – 2024. – Т. 63, № 6. – С. 2967-2976. **IF – 4,3 (Q1)**.

На автореферат поступило **3 положительных отзыва**.

В них отмечены актуальность, новизна и практическая значимость диссертационной работы. Отзывы прислали: 1) к.х.н. Г.В. Мамонтов

(заведующий Научно-исследовательской лабораторией пористых материалов и сорбции Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», г. Томск), 2) д.х.н. Р.М. Мироненко (ведущий научный сотрудник Отдела каталитических процессов Центра новых химических технологий Федерального бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН» (Омский филиал), г. Омск), 3) д.х.н. Д.Ш. Сабиров (директор Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, г. Уфа). Изложенные замечания по работе не носят принципиального характера, относятся к уточнениям универсальности предложенного метода, условиям проведения экспериментов, выбору модельных структур для расчетов методом теории функционала плотности. Все недостающие в автореферате сведения содержатся в тексте диссертации и публикациях по теме диссертации.

Выбор официальных оппонентов обосновывается близостью тематик научных работ, их компетентностью в области металлокомплексного катализа и физической химии, а также наличием значительного количества публикаций по данной тематике; **ведущей организации** – компетентностью и наличием значительного количества публикаций по металлокомплексному катализу, в том числе в области исследования механизмов каталитических реакций.

В дискуссии приняли участие:

д.х.н. Газиева Г.Н. (в.н.с. Лаборатории № 19), д.х.н. Елисеев О.Л. (заведующий Лабораторией № 40), д.х.н. Богдан В.И. (заведующий Лабораторией № 15), д.х.н., проф. Пивина Т.С. (в.н.с. Лаборатории № 44), д.х.н. Исаева В.И. (в.н.с. Лаборатории № 3), к.х.н. Редина Е.А. (с.н.с.

Лаборатории № 14), чл.-корр. РАН Джемилев У.М. (г.н.с. Лаборатории № 1), д.х.н. Свитанько И.В. (заведующий Лабораторией № 44).

ПОСТАНОВИЛИ:

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

показана возможность использования предложенной методики на примере трех комплексов с разными NHC-лигандами в условиях реакций Мизороки-Хека, Соногаширы и трансферного гидрирования дифенилацетилена;

выявлена возможность количественного определения продуктов трансформации Pd/NHC-комплексов с загрузкой комплекса до 0,005 мол.%;

установлено, что образование продукта H-NHC-сочетания протекает обратимо;

выявлено образование продукта Ph-NHC-сочетания в условиях отсутствия иодбензола в реакции трансферного гидрирования дифенилацетилена.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

показано, что образование продукта Ph-NHC-сочетания в реакции стехеометрического взаимодействия Pd/NHC-комплексов и иодбензола является закономерным процессом и не зависит от структуры используемого лиганда;

разработана методика количественного определения продуктов трансформации комплексов Pd/NHC методом масс-спектрометрии высокого разрешения;

установлено образование основных продуктов трансформации комплексов Pd/NHC в реакциях Мизороки-Хека, Соногаширы, трансферного гидрирования алкинов;

предложен механизм образования продукта Ph-NHC-сочетания в реакции трансферного гидрирования в условиях отсутствия иодбензола;

выявлены возможные пути образования продукта Ph-NHC- и H-NHC-сочетания в условиях реакции Мизороки-Хека путем квантово-химического моделирования с использованием метода теории функционала плотности, а

так же изучена кинетика из образования в реакционной смеси. На основании этого **выдвинуто** предположение об обратимости образования продукта Н-NHC-сочетания.

применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов) использованы:

- спектроскопия ЯМР;
- масс-спектрометрия высокого разрешения;
- просвечивающая электронная микроскопия;
- квантово-химические расчёты методом теории функционала плотности;
- традиционные экспериментальные методы химии.

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

показана возможность использования предложенного метода для количественного анализа продуктов трансформации комплексов, используемых в каталитических количествах.

продемонстрированные возможности количественного анализа методом масс-спектрометрии высокого разрешения представляют интерес для дальнейшего изучения путей трансформации исходных Pd/NHC-комплексов в важнейших реакциях тонкого органического синтеза.

проведена количественная оценка образования продуктов R-NHC-сочетания в условиях каталитических реакций Мизороки-Хека, Соногаширы и трансферного гидрирования дифенилацетилена с тремя различными лигандами в составе палладиевых комплексов;

установлено, что основным продуктом трансформации в реакции Мизороки-Хека является продукт Ph-NHC-сочетания, в реакции Соногаширы – продукты Н-NHC- и Ph-NHC-сочетания, а в реакции трансферного гидрирования дифенилацетилена – продукт О-NHC-сочетания.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

достоверность результатов обусловлена высоким уровнем проведения экспериментальной работы, использованием комплекса современных физико-химических методов исследования, согласованностью результатов экспериментальных исследований с результатами других работ. Также достоверность обеспечивается независимой экспертизой опубликованных материалов в рецензируемых научных изданиях и апробацией на российских и международных научных конференциях;

теоретическая интерпретация полученных экспериментальных данных, научные положения и выводы, сформулированные в работе, согласуются с современными представлениями в области изучения механизмов реакций при участии ННС-комплексов палладия;

идея базируется на комплексном анализе и систематизации передового опыта российских и зарубежных исследований в области трансформации ННС-комплексов палладия в различных реакциях органического синтеза;

использованы современные системы сбора и обработки научно-технической информации: электронные базы данных Reaxys (Elsevier), SciFinder (Chemical Abstracts Service), Web of Science (Clarivate Analytics) и Scopus (Elsevier), а также полные тексты опубликованных статей, монографий и книг.

Личный вклад соискателя состоит в непосредственном участии в планировании и проведении всех синтетических (за исключением паллильных комплексов и некоторых дейтерированных стандартов) и каталитических экспериментов, получении и обработке экспериментальных данных, анализе и интерпретации полученных результатов, а также в подготовке научных публикаций к печати. Соискатель лично осуществлял поиск, анализ и обобщение литературных данных по теме диссертации, представлял научные доклады по теме диссертационной работы на научных конференциях.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи и соответствуют критерию внутреннего единства, что подтверждается

наличием последовательного плана исследований, основной идейной линии, концептуальности и взаимосвязи выводов.

Опубликованные работы и автореферат отражают основное содержание диссертационной работы.

Диссертационный совет пришёл к выводу о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, в которой решена научная задача, имеющая важное значение для современного металлокомплексного катализа – создание и валидация методики количественного определения продуктов трансформации комплексов палладия, используемого в каталитических количествах в реакциях Соногаширы, Мизороки-Хека и трансферного гидрирования дифенилацетилена. Таким образом, диссертационная работа соответствует критериям, установленным в п. 9 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, и диссертационный совет принял решение присудить **Патиль Екатерине Дмитриевне** учёную степень кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 5 докторов наук по специальности 1.4.4. Физическая химия рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 24 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение учёной степени – 17, против присуждения учёной степени – 1, недействительных бюллетеней нет.

Заместитель председателя
диссертационного совета д.х.н.

Заместитель директора ИОХ РАН

Ученый секретарь
диссертационного совета, к.х.н.

2 декабря 2025 г.



О.Л. Елисеев

Е.А. Редина