

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.092.01 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 27.09.2023 г. № 24

О присуждении Шаферову Александру Викторовичу (гражданину Российской Федерации) ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Синтез новых энергоёмких и фармакологически ориентированных структур, содержащих 1,2,5-оксадиазольный цикл» по специальности 1.4.3. (Органическая химия) принята к защите 6 июля 2023 г., протокол №17, диссертационным советом 24.1.092.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук (ИОХ РАН), возобновленного 24 сентября 2021 года в соответствии с приказом № 964/нк.

Соискатель Шаферов Александр Викторович 1995 года рождения, в 2019 году с отличием окончил химический факультет Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова», диплом специалиста с отличием № ААМ 2700309. В период подготовки диссертации соискатель обучался в очной аспирантуре ИОХ РАН с 16 сентября 2019 года по 15 сентября 2023 года. В настоящее время работает инженером-исследователем в Лаборатории азотсодержащих соединений №19 ИОХ РАН.

Диссертация выполнена в ИОХ РАН; научный руководитель — доктор химических наук, ведущий научный сотрудник, заведующий Лабораторией азотсодержащих соединений №19 Ферштат Леонид Леонидович.

Официальные оппоненты:

Аверина Елена Борисовна (доктор химических наук, доцент, профессор кафедры медицинской химии и тонкого органического синтеза химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»);

Цховребов Александр Георгиевич (доктор химических наук, ведущий научный сотрудник, первый заместитель директора Объединенного института химических исследований факультета физико-математических и естественных наук Федерального

государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы»)

дали **положительные отзывы** на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Северо-Кавказский федеральный университет» в своем **положительном заключении**, подписанном Аксёновым Николаем Александровичем (доктор химических наук, заведующий кафедрой органической химии химико-фармацевтического факультета) указала, что диссертационная работа А.В. Шаферова по поставленным задачам, уровню их решения, актуальности и научной новизне безусловно удовлетворяет всем требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (утвержденного постановлением Правительства РФ 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), а ее автор, Шаферов Александр Викторович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.3 — Органическая химия.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается близостью тематик научных работ: диссертационная работа относится к области развития методологии органического синтеза азотсодержащих гетероциклических систем.

На автореферат поступило 3 положительных отзыва: от д.х.н. Ю. В. Шкляева (профессор, заведующий отделом органического синтеза Института технической химии УрО РАН – филиала ФГБУН «Пермский федеральный исследовательский центра Уральского отделения Российской академии наук»), от к.х.н. Д. А. Кулагиной (старший научный сотрудник Лаборатории медицинской химии ФГБУН «Институт проблем химико-энергетических технологий Сибирского отделения Российской академии наук»), от к.х.н. Н. А. Семёнова (заведующий лабораторией гетероциклических соединений ФГБУН «Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук»). Изложенные замечания по работе не носят принципиального характера, в основном относятся к оформлению автореферата и наличию опечаток. Все недостающие в автореферате сведения содержатся в тексте диссертации и публикациях по теме диссертации.

В дискуссии приняли участие: д.х.н., проф. РАН С. З. Вацадзе (заведующий лабораторией супрамолекулярной химии №2), член-корр. РАН С. П. Громов, д.х.н., проф. В. В. Семёнов (заведующий лабораторией медицинской химии №17), д.х.н., проф. О. А. Ракитин (заведующий лабораторией полисераазотистых гетероциклов №31), д.х.н., проф. А. Ю. Сухоруков (заведующий лабораторией органических и металл-органических азот-

кислородных систем №9), чл.-корр. РАН С. Г. Злотин (заведующий лабораторией тонкого органического синтеза им. Н.Н. Назарова №11).

Соискатель имеет **17 публикаций**, в том числе **13 опубликованных работ по теме диссертации**, из которых **5 статей в рецензируемых журналах** и **8 тезисов докладов на научных конференциях**.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Larin A. A., **Shaferov A. V.**, Epishina M. A., Melnikov I. N., Muravyev N. V., Ananyev I. V., Fershtat L. L., Makhova N. N. Pushing the energy-sensitivity balance with high-performance bifuroxans // ACS Appl. Energy Mater. – 2020. – Т. 3. – № 3. – С. 7764-7771. DOI: 10.1021/acsaem.0c01162
2. Larin A. A., **Shaferov A. V.**, Kulikov A. S., Pivkina A. N., Monogarov K. A., Dmitrienko A. O., Ananyev I. V., Khakimov D. V., Fershtat L. L., Makhova N. N. Design and Synthesis of Nitrogen-Rich Azo-Bridged Furoxanylazoles as High-Performance Energetic Materials // Chem. Eur. J. – 2021. – Т. 27. – № 59. – С. 14628-14637. DOI: 10.1002/chem.202101987
3. Titenkova. K. Yu., **Shaferov A. V.**, Larin A. A., Epishina M. A., Kulikov A. S., Ananyev I. V., Fershtat L. L. Tandem acid-promoted intramolecular azide-hydrazone electrocyclization/hydrolysis approach for the synthesis of N-Aminotetrazoles // Tetrahedron. – 2022. – Т. 103. – С. 132563. DOI: 10.1016/j.tet.2021.132563
4. Larin A. A., **Shaferov A. V.**, Monogarov K. A., Meerov D. B., Pivkina A. N., Fershtat L. L. Novel energetic oxadiazole assemblies // Mendeleev Commun. – 2022. – Т. 32. – С. 111-113. DOI: 10.1016/j.mencom.2022.01.036
5. **Shaferov A. V.**, Arakelov S. T., Teslenko F. E., Pivkina A. N., Muravyev N. V., Fershtat L. L. First Example of 1,2,5-Oxadiazole-Based Hypergolic Ionic Liquids: a New Class of Potential Energetic Fuels // Chem. Eur. J. – 2023. DOI: 10.1002/chem.202300948

ПОСТАНОВИЛИ:

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

Созданы новые эффективные методы построения гибридных энергоёмких структур на основе фуроксанового цикла, содержащих эксплозофорные заместители и/или дополнительные азольные фрагменты.

Разработан метод синтеза энергоёмких безводородных бифуроксанильных структур, содержащих эксплозофорные нитро и/или азидогруппы.

Реализован метод синтеза гибридных тетрациклических энергоёмких соединений на основе комбинации фуроксанового и 1,2,4-оксадиазольного или 1,2,4-триазольного

гетероциклов, связанных азогруппой и содержащих дополнительные эксплозофорные заместители.

Предложен удобный метод синтеза фармакологически ориентированных N-(гетероарил)аминотетразолов на основе тандема реакций электроциклизации/гидролиза N-(гетероарил)азидогидразонов.

Продемонстрирована возможность получения нового структурного класса энергоёмких соединений — ионных жидкостей, содержащих 1,2,5-оксадиазольный цикл в катионной части.

Определены ключевые физико-химические и специальные характеристики новых синтезированных энергоёмких соединений.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

Определены зависимости «структура-свойство» в каждой из синтезированных серий энергоёмких веществ на основе 1,2,5-оксадиазола.

Предложен механизм формирования тетразольного цикла в ходе тандемной реакции электроциклизации/гидролиза на основе экспериментальных данных, полученных с использованием метода изотопных меток.

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

- ЯМР-спектроскопия;
- масс-спектрометрия высокого разрешения;
- рентгеноструктурный анализ;
- ИК-спектроскопия;
- дифференциальная сканирующая калориметрия;
- традиционные экспериментальные методики органической химии.

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

Определены ключевые физико-химические и специальные свойства полученных в работе энергоёмких структур. **Показано**, что большинство из этих соединений обладают высокой энтальпией образования, приемлемой плотностью и высокими расчётными детонационными характеристиками.

Созданы и успешно реализованы удобные и эффективные синтетические стратегии конструирования гибридных фармакологически ориентированных N-(1,2,5-оксадиазолил)аминотетразолов.

Изучены ключевые физико-химические характеристики впервые полученных в работе ионных жидкостей на основе 1,2,5-оксадиазола и N-метилимидазола, что позволяет

рекомендовать данные соединения для дальнейшего изучения в качестве перспективных топливных компонентов.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

Экспериментальные работы выполнены на высоком уровне, анализ полученных продуктов проводился на сертифицированном оборудовании. Для подтверждения строения и чистоты полученных продуктов **использован** комплекс современных физико-химических методов анализа, таких как спектроскопия ЯМР на ядрах ^1H , ^{13}C , ^{14}N , ^{15}N , элементный анализ, масс-спектрометрия и рентгеноструктурный анализ. Используются современные системы сбора и обработки научно-технической информации: электронные базы данных Reaxys (Elsevier), SciFinder (Chemical Abstracts Service) и Web of Science (Thomson Reuters), а также полные тексты статей, монографий и книг.

Теоретическая интерпретация полученных экспериментальных данных согласуется с литературными данными по процессам, родственными обнаруженным и исследованным в настоящей работе.

Личный вклад соискателя состоит в поиске, анализе и обобщении научной информации по известным способам построения и функционализации 1,2,4-оксадиазольного цикла. Соискатель самостоятельно выполнял описанные в диссертации химические эксперименты, а также самостоятельно проводил выделение и очистку образующихся соединений. Диссертант устанавливал строение полученных соединений с помощью физико-химических и спектральных методов анализа, а также обрабатывал и интерпретировал полученные результаты. Соискатель также осуществлял апробацию работ на конференциях и выполнял подготовку публикаций по выполненным исследованиям.

Диссертационный совет пришёл к выводу о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, в которой решена научная задача, имеющая принципиальное значение для органической химии, а именно разработаны новые методы направленной сборки би- и полигетероциклических систем, содержащих 1,2,5-оксадиазольный цикл, для получения структурно разнородных высокоэнергетических и фармакологически ориентированных соединений. Таким образом, диссертационная работа соответствует критериям, установленным в п. 9 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ 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, и принял решение присудить Шаферову Александру Викторовичу учёную степень кандидата химических наук по специальности 1.4.3. — органическая химия.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 12 докторов наук по специальности 1.4.3 – органическая химия рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 24 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение учёной степени 17, против присуждения учёной степени нет, недействительных бюллетеней нет.

Председатель диссертационного совета
Директор ИОХ РАН
Академик РАН



д.х.н. М. П. Егоров

Ученый секретарь
Диссертационного совета

д.х.н. Г.А.Газијева

27 сентября 2023 г.