

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.243.02,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ФЕДЕРАЛЬНОГО
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЦЕНТРА ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
ИМ. Н.Н. СЕМЁНОВА РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ФИЦ ХФ РАН), ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ
СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 22.10.2025, протокол № 11
о присуждении Захватовой Наталье Владимировне ученой степени кандидата
химических наук

Диссертация «Супрамолекулярные катализаторы радикального распада пероксидов на основе четвертичных аммониевых соединений» в виде рукописи по специальности 1.4.4 — физическая химия принята к защите 25 июня 2025 года (протокол № 8) диссертационным советом 24.1.243.02, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук, 119991, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4, приказом Рособнадзора № 105 н/к от 11 апреля 2012 года.

Соискатель **Захватова Наталья Владимировна** родилась 23 октября 1992 года, гражданка Российской Федерации. В период с 01 сентября 2010 года по 29 апреля 2016 года обучалась на факультете «Институт материалов современной энергетики и нанотехнологий (Инженерный физико-химический факультет)» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева, где ей была присвоена квалификация инженер по специальности «Химическая технология материалов современной энергетики». С 16 мая 2016 года по

29 мая 2020 года Захватова Н.В. обучалась в аспирантуре Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук по специальности 02.00.04 — физическая химия. С 1 апреля 2016 года по 11 октября 2019 года Захватова Н.В. работала в должности инженера-исследователя лаборатории жидкофазного окисления Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук. С 14 октября 2019 года по 10 февраля 2023 года Захватова Н.В. работала младшим научным сотрудником лаборатории жидкофазного окисления Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук. С 13 февраля 2023 года и до настоящего времени Захватова Н.В. работает научным сотрудником в лаборатории жидкофазного окисления Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук.

Диссертация выполнена в лаборатории жидкофазного окисления Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук.

Научный руководитель — **Касаикина Ольга Тарасовна**, гражданка Российской Федерации, доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории жидкофазного окисления Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

1. **Анисимов Александр Владимирович**, гражданин Российской Федерации, доктор химических наук, профессор кафедры химии нефти и органического катализа химического факультета Федерального государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

2. **Психа Борис Львович**, гражданин Российской Федерации, доктор химических наук, главный научный сотрудник лаборатории кинетического моделирования Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация — **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского Российской академии наук (ИОХ РАН)**, г. Москва, в своем положительном заключении, подписанным старшим научным сотрудником лаборатории исследования гомолитических реакций, кандидатом химических наук **Яременко Иваном Андреевичем** и утвержденном директором ИОХ РАН, академиком, доктором химических наук **Терентьевым Александром Олеговичем**, указала, что:

1). В диссертационной работе исследована генерация радикалов мицеллярными системами «четвертичные аммониевые соединения—гидропероксид» в органических средах (глава 3) и гетерогенными катализаторами радикального распада гидропероксидов, полученными иммобилизацией четвертичных аммониевых соединений на твердых носителях (глава 4). Было бы полезно завершить эти главы заключениями с развернутыми выводами и указанием перспектив применения исследованных иницирующих систем, поскольку три вывода в конце диссертационной работы только перечисляют (формулируют) результаты,

впервые полученные в работе.

2). Эндогенные четвертичные аммониевые соединения производные холина — гидрофильные вещества. Могут ли ацетилхолин и холин влиять на гидропероксиды в водных средах?

3). При иммобилизации ацетилхолин хлорида (ACh) на целлюлозе и биоэфирах сохраняется его способность катализировать гомолитический распад гидропероксидов. Не пробовали оценить бактерицидную активность таких систем?

4). В экспериментальной части не описано, как измерялся дзета-потенциал в хлороформных растворах полиэфиров.

5). В диссертации в списке сокращений (стр. 5) «М» означает монтмориллонит. Но это сокращение использовано далее в тексте для обозначения «мономер» (стирол или МММ) и размерности концентрации «моль/л», тогда как в автореферате применялись обозначения для монтмориллонита - «ММ», мономера - «Мм» и концентрации, как обычно — «М».

Соискатель имеет 32 опубликованные работы, в том числе по теме диссертации — 7 работ. Работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях — 7, общим объемом 2 печатных листа.

Наиболее значимые работы по теме диссертации:

1. Касаикина О.Т., Потапова Н.В., Круговов Д.А., Писаренко Л.М. Катализ радикальных реакций в смешанных мицеллах поверхностно-активных веществ с гидропероксидами // Кинетика и катализ. — 2017. — Т. 58, № 5. — С. 567–573.

2. Потапова Н.В., Касаикина О.Т., Березин М.П., Плащина И.Г. Каталитическое генерирование радикалов в супрамолекулярных системах с участием ацетилхолина // Кинетика и катализ. — 2020. — Т. 61, № 5. — С. 700–707.

3. Потапова Н.В., Касаикина О.Т., Березин М.П., Пластина И.Г., Гулин А.А. Супрамолекулярные катализаторы радикального распада гидропероксидов на основе производных холина // Кинетика и катализ. — 2023. — Т. 64, № 1. — С. 78–85.

На автореферат поступили отзывы:

1. Отзыв на автореферат диссертации, подписанный доцентом кафедры общей и физической химии Федерального государственного образовательного учреждения высшего образования «Ярославский государственный технический университет», кандидатом химических наук, доцентом **Лошадиным Денисом Владимировичем**. Отзыв положительный. К автореферату диссертационной работы имеется замечание:

- В ходе чтения автореферата существенных замечаний не возникло, однако из текста следует, что материалы, полученные путем сочетания ацетилхолина с полиэфирами (см. таблицу 9), могут обладать бактерицидным действием. Хорошо было бы проверить их бактерицидную активность.

2. Отзыв на автореферат диссертации, подписанный профессором института фундаментальной и прикладной химии Федерального государственного образовательного учреждения высшего образования «Ярославский государственный университет имени П.Г. Демидова» доктором химических наук, профессором **Казиним Вячеславом Николаевичем**. Отзыв положительный. В качестве замечаний отмечено следующее:

1). В постановке задач и в первом выводе отмечено: «Проведена оценка влияния природы четвертичных аммониевых соединений (ЧАС), гидропероксидов (ROOH), среды и добавок холестерина на скорость генерации радикалов», однако в автореферате не представлены данные по влиянию холестерина на скорость генерации радикалов в системах

ацетилхолин хлорид–гидропероксид (ACh-ROOH) и цетилтриметиламмоний бромид–гидропероксид (ЦТАБ-ROOH).

2). В автореферате указано большое количество конференции разного уровня, на которых выступала Захватова Н.В., но не представлены тезисы и печатные работы в сборниках научных трудов конференций, которые обычно приводятся в авторефератах.

3. Отзыв на автореферат диссертации, подписанный главным научным сотрудником Центра магнитной спектроскопии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института биохимической физики им. Н.М. Эмануэля, доктором физико-математических наук **Мотякиным Михаилом Викторовичем**. Отзыв положительный. Замечаний нет.

4. Отзыв на автореферат диссертации, подписанный ведущим научным сотрудником лаборатории комплексных катализаторов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии, доктором химических наук **Варламовым Владимиром Трофимовичем**. Отзыв положительный. В качестве замечаний отмечено следующее:

1). Производные холина сильно гигроскопичны, растворители (хлорбензол, хлороформ и даже декан) без спецочистки также содержат воду. Это создает условия для мицеллообразования при взаимодействии холинов (и подобных им катионных ПАВ) с примесями воды в растворе, тем более, что ККМ у холинов (см. автореферат) всего $\sim 1 \cdot 10^{-3}$ моль/л. В автореферате не указаны меры по осушке реактивов и растворителей, возникают вопросы о природе микроагрегатов на рис. 3 и 7.

2). В конце автореферата, в пункте 1 «Выводов», сказано о том, что проведена оценка влияния добавок холестерина на скорость генерации

радикалов. Однако в тексте автореферата какие-либо сведения об изучении такого влияния холестерина отсутствуют.

5. Отзыв на автореферат диссертации, подписанный старшим научным сотрудником лаборатории ветеринарной санитарии и экологической безопасности в пчеловодстве Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный научный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной ветеринарии имени К.И. Скрябина и Я.Р. Коваленко Российской академии наук», кандидатом ветеринарных наук Грузновым Дмитрием Вячеславовичем. В качестве замечания отмечено следующее:

- Требуется изучение антимикробных свойств полимерных форм ACh в условиях *in vitro* и *in vivo*.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что:

1. Официальный оппонент д.х.н., проф. **Анисимов Александр Владимирович** — высококвалифицированный специалист в области нефтехимии и органической химии. В сферу его научных интересов входят исследования в области проблем рационального использования углеродсодержащих ресурсов, получению новых типов катализаторов для безводородного обессеривания углеводородного сырья и работы по исследованию органических пероксидов в окислительных процессах обессеривания бензиновых фракций. Анисимов А.В. является экспертом, который может по существу оценить диссертационную работу Захватовой Н.В.

2. Официальный оппонент д.х.н. **Психа Борис Львович** является одним из крупнейших специалистов в области химической кинетики и математического моделирования сложных реакций, автор более двух сотен научных трудов. Им проводились исследования кинетики и механизмов окислительного гемолиза эритроцитов под действием азо- и перекисных

инициаторов. Высокая научная квалификация Психи Б.Л. позволяет ему всесторонне оценить представленную диссертационную работу.

3. Ведущая организация **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук (ИОХ РАН)** — один из ведущих научных центров в области органической и биоорганической химии, а также катализа. Основными предметами исследований ИОХ РАН являются: природа химической связи, реакционная способность органических и элементоорганических соединений, интермедиаты химических реакций, биологически активные и природные соединения. Сотрудниками ИОХ РАН опубликован ряд важных работ по кинетике химических реакций в процессах окисления углеводов и проведены фундаментальные теоретические и экспериментальные исследования по синтезу новых пероксидов. Высокая научная квалификация сотрудников ИОХ РАН позволяет дать экспертную оценку представленной диссертационной работе.

Диссертационный совет отмечает, что в рассматриваемой работе диссертантом впервые показана способность эндогенных холина и ацетилхолина при иммобилизации на твердой поверхности (порошки целлюлозы и монтмориillonита, кремниевые пластинки) катализировать гомолитический распад гидропероксидов на радикалы в органических средах в процессах полимеризации в объеме и с поверхности. Установлены кинетические характеристики радикально-цепных процессов полимеризации стирола и метилметакрилата. Генерация радикалов при взаимодействии четвертичными аммониевыми соединениями с гидропероксидами и последующие радикальные реакции являются одним из механизмов бактерицидного действия четвертичных аммониевых соединений. Впервые показано, что ацетилхолин взаимодействует с биосовместимыми полимерами в хлороформном растворе. Индивидуальные биополимеры и ацетилхолин ускоряют радикальный распад гидропероксидов, а в смеси полимеров с ацетилхолином наблюдается синергизм в генерации радикалов.

Теоретическая значимость исследования состоит в исследовании кинетических характеристик процессов полимеризации в объеме и с поверхности, инициированных системами «производное холина–гидропероксид». Установлена ключевая роль смешанных мицеллярных наноагрегатов состава «четвертичные аммониевые соединения–гидропероксид» в генерации радикалов при распаде гидропероксидов. Полученные данные по системам «четвертичные аммониевые соединения–гидропероксид», сформированным по типу обращенных мицелл, имеют фундаментальное значение для науки и расширяют область знаний об обращенных коллоидных системах.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики связано с созданием и использованием эндогенных нетоксичных холина и/или ацетилхолина в сочетании с гидропероксидами в качестве инициаторов радикалов в процессах окисления и полимеризации. Взаимодействие ацетилхолина с биосовместимыми полимерами открывает перспективы для создания биополимерных волокнистых материалов, включающих ацетилхолин, с новыми свойствами, которые могут использоваться в биомедицине. Полученные данные по генерации радикалов при взаимодействии четвертичных аммониевых соединений с алкилгидропероксидами и последующие радикальные реакции в условиях окислительного стресса и стимулирующие окислительный стресс показывают один из возможных механизмов бактерицидного действия четвертичных аммониевых соединений. Результаты диссертации имеют значение для практического использования в области ферментативного катализа, кинетики радикальных реакций.

Оценка достоверности результатов исследования выявила обоснованность выводов работы, которые обеспечиваются использованием широко апробированных методов и подтверждаются воспроизводимостью полученных результатов при неизменных условиях экспериментов, критическим анализом полученных результатов, а также широкой

апробацией материалов диссертации на научных конференциях. Ключевые результаты работы опубликованы в ведущих отечественных и зарубежных рецензируемых журналах, что также подтверждает высокий уровень проведенного исследования.

Личный вклад соискателя состоит в личном участии на всех этапах исследования, описанного в диссертации. Постановка целей и задач исследований осуществлялась непосредственно автором при участии научного руководителя. Экспериментальные исследования, в том числе отладка оборудования, анализ состава реагентов и продуктов проводились лично автором.

В ходе защиты диссертации были высказаны следующие критические замечания:

1. Как влияет качество растворителя на скорости генерации радикалов в системе ЧАС-ROОН.

2. Почему электрическое поле стимулирует гомолитический распад.

Соискатель Захватава Н.В. ответила на задаваемые ей вопросы и привела собственную аргументацию:

1. В самом хорошем растворителе (в воде) производные АСh не взаимодействуют с ROОН. Т.е. эффект не наблюдается. В хлороформе растворимость производных АСh выше, чем хлорбензоле и декане. Скорости генерации радикалов в разы ниже.

2. Поскольку мы имели дело с катионными ПАВ и ЧАС, то в органических средах ЧАС-ROОН устроены так, что гидрофобная часть ЧАС и ROОН обращены в сторону растворителя. В двойном электрическом слое диполь ROОН растягивается и облегчает гомолитический распад.

Диссертационный совет пришел к выводу о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, которая соответствует требованиям пункта 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской

22 октября 2025 года