

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

Ивановский государственный химико-технологический университет

Диссертационный совет Д 212.063.06

**Сведения о результатах публичной защиты
диссертации Ксенофоновой К.В.**

01 февраля 2021 года в диссертационном совете Д 212.063.06 состоялась публичная защита диссертации **Ксенофоновой Ксении Витальевны** «Конъюгаты борфторидных комплексов дипиррометена с аминокислотами: получение и физико-химические свойства», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.04 – Физическая химия и 02.00.01 – Неорганическая химия.

Заседание диссертационного совета проводилось с участием членов диссертационного совета и официальных оппонентов в удаленном интерактивном режиме (согласно Постановлению Правительства Российской Федерации от 26 мая 2020 года № 751 «Об особенностях проведения заседаний советов по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук в период проведения мероприятий, направленных на предотвращение распространения новой коронавирусной инфекции на территории Российской Федерации» и Приказу Минобрнауки России № 734 от 22.06.2020 г. «Об особенностях порядка организации работы советов по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук»).

На заседании совета присутствовали:

В очной форме: Бутман М.Ф., Макаров С.В., Егорова Е.В., Косенко Н.Ф., Кудин Л.С., Никифорова Т.Е., Пуховская С.Г., Слизнев В.В., Усачева Т.Р., Шлыков С.А.

В удаленном интерактивном режиме:

Агафонов А.В., Бурмистров В.А., Гиричев Г.В., Гиричева Н.И., Гриневич В.И., Ломова Т.Н., Лыткин А.И., Майорова Л.А., Рыбкин В.В., Смирнов П.Р., Соломо-
ник В.Г., Шарнин В.А.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.063.06, СОЗДАННОГО
НА БАЗЕ ФГБОУ ВО «ИВАНОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ХИМИКО-
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ» МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 01.02.2021 № 2

О присуждении Ксенофонтовой Ксении Витальевне, гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Конъюгаты борфторидных комплексов дипиррометена с аминокислотами: получение и физико-химические свойства» по специальностям 02.00.04 – Физическая химия и 02.00.01 – Неорганическая химия

принята к защите 23.11.2020 (протокол заседания № 19) диссертационным советом Д 212.063.06, созданным на базе ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 153000, г. Иваново, пр. Шереметевский, д. 7, **№ 105/нк от 11.04.2012.**

Соискатель Ксенофонтова Ксения Витальевна, 1992 года рождения.

В 2019 году окончила аспирантуру по направлению подготовки 04.06.01 – Химические науки (профиль образовательной программы «Неорганическая химия») ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, работает ассистентом кафедры неорганической химии ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре неорганической химии ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор химических наук, доцент Румянцев Евгений Владимирович, Ивановский государственный химико-технологический университет, кафедра неорганической химии, профессор.

Официальные оппоненты:

Мамардашвили Галина Михайловна, доктор химических наук, старший научный сотрудник,

ФГБУН Институт химии растворов им. Г. А. Крестова РАН, лаборатория 2-2 «Новые материалы на основе макроциклических соединений», ведущий научный сотрудник;

Пахомов Алексей Александрович, кандидат химических наук,

ФГБУН Институт биоорганической химии им. академиков М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН, отдел иммунологии, лаборатория молекулярной тераностики, старший научный сотрудник

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН, г. Москва

в положительном отзыве, подписанном

Мартыновым Александром Германовичем, доктором химических наук, старшим научным сотрудником лаборатории новых физико-химических проблем,

указала, что диссертация Ксенофоновой К.В. является актуальным исследованием, в котором развиты подходы к получению конъюгатов BODIPY с аминокислотами, исследованы их фотофизические свойства и проведена интерпретация свойств конъюгатов с привлечением современных методов квантовохимического моделирования. Результаты работы имеют важное значение в создании функциональных флуоресцентных материалов для биовизуализации, молекулярной биологии и диагностики.

Соискатель имеет 37 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 16 работ, из них в профильных рецензируемых научных изданиях опубликовано 5 работ (статьи в 3 журналах из Перечня рецензируемых научных изданий объемом 1,81 печатных листа). Недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах в диссертации отсутствуют.

В опубликованных работах представлены результаты синтеза и исследования физико-химических свойств 13 новых конъюгатов борфторидных комплексов дипиррометена с аминокислотами, различающихся способом присоединения аминокислотного фрагмента к остову флуорофора. Вклад автора состоит в изучении источников литературы по теме диссертационного исследования,

планировании и проведении большинства экспериментальных и теоретических исследований, обработке, анализе и интерпретации всех полученных результатов, подготовке научных публикаций по выполненной работе.

1. Ksenofontova, K.V. Synthesis and study of spectral properties of amino acids – BODIPY conjugates / K.V. Ksenofontova, A.A. Ksenofontov, I.A. Khodov, E.V. Rummyantsev (Ксенофонтова, К.В. Синтез и исследование спектральных свойств конъюгатов аминокислоты – BODIPY / К.В. Ксенофонтова, А.А. Ксенофонтов, И.А. Ходов, Е.В. Румянцев) // *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Seriya Khimiya i Khimicheskaya Tekhnologiya* (Russian Journal of Chemistry and Chemical Technology). – 2020. – Vol. 63, N 5. – P. 4 – 11.
2. Ksenofontova, K.V. Novel BODIPY-conjugated amino acids: Synthesis and spectral properties / K.V. Ksenofontova, A.A. Ksenofontov, I.A. Khodov, E.V. Rummyantsev (Ксенофонтова, К. В. Новые BODIPY-конъюгированные аминокислоты: синтез и спектральные свойства / К.В. Ксенофонтова, А.А. Ксенофонтов, И.А. Ходов, Е.В. Румянцев) // *Journal of Molecular Liquids*. – 2019. – Vol. 283. – P. 695 – 703.
3. Лыткин, А.И. Термодинамика растворения кристаллического L-метионина в воде / А.И. Лыткин, В.В. Черников, О.Н. Крутова, К.В. Дамрина (Ксенофонтова), И.А. Скворцов // *Журнал физической химии*. – 2016. – Т. 90, № 5. – С. 717 – 720.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. От д-ра хим. наук, старшего научного сотрудника Баранникова Владимира Петровича, заведующего лабораторией 1-1 «Термодинамика растворов неэлектролитов и биологически активных веществ» ФГБУН Института химии растворов им. Г. А. Крестова РАН (г. Иваново). Отзыв положительный, в нем отмечена актуальность, научная новизна и достоверность результатов исследования и сделан вывод о том, что соискатель заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.04 – Физическая химия и 02.00.01 – Неорганическая химия.

Замечания: автореферат диссертации написан в слишком жестких рамках, ограничивающих число страниц. Как следствие, объем представленных результатов ограничен, некоторые рисунки оказались мелкими и трудными для просмотра.

2. От канд. хим. наук Енакиевой Юлии Юрьевны, старшего научного сотрудника лаборатории новых физико-химических проблем ФГБУН Института физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН (г. Москва). Отзыв положительный, в нем отмечено, что проведенные исследования вносят значительный вклад в развитие физической и координационной химии борфторидных комплексов дипиррометена и сделан вывод о том, что соискатель заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.04 – Физическая химия и 02.00.01 – Неорганическая химия.

Замечаний нет.

3. От канд. хим. наук Клименко Инны Валерьевны, старшего научного сотрудника лаборатории фундаментальных проблем электрофизики органических материалов и наноструктур ФГБУН Института биохимической физики им. Н. М. Эмануэля РАН (г. Москва). Отзыв положительный, в нем отмечено, что полученные теоретические и экспериментальные результаты значительно расширяют фундаментальные представления о возможностях синтеза, свойствах и дальнейшем применении конъюгатов типа аминокислота – BODIPY, что имеет большое значение для физической и координационной химии олигопирролов, и сделан вывод о том, что соискатель заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.04 – Физическая химия и 02.00.01 – Неорганическая химия.

Замечания: плохо читается масштаб и подписи к осям на рис. 2б, 3 и 4. На стр. 7, во 2 абзаце в описании стратегии проведения реакции конъюгации, вероятно, пропущены некоторые слова. Отсутствуют сведения о реализации результатов научной работы, а именно ссылки на патенты, акты внедрения с участием автора.

4. От д-ра хим. наук, профессора Никитиной Лилии Евгеньевны, заведующей кафедрой общей и органической химии ФГБОУ ВО «Казанский государственный медицинский университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации (г. Казань). Отзыв положительный, в нем отмечена актуальность и высокий уровень научной, теоретической и практической значимости работы и сделан вывод о том, что соискатель заслуживает

присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.04 – Физическая химия и 02.00.01 – Неорганическая химия.

Замечания: В автореферате в схеме 1 имеется опечатка при указании радикала цистеина – необходимо добавить в формулу метиленовую группу.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что д-р хим. наук Мамардашвили Г.М. является специалистом в области синтеза и исследования физико-химических свойств координационных соединений, канд. хим. наук Пахомов А.А. – специалистом в области синтеза и исследования физико-химических свойств органических люминофоров, а ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН (лаборатория новых физико-химических проблем) проводит исследования в области изучения координационных и супрамолекулярных соединений и имеет ученых (А.Г. Мартынов, Ю.Ю. Енакиева, С.Л. Селектор, К.П. Бирин, А.В. Шокуров), являющихся специалистами по теме защищаемой диссертации.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработаны рекомендации для направленного синтеза конъюгатов борфторидных комплексов дипиррометена с аминокислотами, различающихся способом присоединения аминокислотного фрагмента к остову флуорофора;

определены структурные и спектральные характеристики конъюгатов борфторидных комплексов дипиррометена с аминокислотами;

предложен базирующийся на результатах квантовохимического моделирования механизм тушения флуоресценции конъюгатов борфторидных комплексов дипиррометена с аминокислотами, обусловленный фотоиндуцированным переносом электрона (PeT).

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

применительно к проблематике диссертации результативно использован комплекс современных экспериментальных (спектроскопия ядерного магнитного резонанса, инфракрасная спектроскопия, масс-спектрометрия, электронная спектроскопия поглощения, дву- и трехмерная флуоресцентная спектроскопия) и квантовохимических методов с целью подтверждения структуры, чистоты и

исследования физико-химических свойств синтезированных конъюгатов борфторидных комплексов дипиррометена с аминокислотами;

изложены новые данные о структурных, энергетических и спектральных характеристиках конъюгатов борфторидных комплексов дипиррометена с аминокислотами;

изучены закономерности изменения спектральных свойств конъюгатов борфторидных комплексов дипиррометена с аминокислотами в зависимости от их строения.

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

разработан подход к направленному синтезу конъюгатов борфторидных комплексов дипиррометена с аминокислотами, различающихся способом присоединения аминокислотного фрагмента к остову флуорофора, который может быть легко перенесен на другие биологические объекты;

синтезировано 13 новых соединений;

представлены рекомендации по применению конъюгатов борфторидных комплексов дипиррометена с аминокислотами для целей детектирования, визуализации и мониторинга активности различных биологических молекул белковой природы в клетках, тканях и организмах *in vitro* и *in vivo*.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

экспериментальные результаты получены с использованием современных физико-химических методов анализа на сертифицированном научном оборудовании, а их достоверность подтверждена воспроизводимостью и взаимной согласованностью;

теоретические построения базируются на известных фактах, проверяемых данных, а также на результатах, полученных с использованием современных квантовохимических методов и программ;

установлена согласованность результатов и выводов, сделанных на основе сравнительного анализа экспериментальных, расчетных и литературных данных в тех случаях, когда такое сравнение является обоснованным.

Достоверность результатов работы подтверждается их опубликованием в 5 статьях в журналах из Перечня рецензируемых научных изданий.

Личный вклад соискателя состоит в изучении источников литературы по теме диссертационного исследования, планировании и проведении большинства экспериментальных и теоретических исследований, обработке, анализе и интерпретации всех полученных результатов, подготовке научных публикаций по выполненной работе.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается наличием последовательного плана исследования, непротиворечивой методологической платформы, основной идейной линии, концептуальности и взаимосвязи выводов.

Диссертация Ксенофоновой К.В. является научно-квалификационной работой и соответствует критериям, установленным п.п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней» (утверждено постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук. В работе решена задача направленного синтеза новых конъюгатов борфторидных комплексов дипиррометена с аминокислотами и установлена связь их геометрического и электронного строения со спектральными свойствами, что имеет существенное значение для развития физической и координационной химии линейных олигопирролов.

Диссертационная работа соответствует паспортам специальностей 02.00.04 – Физическая химия (п. 1 «Экспериментальное определение и расчет параметров строения молекул и пространственной структуры веществ» и п. 10 «Связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями осуществления химической реакции») и 02.00.01 – Неорганическая химия (п. 2 «Дизайн и синтез новых неорганических соединений и особо чистых веществ с заданными свойствами», п. 5 «Взаимосвязь между составом, строением и свойствами неорганических соединений ...»).

На заседании 01 февраля 2021 года диссертационный совет принял решение присудить

Ксенофоновой К.В. ученую степень кандидата химических наук.

Согласно Постановлению Правительства Российской Федерации от 26 мая 2020 года № 751 «Об особенностях проведения заседаний советов по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой сте-

пени доктора наук в период проведения мероприятий, направленных на предотвращение распространения новой коронавирусной инфекции на территории Российской Федерации» и Приказу Минобрнауки Российской Федерации № 734 от 22.06.2020 г. «Об особенностях порядка организации работы советов по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук» при проведении заседания диссертационного совета с участием членов диссертационного совета и официальных оппонентов в удаленном интерактивном режиме диссертационный совет проводит открытое голосование членов совета по вопросу присуждения соискателю ученой степени.

При проведении открытого голосования диссертационный совет в количестве **22** человек, из них **14** докторов наук (в том числе **5** – отрасль наук «химические») по специальности 02.00.04 и **7** докторов химических наук по специальности 02.00.01 рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 30 человек, входящих в состав совета, проголосовал: за – **22**, против – нет, воздержавшихся нет.

Ученый секретарь совета по защите диссертаций
на соискание ученой степени кандидата наук,
на соискание ученой степени доктора наук
Д 212.063.06

Е.В. Егорова