

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.198.02,  
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
БЮДЖЕТНОГО НАУЧНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ УФИМСКОГО  
ФЕДЕРАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЦЕНТРА РОССИЙСКОЙ  
АКАДЕМИИ НАУК МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО  
ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ,  
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ  
КАНДИДАТА НАУК**

Аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 23 сентября 2020 г. № 36

О присуждении Юсуповой Альфии Равиловне, гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Внутримолекулярные превращения ароматических нитрозооксидов» в виде рукописи по специальности 02.00.04 – физическая химия принята к защите 17 апреля 2020 г. (протокол заседания № 28) диссертационным советом Д 002.198.02, созданным на базе Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (450054, г. Уфа, проспект Октября, 71; диссертационный совет создан в соответствии с приказом №370/нк от 20 декабря 2018 г.).

**Соискатель** – Юсупова Альфия Равиловна, 1990 года рождения, в 2014 году окончила Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Башкирский государственный университет». С 2014 г. по 2019 г. обучалась в очной аспирантуре Уфимского Института химии – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, где освоил программу подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки

по научной специальности 02.00.04 – Физическая химия (справка об обучении № 5/652.3 от 19.02.2020 г.).

С 2014 г. по настоящее время работает младшим научным сотрудником в лаборатории химической кинетики Уфимского Института химии – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена Федеральном государственном бюджетном научном учреждении Уфимском федеральном исследовательском центре Российской академии наук Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, в лаборатории химической кинетики Уфимского Института химии – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук.

**Научный руководитель** – доктор химических наук, профессор Хурсан Сергей Леонидович, заместитель директора по науке, заведующий лабораторией химической физики Уфимского Института химии – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук.

**Официальные оппоненты:**

**Касаикина Ольга Тарасовна** – доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник, исполняющая обязанности заведующей лабораторией жидкофазного окисления Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук;

**Зимин Юрий Степанович** – доктор химических наук, профессор, заместитель заведующего кафедрой физической химии и химической экологии химического факультета Федерального государственного бюджетного

образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет»

**дали положительные отзывы на диссертацию.**

Официальный оппонент д.х.н., проф. **Касаикина Ольга Тарасовна** в своем положительном отзыве приводит следующие замечания:

1. В литературном обзоре и в обсуждении результатов автор пользуется терминами «реакция расщепления нитрооксидов», «мономолекулярная реакция расщепления ..», тогда как расщепление нитрооксидов происходит в разных реакциях – распада, внутримолекулярной циклизации, в реакциях с другими компонентами, на скорость которых в разной степени могут влиять, как показано в диссертации, конформационные превращения *транс-цис* и *син-анти*.
2. На общем фоне четкого и логичного изложения полученных результатов кинетический анализ *транс-цис* конформационного превращения ароматических нитрооксидов (п.3.6), и последующего необратимого расщепления *цис*-изомера (С) в необратимых химических реакциях с образованием новых продуктов (Р) изложен фрагментарно. Для анализа, по сути, простой кинетической схемы  $T \leftrightarrow C \rightarrow P$  в диссертации «было адаптировано пятипараметровое биэкспоненциальное уравнение». Экспериментальные данные по кинетике расщепления *транс*- и *цис* изомеров излишне скупы (энергии активации) представлены в других разделах диссертации (Таблица 20 для *транс*-), а в Таблице 25 (для *цис*-изомеров  $E$  в скобках не указаны, а приведены только  $\Delta H^\ddagger$ ).
3. В списке литературы многие ссылки на статьи в отечественных журналах приведены в англоязычных версиях.

Касаикина Ольга Тарасовна отмечает, что принципиальных замечаний по работе нет.

Официальный оппонент д.х.н., проф. **Зимин Юрий Степанович** в своем положительном отзыве приводит следующие замечания:

1. В Таблице Б. 1 Приложения Б (стр. 137) приведены данные о влиянии природы и положения заместителя в ароматическом кольце *цис*-изомера фенилнитрозооксида на энтальпию активации  $\Delta H^\ddagger$  и свободную энергию Гиббса активации  $\Delta G^\ddagger$  реакции *орто*-циклизации. В результате у автора появилась возможность рассчитать и проанализировать изменение энтропии активации  $\Delta S^\ddagger$  в ряду рассмотренных заместителей. К сожалению, этого не сделано.

2. На стр. 97-98 диссертации автор, анализируя результаты TD-DFT моделирования электронных спектров *транс*-изомеров **2a** нитрозооксидов, отмечает: «TD-DFT расчеты для **2a-1** (*транс/анти*) и **2a-2** (*транс/син*) завышают энергию электронного перехода и, соответственно, занижают расчетную величину  $\lambda_{\max}$ ». При этом занижение  $\lambda_{\max}$ , по данным табл. 27, составило 57-66 нм для функционала плотности mPWPW91 и 103-104 нм – для функционала плотности M06-L. Автор далее пишет: «Причина наблюдаемого отклонения на настоящий момент неясна, отметим только, что использование других функционалов плотности и усложнение базисного набора, явный учет эффекта сольватации методом супермолекулы не улучшают ситуацию значимым образом». Может быть у автора есть предположения по поводу таких значительных занижений расчетных величин  $\lambda_{\max}$  для функционалов плотности, широко используемых в рецензируемой работе.

3. В табл. 28 диссертации и табл. 7 автореферата следовало бы указать температуру, при которой были получены количественные данные. Дело в том, что для нитрозооксида **2b** автор сравнивает выходы продуктов трансформаций, отмечая хорошее соответствие расчета с экспериментом (стр. 103, ссылка на Приложение Е). При этом в Приложении Е выходы продуктов трансформаций нитрозооксида **2b** в условиях импульсного фотолиза азида **1b** в ацетонитриле приведены при пяти различных температурах.

4. В рецензируемой работе использован достаточно большой набор количественных параметров (тепловых эффектов  $\Delta H^0$ , энтальпий активации  $\Delta H^\ddagger$  и свободных энергий Гиббса активации  $\Delta G^\ddagger$  конформационных переходов,

геометрических параметров и частот валентных колебаний разных соединений, времен релаксации  $\tau$  конформационных переходов и времен жизни  $t$  различных изомеров и т. д.), который позволил автору проанализировать полученные результаты и сформулировать основные выводы работы. В то же время погрешности большинства определяемых параметров не приведены.

5. В тексте диссертации встречаются отдельные недочеты. Так, у ссылки 116 отсутствует название публикации. Опечатки и неточности обнаружены на стр. 45, 75 (табл. 23), 105 диссертации.

Зимин Юрий Степанович отмечает, что указанные замечания не носят принципиального характера и не ставят под сомнение полученные результаты и выводы диссертации.

В отзывах официальных оппонентов дано заключение, что диссертационная работа Юсуповой Альфии Равилевны актуальна, логически завершена, выполнена на современном теоретическом уровне. Объем и научный уровень выполненной соискателем работы позволяют охарактеризовать автора как высоко квалифицированного специалиста в области физической и квантовой химии. Диссертация Юсуповой Альфии Равилевны «Внутримолекулярные превращения ароматических нитрозооксидов», представляет собой научно-квалификационную работу, в которой решена научная задача по установлению механизмов внутримолекулярных трансформаций ароматических нитрозооксидов и влияния конформационных превращений на реакционную способность  $ArNOO$  в реакциях ортоциклизации, что существенным образом расширяет базу существующих представлений о свойствах 1,3-диполярных пероксидных соединений. По своей актуальности, новизне, тщательности исполнения и полезности полученных результатов диссертационная работа в полной мере соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, и соответствует критериям, изложенным в пп. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. №842, а соискатель рецензируемой работы Юсупова Альфия Равилевна заслуживает

присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

**Ведущая организация** – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южный федеральный университет» (г. Ростов-на-Дону) в своем положительном отзыве, подписанном Миняевым Русланом Михайловичем, доктором химических наук, профессором, заведующим лабораторией квантовой химии, заведующим лабораторией теоретического моделирования полифункциональных материалов Научно-исследовательского института Физической и органической химии Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования Южного федерального университета и утвержденном проректором по научной и исследовательской деятельности Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южный федеральный университет» доктором химических наук, старшим научным сотрудником Метелицей Анатолием Викторовичем, указала, что диссертационная работа Юсуповой А.Р. является актуальной, логически завершенной научной работой, содержащей принципиально новые, важные для науки и практики результаты. Работа по праву может быть названа научно-квалификационной, в которой решены задачи по установлению механизмов мономолекулярных трансформаций  $ArNOO$ , а также взаимосвязи строения ароматических нитрозооксидов с их реакционной способностью в конформационных превращениях и реакциях *o*-циклизации с помощью современных методов расчета электронной структуры. Результаты работы исчерпывающим образом представлены в рецензируемых научных журналах.

В отзыве ведущей организации подробно проанализированы все аспекты работы и приведены следующие замечания:

1. Работа содержит недостаточное количество иллюстративного материала, большинство геометрических данных изученных структур представлено в виде таблиц. Имеющиеся же рисунки не содержат геометрические характеристики в

нужном для понимания объеме, а в некоторых случаях и вовсе не имеют смысла без геометрических параметров (например, Рисунок 47).

2. Не понятно, насколько широко автор использовал AIM-анализ, который упомянут в методической части. В тексте диссертации встречается только один результат по данному методу, без наглядной иллюстрации молекулярного графа.

3. При анализе систем с различными заместителями не были рассмотрены заряды на атомах. Анализ распределения зарядов в зависимости от заместителей помог бы лучше понять механизмы внутримолекулярных превращений ароматических нитрооксидов.

4. Присутствуют некоторые некорректные формулировки и ссылки. Например, термин "валентные картины" на стр. 58 следует заменить на "резонансные структуры", а ссылку 83 – на оригинальную. Указанная ссылка не имеет отношения к алгоритму Берни.

В заключении отмечается, что в целом замечания не носят принципиального характера, а диссертационная работа А.Р. Юсуповой выполнена на высоком научном уровне. Также в заключении организации приведены конкретные рекомендации по использованию результатов диссертационной работы. Представленная диссертационная работа А.Р. Юсуповой полностью соответствует требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям (п. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. N 842), а ее автор – Юсупова Альфия Равиловна заслуживает присуждения ей искомой степени кандидата химических наук по научной специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Настоящий отзыв обсужден и утвержден в он-лайн режиме по интернету на совместном семинаре лаборатории квантовой химии и лаборатории теоретического моделирования полифункциональных материалов НИИ Физической и органической химии Южного федерального университета

(протокол № 5 от 14 мая 2020 г, присутствовало 12 чел. категории научный персонал).

Соискатель имеет 14 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 14 работ, из них 5 статей в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК, из которых 4 статьи входят в международные базы научного цитирования Web of Science и Scopus. Материалы диссертационной работы представлены на восьми Всероссийских и Международных конференциях.

В публикациях полностью освещены все основные аспекты диссертационного исследования, представлены результаты анализа данных, полученных при проведении экспериментальных исследований. Все результаты, представленные на защиту, опубликованы в виде статей в рецензируемых научных журналах и тезисов докладов в сборниках научных конференций. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах.

#### **Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:**

1. **Yusupova, A.R.** Conformational transformations in aromatic nitroso oxides / **A.R. Yusupova**, R.L. Safiullin, S.L. Khursan // Journal of Physical Chemistry A. – 2016. – V. 120. – Iss. 28. – P. 5693-5705.
2. **Юсупова, А.Р.** Изучение строения, энергии и спектральных свойств арилнитрозооксидов методами теории функционала плотности / **А.Р. Юсупова**, Р.Л. Сафиуллин, С.Л. Хурсан // Бутлеровские сообщения. – 2016. – Т.47. – №8. – С.14-22.
3. Chainikova, E.M. Interplay of conformational and chemical transformations of *ortho*-substituted aromatic nitroso oxides: experimental and theoretical study / E.M. Chainikova, **A.R. Yusupova**, S.L. Khursan, A.N. Teregulova, A.N. Lobov, M.F. Abdullin, L.V. Enikeeva, I.M. Gubaydullin, R.L. Safiullin // Journal of Organic Chemistry. – 2017. – V. 82. – Iss. 15. – P. 7750-7763.

4. Chainikova, E. M. On the mechanism for the photooxidation of aromatic azides containing a secondary N–H bond: a sequence of intramolecular transformations with the formation of heterocyclic oximes study / E.M. Chainikova, S.L. Khursan, **A.R. Yusupova**, A.N. Lobov, M.F. Abdullin, R.L. Safiullin // Tetrahedron Letters. – 2018. – V. 59. – Iss. 34. – P. 3267-3271.
5. **Yusupova, A.R.** Structure-activity relationship in the case of intramolecular *ortho*-cyclization of aromatic nitroso oxides: Inverted steric effect of substituent in the 2-R-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>NOO transformation / **A.R. Yusupova**, E.M. Chainikova, R.L. Safiullin, S.L. Khursan // International Journal of Quantum Chemistry. – 2020. – V. 120. – Iss. 4. – e26094.

**На автореферат диссертации поступили отзывы:**

1. **Перкеля Александра Львовича**, д.х.н., проф., профессора кафедры технологии органических веществ и нефтехимии института химических и нефтегазовых технологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачёва», и **Ворониной Светланы Геннадьевны**, д.х.н., проф., профессора кафедры технологии органических веществ и нефтехимии института химических и нефтегазовых технологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачёва». Отзыв положительный, однако, в нем есть замечания:

– на рис. 1 и 6 неудачно изображены структуры ароматических нитрозооксидов с двухвалентным азотом. Поскольку в таких структурах отсутствует двойная связь, то не очевидно наличие геометрической изомерии.

– *Син*- и *анти*-изомерия это геометрическая изомерия, обусловленная C=N И N=N-связями. Недостаточно ясно, почему диссертант применяет также термины *цис*- и *транс*- изомерия, которые используют при наличии C=C-связей.

Перкель А.Л. и Воронина С.Г. отмечают, что замечания не являются принципиальными.

2. **Туровцева Владимира Владимировича**, д.ф.-м.н, доц., заведующего кафедрой физики, математики и медицинской информатики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный медицинский университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации. Отзыв положительный, однако, в нем есть замечания к оформлению автореферата:

- в работе проведен анализ распределения электронной плотности молекул, но в автореферате это не представлено;
- судя по Таблице 2, не имеет смысла приводить энтальпии с точностью до десятых кДж/моль;
- внутримолекулярные невалентные взаимодействия удобнее описывать в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» (в моделях DFT нет пи-систем и пи-орбиталей, это терминология метода валентных связей);
- не сказано, как были найдены свободные энергии Гиббса для соединений с несколькими движениями большой амплитуды;
- не описан термин «индукционный эффект», хотя в 4 выводе он указан.

Туровцев В.В. отмечает, что никаких существенных замечаний к работе нет.

3. **Кантора Евгения Абрамовича**, д.х.н., проф., профессора кафедры «Физика» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет». Отзыв положительный, однако, в нем есть замечания:

- С.9: «сводит величину  $\Delta H$  практически к нулю», «практически незаметный рост», «сильное падение  $\Delta H^\ddagger$ », «энтальпии активации различаются кардинально».
- В Табл.3: Тепловой эффект реакции  $\Delta H^\ddagger$  (опечатка в обозначении)
- Рис. 2, подпись: «Эффект заместителя на тепловой эффект реакции...»
- С.10: «Влияние растворителя сопровождается сближением энтальпии *цис-транс-форм...*».

– С.11: «Изучение конформационного потенциала...имеет **явный научный интерес...**», «**Логично, что такой же эффект...**», «**Диаметрально противоположная картина...**».

– С.21: «Нитрозооксиды претерпевают конформационный **поворот** в плоское состояние...» (возможно: переход?).

Кантор Е.А. отмечает, что замечания относятся в большей степени к некоторым неуместным выражениям.

В отзывах отмечается актуальность, научная новизна, обоснованность выводов, практическая значимость выполненной диссертационной работы, а также соответствие требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, изложенным в пп. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденном постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор, Юсупова Альфия Равиловна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

**Выбор официальных оппонентов** обосновывается тем, что доктор химических наук по специальности 02.00.15 – Химическая кинетика и катализ, профессор по специальности 02.00.04 – Физическая химия Касаикина Ольга Тарасовна, главный научный сотрудник, и.о. заведующей лабораторией жидкофазного окисления Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук является крупным специалистом в области физической химии, в частности химической кинетики окислительных процессов, о чем свидетельствуют ее научные труды;

Доктор химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия, профессор Зимин Юрий Степанович, заместитель заведующего кафедрой физической химии и химической экологии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет» является

высококвалифицированным специалистом в области жидкофазного радикально-цепного окисления, в том числе озоном.

**Выбор ведущей организации** обосновывается тем, что Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южный федеральный университет» (г. Ростов-на-Дону), а именно Научно-исследовательский институт Физической и органической химии Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южный федеральный университет» известен высококвалифицированными специалистами в области квантовой химии, методы которой являются основным инструментом исследования диссертационной работы.

Оппоненты имеют соответствующие публикации в журналах из Перечня ВАК и дали свое согласие на оппонирование. Ведущая организация и оппоненты не имеют совместных проектов и публикаций с соискателем.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

**показано, что** отобранные методы функционала плотности M06-L, mPWPW91, OLYP и HCTH корректно описывают строение, спектральные (ИК, УФ) и энергетические свойства как простейшего нитрозооксида – пероксинитрена, так и ароматических нитрозооксидов ArNOO;

**выявлено** незначительное изменение энтальпии активации *транс/цис* конформационных превращений для *пара*- и *орто*-замещенных ароматических нитрозооксидов с увеличением электроноакцепторных свойств заместителя, тогда как для *син/анти* превращений оно существенно. Показано, что для возможных типов конформационных переходов (вращение по связи N-O – *транс/цис*, C-N – *син/анти*) с ростом полярности растворителя энтальпия активации  $\Delta H^{\ddagger}_{\text{транс} \rightarrow \text{цис}}$  увеличивается, энтальпия активации  $\Delta H^{\ddagger}_{\text{син} \rightarrow \text{анти}}$  слабо зависит от полярности растворителя (исключение составляют ArNOO с сильными электронодонорными заместителями (R = -NMe<sub>2</sub>, -OMe));

**показано**, что различная стабильность изомеров и их конформационные превращения влияют на скорость необратимых реакций и определяют преимущественное направление гибели  $\text{ArNOO}$ ;

**показано** влияние заместителя R на величину активационного барьера внутримолекулярной *орто*-циклизации моно-замещенных арилнитрозооксидов  $\text{R-C}_6\text{H}_4\text{NOO}$ . При наличии заместителя в *орто*-положении ароматического кольца по отношению к NOO-группе наблюдается редкий случай «инвертированного» стерического эффекта, когда увеличение объема заместителя ускоряет протекание внутримолекулярной трансформации;

**показана** вероятность реализации нескольких направлений трансформации нитрилоксидов, образующихся в результате циклизации в *орто*-положение  $\text{ArNOO}$ , в зависимости от строения заместителя в исходном нитрозооксиде.

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что** полученные в работе результаты существенно расширили базу для научно-обоснованных представлений о химических и физико-химических свойствах (строении, спектральных свойств (ИК, УФ), энергетических свойств конформационных и необратимых превращений) 1,3-диполярных пероксидных соединений; разработаны приемы количественного учета скорости конформационных превращений (определение констант скоростей элементарных превращений – изомеризации и необратимых реакций, решение обратной кинетической задачи с целью определения эффективных констант скоростей расщепления изомеров) на экспериментально наблюдаемую константу скорости гибели  $\text{ArNOO}$ .

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики состоит в том, что** составлен обширный массив количественной информации о строении, спектральных свойствах и энергии ароматических нитрозооксидов; разработаны приемы количественного учета скорости конформационных превращений на экспериментально наблюдаемую константу скорости гибели  $\text{ArNOO}$ . Полученные данные существенно расширяют базу для

научно-обоснованных представлений о химических и физико-химических свойствах 1,3-диполярных пероксидных соединений.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила, что:**

теоретическая работа выполнена на высоком методическом уровне с использованием современных надежных методов квантово-химического моделирования;

достоверность и надежность результатов подтверждается хорошим соответствием между результатами, полученными в настоящей работе, и литературными экспериментальными данными о строении и свойствах пероксинитрена и ароматических нитрозооксидов;

основная идея работы базируется на анализе современной отечественной и зарубежной литературы по химическим и физико-химическим свойствам 1,3-диполярных пероксидных соединений;

использованы современные системы сбора и обработки информации: электронные базы данных Scopus (Elsevier), Web of Science (Thomson Reuters), SciFinder (Chemical Abstracts Service), а также полные тексты книг и статей в журналах.

**Личный вклад соискателя** заключается в изучении литературы по теме диссертации, выполнении квантово-химических расчетов свойств объектов, исследованных в диссертационной работе, анализе полученных данных и формулировании выводов, подготовке публикаций по теме диссертационной работы. При математическом моделировании роль автора состояла в DFT-расчете свободных энергий Гиббса всех компонентов, формировании начального набора констант скоростей элементарных превращений нитрозооксидов, а также в кинетическом анализе результатов решения обратной кинетической задачи.

На заседании 23 сентября 2020 г. диссертационный совет пришел к выводу, что совокупность защищаемых положений позволяет заключить, что диссертация Юсуповой Альфии Равиленовны «Внутримолекулярные превращения ароматических нитрозооксидов» имеет важное научное и

практическое значение для решения ряда фундаментальных проблем в области физической химии. Рассматриваемая диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, в которой решены задачи по установлению механизмов мономолекулярных трансформаций  $\text{ArNOO}$ , а также взаимосвязи строения ароматических нитрооксидов с их реакционной способностью в конформационных превращениях и реакциях *o*-циклизации с помощью современных методов расчета электронной структуры. Диссертационная работа полностью соответствует критериям, содержащимся в пунктах 9-11, 13-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, и отсутствует заимствованный материал без ссылок на авторов или источники заимствования.

На заседании 23 сентября 2020 г. (протокол № 36) диссертационный совет принял решение присудить Юсуповой Альфии Равилевне ученую степень кандидата химических наук по научной специальности 02.00.04 – Физическая химия (химические науки).

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 23 человек, из них 7 докторов наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия, участвовавших в заседании, из 28 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 23, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Заместитель председателя диссертационного совета

Д 002.198.02, д.х.н., доц.

/ Дьяконов Владимир Анатольевич

Исполняющий обязанности ученого секретаря диссертационного совета

Д 002.198.02, д.х.н., проф.

/ Валеев Фарид Абдуллоевич

23 сентября 2020 г.