

ОТЗЫВ

научного руководителя о докторантке Тухбатуллиной Алине Асхатовне, представившей докторскую работу «Строение и поляризуемость экзоэдральных производных фуллерена C₆₀» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия

Тухбатуллина Алина Асхатовна, 1988 года рождения, в 2011 г. окончила Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы и поступила в очную аспирантуру Института нефтехимии и катализа РАН. С 2018 г. по настоящее время работает младшим научным сотрудником лаборатории математической химии этого института.

Тухбатуллина А.А. является ответственным и грамотным сотрудником, способным самостоятельно и квалифицированно проводить теоретические исследования с использованием методов квантовой химии, обрабатывать полученные результаты, писать научные статьи, работать с научной литературой. Работая в области теоретической химии фуллеренов, Тухбатуллина А.А. показала высокий уровень математической подготовки, позволяющий осуществлять поиск аналитических зависимостей между квантохимически рассчитанными величинами и проводить вычисления, связанные со строением сложных полиздрических молекул. Важными чертами докторантки являются любознательность, которая позволила существенно расширить круг химических объектов, и высокая работоспособность – залог быстрого представления и обсуждения получаемых научных результатов. Докторантка в полной мере освоила методологию квантовой химии, навыки проведения квантохимических расчётов в современных программах и использования теории графов для структурного анализа соединений сложного строения. Отметим, что помимо исследований по теме докторской, Алина Асхатовна принимала участие в других научно-исследовательских проектах лаборатории математической химии ИНК УФИЦ РАН, связанных с химией нанокластеров металлов и эндоэдральными комплексами фуллеренов.

Докторская работа Тухбатуллиной А.А. посвящена квантохимическому исследованию одно- и многокаркасных экзоэдральных производных фуллерена C₆₀ и поиску корреляций между строением и поляризуемостью этих соединений. Для этой цели докторанткой были применены современные методы теории функционала плотности и подходы (метод аддитивных схем, вычисления в приближении конечного поля, сайт-специфический анализ молекулярных свойств и др.). Полученные знания

позволили Алине Асхатовне успешно реализовать свой научный потенциал и решить поставленные в диссертационном исследовании задачи.

Результаты, полученные Тухбатуллиной А.А., являются частью научно-исследовательской работы в рамках государственного задания по тематике лаборатории математической химии, а также проектов, поддержанных РФФИ и программами Президиума РАН.

По результатам диссертационного исследования Тухбатуллиной А.А. опубликовано 10 работ, из них 6 статей – в периодических изданиях, рекомендованных ВАК и индексируемых в базах данных Scopus, Web of Science (в том числе в ключевом журнале по физической химии фуллеренов – Fullerenes, Nanotubes, and Carbon Nanostructures), и тезисы 4 докладов в сборниках трудов конференций.

Считаю, что диссертационная работа Тухбатуллиной А.А. отличается актуальностью, научной новизной и представляет собой законченное научно-квалификационное исследование, которое соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия».

Научный руководитель:

доктор химических наук (02.00.04 – Физическая химия),

доцент (02.00.04 – Физическая химия),

главный научный сотрудник и заведующий

лабораторией математической химии

Института нефтехимии и катализа –

обособленного структурного подразделения

Федерального государственного бюджетного

научного учреждения Уфимского

федерального исследовательского центра

Российской академии наук



Сабиров Денис Шамилевич

450075, г. Уфа, проспект Октября, 141.

Тел.: +7 (347)284-27-50

E-mail: diozno@mail.ru

«27» 08 2020 г.



ПОДПИСЬ *Сабирова А.Ш.*
ЗАВЕРЯЮ

УЧЕБНЫЙ СЕКРЕТАРЬ ИНКУФИЦРАН
Д.С. КАРАМЗИНА