

Председателю диссертационного совета
Д 002.198.02 при УФИЦ РАН
д.х.н., проф. Хурсану С.Л.

**Заключение экспертной комиссии диссертационного совета Д.002.198.02
по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание
ученой степени доктора наук на базе Федерального государственного бюджетного
научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра
Российской академии наук**

от 19 марта 2021 года по ознакомлению с диссертационной работой
Тухбатуллиной Алины Асхатовны, представленной на соискание
ученой степени кандидата химических наук по специальности
02.00.04 – Физическая химия

Председатель комиссии – д.х.н., проф. Халилов Леонард Мухибович

Члены комиссии:

д.х.н., проф. Муринов Юрий Ильич

д.х.н., проф. Колосницын Владимир Сергеевич

Комиссия диссертационного совета Д 002.198.02, ознакомившись с диссертационной работой младшего научного сотрудника лаборатории математической химии Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук Тухбатуллиной Алины Асхатовны на тему «Строение и поляризуемость экзоэдральных производных фуллерена C_{60} » на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия, пришла к следующему заключению:

1. Актуальность темы

Экзоэдральные производные фуллерена C_{60} – широкий класс соединений, структурной особенностью которых является наличие в молекуле одного или нескольких фуллереновых каркасов. Наличие богатых полисопряженных систем π -электронов в молекулах этих соединений обуславливает их сильное взаимодействие с внешними электрическими полями, которое определяется средней поляризуемостью молекул – величиной, характеризующей способность молекулы приобретать индуцированный дипольный момент во внешнем электрическом поле.

Работы, посвященные измерению средней поляризуемости проводных фуллеренов, немногочисленны в силу ряда причин (как правило, экзоэдральные производные разлагаются в условиях экспериментов по измерению поляризуемости; существующие методы синтеза часто не позволяют получать их в граммовых количествах, достаточных для экспериментального определения поляризуемости). Эти факторы вносят существенный вклад в отсутствие экспериментальных данных о связи между строением производных фуллеренов (природой, числом и взаимным расположением присоединенных групп) и их поляризуемостью. Поэтому в целях решения проблемы исследования поляризуемости соединений фуллерена представляется перспективным применение квантовохимических методов.

В связи с этим тема диссертационной работы, которая посвящена поиску корреляций между строением и средней поляризуемостью экзоэдральных производных C_{60} , является актуальной и лежит в русле современных исследований в области физической химии фуллеренов.

2. Личное участие соискателя в получении результатов, изложенных в диссертации

Личный вклад Тухбатуллиной А.А. состоит в сборе и анализе научной литературы по теме диссертации, планировании и непосредственном выполнении квантовохимических исследований, последующей интерпретации полученных расчетных данных, апробировании полученных данных на научных конференциях и подготовке научных публикаций. Вывод аналитической зависимости $\alpha(C_{60}X_n) = f(n)$ осуществлен совместно с руководителем диссертационной работы д.х.н. Д.Ш. Сабиловым.

3. Достоверность результатов проведенных исследований

Достоверность представленных результатов обусловлена применением современных квантовохимических методов исследования. Используемый в работе метод теории функционала плотности ранее успешно применялся для описания структуры и свойств ряда экзоэдральных и эндоэдральных производных фуллеренов.

4. Научная новизна и практическая значимость

На основании квантовохимических расчетов и вычисления поляризуемости по аддитивной схеме установлено наличие депрессии поляризуемости (отрицательного отклонения значений поляризуемости рассчитанных квантовохимически от значений, полученных по аддитивной схеме) для экзоэдральных соединений фуллерена вида $C_{60}X_n$,

$X = \text{CH}_2, \text{NH}; n = 1 - 30$. Установлено, что взаимное расположение аддендов не влияет на среднюю поляризуемость изомерных C_{60}X_n .

С использованием рассчитанных методом теории функционала плотности PBE/3 ζ значений средней поляризуемости [2+1]-аддуктов фуллерена C_{60} и аддитивной схемы получено аналитическое выражение зависимости средней поляризуемости фуллереновых аддуктов C_{60}X_n от числа аддендов n .

Теоретически исследована поляризуемость димеров и олигомеров фуллерена C_{60} . Анализ поляризуемости экзоэдральных производных C_{60} с фуллереновыми аддендами с использованием аддитивных схем показал наличие экзальтации поляризуемости – положительного отклонения значений поляризуемости рассчитанных квантовохимически от значений, полученных по аддитивным схемам.

Исследовано влияние изомерии на среднюю поляризуемость многокаркасных соединений. На примере гипотетических изомерных структур $(\text{C}_{60})_6$ продемонстрировано изменение α в зависимости от строения изомеров. Обнаружена корреляция между средней поляризуемостью и максимальным расстоянием между каркасами C_{60} в молекулах $(\text{C}_{60})_6$.

5. Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных соискателем

Результаты диссертационного исследования полностью отражены в 10 публикациях, в том числе 6 статьях в журналах, рекомендованных ВАК РФ и включенных в базы данных Web of Science и Scopus. Требования к публикации основных научных результатов диссертации, предусмотренные пунктами 11 и 13 Положения о присуждении ученых степеней, выполнены. Наиболее значимыми являются следующие работы:

1. **Tukhbatullina, A.A.** Distributed polarizability of fullerene [2+1]-adducts C_{60}X_n ($n = 1$ and 2) with symmetric addends $X = \text{CH}_2$ and O: A fresh view on the effect of positional isomerism / **A.A. Tukhbatullina**, E.M. Khamitov, D.Sh. Sabirov // Computational and Theoretical Chemistry. – 2019. – V. 1149. – P. 31-36.
2. **Tukhbatullina, A.A.** Exaltation of polarizability as a common property of fullerene dimers with diverse intercage bridges / **A.A. Tukhbatullina**, I.S. Shepelevich, D.Sh. Sabirov // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures – 2018. – V. 26. – P. 661-666.
3. Pankratyev, E.Yu. Dipole polarizability, structure, and stability of [2+2]-linked fullerene nanostructures $(\text{C}_{60})_n$ ($n \leq 7$) / E.Yu. Pankratyev, **A.A. Tukhbatullina**, D.Sh. Sabirov // Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures – 2017. – V. 86. – P. 237-242.
4. **Tukhbatullina, A.A.** Positional isomerism, stability, and polarizability of $\text{C}_{20}(\text{CH}_2)_n$ ($n = 1 - 10$), the cyclopropane adducts of the smallest fullerene. General formula for calculation of

mean polarizability of fullerene derivatives $C_{20}X_nY_m$ and $C_{60}X_nY_m$ with fixed $(n + m)$ number of different addends / **A.A. Tukhbatullina**, I.S. Shepelevich, D.Sh. Sabirov // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. – 2017. – V. 25. – P. 71-78.

5. Sabirov, D.Sh. Dependence of static polarizabilities of $C_{60}X_n$ fullerene cycloadducts on the number of added groups $X = CH_2$ and NH ($n = 1-30$) / D.Sh Sabirov, **A.A. Tukhbatullina**, R.G. Bulgakov // Computational and Theoretical Chemistry. – 2012. – V. 989. – P. 18-22.

6. Специальность, которой соответствует диссертация

Диссертация соответствует отрасли науки «Химические науки» и паспорту научной специальности 02.00.04 – Физическая химия, а именно пунктам:

- 1 – Экспериментальное определение и расчет параметров строения молекул и пространственной структуры веществ;
- 5 – Изучение физико-химических свойств систем при воздействии внешних полей, а также в экстремальных условиях высоких температур и давлений.

7. Ценность научных работ соискателя

Обнаруженные Тухбатуллиной А.А. корреляции расширяют представления о влиянии функционализации фуллеренового каркаса на физико-химические свойства экзоэдральных производных фуллеренов и могут быть использованы для конструирования соединений с заранее известной поляризуемостью и зависимыми от неё физико-химическими параметрами.

8. Научная зрелость соискателя

Тухбатуллина Алина Асхатовна в ходе выполнения диссертационной работы проявила себя высококвалифицированным специалистом, способным самостоятельно ставить задачи исследования и эффективно их решать. Исполнительность, широкий кругозор и упорство в достижении целей позволили ей выполнить большую, содержательную и сложную в методическом плане диссертационную работу. Тухбатуллина А.А. является зрелым, компетентным специалистом, владеющим необходимыми навыками практической и научной деятельности, по своей квалификации заслуживающим степени кандидата химических наук.

9. Проверка диссертации на наличие заимствованного материала без ссылки на авторов

В тексте диссертации соискатель ссылается на авторов и источники заимствования материалов и отдельных результатов, также отмечает полученные лично и (или) в соавторстве результаты, что говорит о соблюдении требований, установленных **пунктом**

14 Положения о присуждении ученых степеней. Итоговая оценка оригинальности по системе проверки использования заимствованного материала без ссылки на автора составила 85.62 % (заключение экспертной комиссии и автоматический отчет прилагаются).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспертная комиссия единогласно решила, что диссертация Тухбатуллиной Алины Асхатовны «Строение и поляризуемость экзоэдральных производных фуллерена C_{60} », представленная на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия, представляет собой научно-квалификационную работу, которая полностью соответствует критериям п. 9-14 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, отсутствует заимствованный материал без ссылок на авторов или источники заимствования. Текст диссертации, представленной в диссертационный совет Д 002.198.02, идентичен тексту диссертации, размещенному на сайте организации (www.ufaras.ru). Диссертация Тухбатуллиной Алины Асхатовны «Строение и поляризуемость экзоэдральных производных фуллерена C_{60} » может быть принята диссертационным советом Д 002.198.02 к защите по научной специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Рекомендовать официальными оппонентами следующих специалистов:

Кузнецова Валерия Владимировича – доктора химических наук, профессора кафедры физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский государственный авиационный технический университет» (ФГБОУ ВО «УГАТУ»); 450008, Российская Федерация, Республика Башкортостан, г. Уфа, ул. К. Маркса, 12; тел.: +7 (347) 273-79-65; e-mail организации: office@ugatu.su; e-mail: kuzmaggy@mail.ru; сайт: <http://ugatu.su>; ректор ФГБОУ ВО «УГАТУ»: к.э.н., доц. Новиков Сергей Владимирович.

Хаматгалимова Айрата Раисовича – доктора химических наук, заместителя руководителя по научной работе Института органической и физической химии им. А. Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр РАН» (ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН); 450088, Российская

Федерация, Республика Татарстан, г. Казань, ул. Арбузова, 8; тел.: +7 (843) 273-22-53; сайт: <http://www.ioprc.ru>; e-mail организации: arbuzov@ioprc.ru; e-mail ayrat_kh@ioprc.ru; руководитель института: д.х.н., проф. Карасик Андрей Анатольевич.

Рекомендовать ведущую организацию:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М.Акмуллы» (ФГБОУ ВО «БГПУ им. М.Акмуллы»); 450008, Республика Башкортостан, г.Уфа, ул. Октябрьской революции, 3-а; тел +7 (347) 287-99-91; e-mail организации: office@bspu.ru; сайт: <http://bspu.ru>; ректор ФГБОУ ВО «БГПУ им. М.Акмуллы»: к. социол. н., доц. Сагитов Салават Талгатович.

Председатель экспертной комиссии:

д.х.н., проф. Халилов Л.М.

Члены комиссии:

д.х.н., проф. Муринов Ю.И.

д.х.н., проф. Колосницын В.С.



19 марта 2021 г.

Заключение

о допустимости выявленного объема текстовых совпадений между текстом диссертации и источниками, авторство которых установлено, для рассмотрения рукописи диссертации как оригинальной научной (квалификационной) работы

по диссертации Тухбатуллиной Алины Асхатовны, выполненной на тему: «Строение и поляризуемость экзоэдральных производных фуллерена C_{60} » представленной на соискание ученой степени кандидата наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Экспертная комиссия в составе д.х.н., проф. Халилова Л. М., д.х.н., проф. Колосницына В. С., д.х.н., проф. Муринова Ю. И. рассмотрела представленный для проведения экспертизы комплект документов в составе:

1. Полный текст диссертации в электронном виде.
2. Распечатка текста диссертации.
3. Автоматический отчет системы «Антиплагиат» о выявленных текстовых совпадениях с указанием ссылок на источники совпадающих фрагментов.

Отчет о выявленных текстовых совпадениях и о количественно оцененной степени близости каждого выявленного совпадения, проведенной в системе Антиплагиат (www.antiplagiat.ru) выявил 14.18 % текстовых совпадений. Содержательная экспертиза текстовых совпадений с учетом ссылок на источники совпадающих фрагментов, детальной информации о совпадающих фрагментах показала, что выявленные совпадения представляют собой цитаты собственных материалов и корректное цитирование источников, с указанием ссылок на них.

Таким образом, на основании анализа информации о совпадающих фрагментах, их источниках и количества оцененной степени близости каждого выявленного совпадения комиссия постановила, что выявленный объем текстовых совпадений 14.18 % допустим для рассмотрения рукописи диссертации как оригинальной научной работы. Диссертация Тухбатуллиной Алины Асхатовны, выполненная на тему: «Строение и поляризуемость экзоэдральных производных фуллерена C_{60} », представленная на соискание ученой степени кандидата наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия, может считаться полностью оригинальной работой.

Приложение: Автоматический ответ о проверке на плагиат диссертации Тухбатуллиной Алины Асхатовны «Строение и поляризуемость экзоэдральных производных фуллерена

С₆₀» представленной на соискание ученой степени кандидата наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия (система антиплагиат www.antiplagiat.ru).

Пояснения к автоматическому отчету:

1. Источники № 2, 3, 4, 5, 9, 14, 16, 17, 18, 20, 21 — содержат общепринятые аббревиатуры и расшифровки, часто употребляемые фразы и словосочетания, не являющиеся предметом авторской работы.
2. Источники № 1, 2, 3, 6, 7, 8, 10, 11, 12, 13, 19, 21 — являются ссылками на научную литературу по данной тематике, оформленными по ГОСТ.

Председатель экспертной комиссии:

д.х.н., проф. Халилов Л.М.

Члены комиссии:

д.х.н., проф. Муринов Ю.И.

д.х.н., проф. Колосницын В.С.



Председатель диссертационного совета Д 002.198.02

д.х.н., проф. Хурсан С.Л.



Ученый секретарь диссертационного совета Д 002.198.02

к.х.н. Цыпышева И.П.



19 марта 2021 г.

Отчет о проверке на заимствования №1



Автор: dissovetioh@anrb.ru / ID: 6855117

Проверяющий: (dissovetioh@anrb.ru / ID: 6855117)

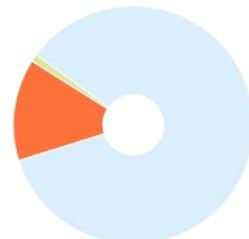
Отчет предоставлен сервисом «Антиплагиат» - <http://users.antiplagiat.ru>

ИНФОРМАЦИЯ О ДОКУМЕНТЕ

№ документа: 20
 Начало загрузки: 17.03.2021 12:48:09
 Длительность загрузки: 00:00:40
 Имя исходного файла:
 2021_2_TukhbatullinaAA_disser.pdf
 Название документа:
 2021_2_TukhbatullinaAA_disser
 Размер текста: 1 кБ
 Символов в тексте: 181085
 Слов в тексте: 21199
 Число предложений: 2516

ИНФОРМАЦИЯ ОБ ОТЧЕТЕ

Последний готовый отчет (ред.)
 Начало проверки: 17.03.2021 12:48:49
 Длительность проверки: 00:00:07
 Комментарии: не указано
 Поиск перефразирований: да
 Модули поиска: Цитирование, Интернет



ЗАИМСТВОВАНИЯ

14,18%

САМОЦИТИРОВАНИЯ

0%

ЦИТИРОВАНИЯ

0,2%

ОРИГИНАЛЬНОСТЬ

85,62%

Заимствования — доля всех найденных текстовых пересечений, за исключением тех, которые система отнесла к цитированиям, по отношению к общему объему документа.
 Самоцитирования — доля фрагментов текста проверяемого документа, совпадающий или почти совпадающий с фрагментом текста источника, автором или соавтором которого является автор проверяемого документа, по отношению к общему объему документа.
 Цитирования — доля текстовых пересечений, которые не являются авторскими, но система посчитала их использование корректным, по отношению к общему объему документа. Сюда относятся оформленные по ГОСТу цитаты; общеупотребительные выражения; фрагменты текста, найденные в источниках из коллекций нормативно-правовой документации.
 Текстовое пересечение — фрагмент текста проверяемого документа, совпадающий или почти совпадающий с фрагментом текста источника.
 Источник — документ, проиндексированный в системе и содержащийся в модуле поиска, по которому проводится проверка.
 Оригинальность — доля фрагментов текста проверяемого документа, не обнаруженных ни в одном источнике, по которым шла проверка, по отношению к общему объему документа.
 Заимствования, самоцитирования, цитирования и оригинальность являются отдельными показателями и в сумме дают 100%, что соответствует всему тексту проверяемого документа.
 Обращаем Ваше внимание, что система находит текстовые пересечения проверяемого документа с проиндексированными в системе текстовыми источниками. При этом система является вспомогательным инструментом, определение корректности и правомерности заимствований или цитирований, а также авторства текстовых фрагментов проверяемого документа остается в компетенции проверяющего.

| № | Доля в отчете | Источник | Ссылка | Актуален на | Модуль поиска |
|------|---------------|---|---|--------------|---------------|
| [01] | 0,22% | https://esu.citis.ru/dissertation/XKXXRFQ1CXKXKSGJ6OCCGJF | https://esu.citis.ru | 21 Мар 2018 | Интернет |
| [02] | 5,33% | Сабиров Д.Ш. диссертация | https://ipc-ras.ru | 15 Ноя 2017 | Интернет |
| [03] | 1,79% | Автореферат | https://istina.msu.ru | 20 Фев 2018 | Интернет |
| [04] | 1,6% | Механизм начальных стадий радикальной полимеризации метилметакрилата, с... | http://bashedu.ru | 17 Окт 2019 | Интернет |
| [05] | 0,65% | https://esu.citis.ru/dissertation/002LMUMLWOURUNAGY8JELHR | https://esu.citis.ru | 20 Мар 2018 | Интернет |
| [06] | 0,73% | Текст диссертации | http://ipac.ac.ru | 11 Дек 2016 | Интернет |
| [07] | 0,72% | Сабиров Денис Шамилевич - пользователь, сотрудник ИСТИНА - Интеллектуаль... | https://istina.msu.ru | 10 Мар 2020 | Интернет |
| [08] | 0,12% | Anisotropy of Polarizability of Fullerene Higher Adducts for Assessing the Efficiency of T... | https://doi.org | 14 Ноя 2018 | Интернет |
| [09] | 0,49% | Фторсодержащие и двусферные производные фуллеренов: синтез, строение, физи... | https://istina.msu.ru | 06 Ноя 2018 | Интернет |
| [10] | 0,76% | https://esu.citis.ru/dissertation/0iv3G00K7omx15JHDM2cLb00 | https://esu.citis.ru | 20 Мар 2018 | Интернет |
| [11] | 0,31% | D. Sh. Sabirov, R. G. Bulgakov, "Polarizability exaltation of endofullerenes X@Cn (n = 20, ... | http://mathnet.ru | 21 Авг 2017 | Интернет |
| [12] | 0,12% | http://www.kinetics.nsc.ru/seminar/Dmitriev1.pdf | http://kinetics.nsc.ru | 04 Июнь 2019 | Интернет |
| [13] | 0,24% | Полный текст диссертации | http://iopc.ru | 11 Дек 2016 | Интернет |
| [14] | 0,49% | Кинетика и механизм ингибирования фуллеренами C60, C70 и производными C60 ... | http://ufaras.ru | 11 Июль 2020 | Интернет |
| [15] | 0,22% | Поляризуемость аддуктов фуллерена с 60 с бензильными радикалами и флуорени... | https://yandex.ru | 01 Окт 2019 | Интернет |
| [16] | 0% | https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1511/1511.04272.pdf | https://arxiv.org | 19 Янв 2020 | Интернет |
| [17] | 0% | http://www.issp.ac.ru/ebooks/books/open/Vibrational_Spectroscopy.pdf | http://issp.ac.ru | 01 Апр 2020 | Интернет |
| [18] | 0% | https://esu.citis.ru/ikrbs/1YJZTRUVFQDB6WHW8OX3NBMC | https://esu.citis.ru | 20 Мар 2018 | Интернет |

| | | | | | |
|------|-------|--|---|-------------|-------------|
| [19] | 0,37% | Диссертация (11/11) | http://ipc-ras.ru | 30 Янв 2015 | Интернет |
| [20] | 0% | П. А. Трошин, Р. Н. Любовская, "Органическая химия фуллеренов: основные реакц... | http://mathnet.ru | 14 Авг 2017 | Интернет |
| [21] | 0,2% | не указано | не указано | раньше 2011 | Цитирование |