

**«УТВЕРЖДАЮ»**

Врио Председателя Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, доктор химических наук,



В. П. Захаров

«10 сентября 2020 г.

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

**Федерального государственного бюджетного научного учреждения  
Уфимского федерального исследовательского центра  
Российской академии наук**

Диссертация Тухбатуллиной Алины Асхатовны «Строение и поляризуемость экзоэдральных производных фуллерена  $C_{60}$ » выполнена в Институте нефтехимии и катализа – обособленном структурном подразделении Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (ИНК УФИЦ РАН), в лаборатории математической химии.

В период подготовки диссертации Тухбатуллина Алина Асхатовна обучалась в очной аспирантуре (01.11.2011 – 31.07.2017) Института нефтехимии и катализа Российской академии наук. С 12.03.2018 г. по настоящее время работает младшим научным сотрудником лаборатории математической химии ИНК УФИЦ РАН.

В 2011 г. Тухбатуллина Алина Асхатовна окончила Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы»

с присуждением квалификации Учитель математики и информатики по специальности «Математика с дополнительной специальностью информатика».

**Справка об обучении № 16/652.3**, содержащая данные о сдаче кандидатских экзаменов по следующим дисциплинам: специальность 02.00.04 – Физическая химия («отлично», 29 апреля 2016 г.), иностранный язык (английский, «отлично», 28 мая 2015 г.) выдана 13 марта 2020 г. Федеральным государственным бюджетным научным учреждением Уфимским федеральным исследовательским центром Российской академии наук. **Удостоверение о сдаче кандидатского экзамена № 17/652.3**, выданное 13 марта 2020 г. Федеральным государственным бюджетным научным учреждением Уфимским федеральным исследовательским центром Российской академии наук, содержит сведения о сдаче кандидатского экзамена по истории и философии науки (химические науки) («отлично», 25 мая 2012 г.).

**Научный руководитель** – Сабиров Денис Шамилевич, доктор химических наук, доцент, 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 (ИНК УФИЦ РАН).

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

#### **Оценка выполненной соискателем работы**

Диссертационная работа Тухбатуллиной А.А. является цельной, самостоятельной и законченной научно-исследовательской работой, выполненной на высоком профессиональном уровне, и отвечает критериям пп. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

## **Наиболее существенные научные результаты, полученные лично соискателем**

Личный вклад Тухбатуллиной А.А. заключается в сборе и анализе литературных данных по теме диссертации; планировании, подготовке и проведении квантовохимических расчетов, анализе и интерпретации полученных результатов. Диссертация написана автором самостоятельно. Автором обнаружены общие закономерности изменения поляризуемости экзоэдральных производных фуллерена  $C_{60}$  в зависимости от химического строения. Материалы исследований опубликованы в научной печати и представлены на научных конференциях.

### **Достоверность полученных результатов**

Результаты, полученные в диссертационной работе, удовлетворяют необходимым критериям воспроизводимости и получены с использованием современных квантовохимических методов исследования. Достоверность результатов работы не вызывает сомнений. Полученные расчетные результаты согласуются с известными литературными данными о строении и поляризуемости фуллеренов.

### **Научная новизна полученных результатов**

В диссертационной работе методом теории функционала плотности проведено систематическое исследование поляризуемости широкого ряда функциональных производных, димеров и олигомеров фуллерена  $C_{60}$ . Было обнаружено, что для производных  $C_{60}$  с простыми аддендами  $C_{60}X_n$  характерна депрессия поляризуемости, предложена аддитивная схема, учитывающая поправку на депрессию поляризуемости, и выведено аналитическое выражение для вычисления средней поляризуемости  $C_{60}X_n$ .

Обнаружено, что для производных  $C_{60}$ , содержащих в молекуле 2 и более каркаса, характерно положительное отклонение от аддитивной схемы – экзальтация поляризуемости. Обнаружена корреляция между экзальтацией

поляризуемости димеров и олигомеров  $C_{60}$  и расстоянием между фуллереновыми каркасами.

### **Практическая значимость и ценность результатов**

Современные методы синтеза позволяют получать одно- и двухкаркасные производные  $C_{60}$  с регулируемым числом и расположением аддендов. Обнаруженные в работе корреляции между строением и средней поляризуемостью молекул могут быть использованы для конструирования соединений с заранее известной поляризуемостью и зависимыми от неё физико-химическими параметрами.

### **Полнота изложения материалов диссертации в опубликованных работах**

По материалам диссертации опубликовано 10 научных трудов, из них 6 статей опубликованы в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК РФ для размещения материалов диссертации, тезисы 4 докладов – в сборниках материалов международных и российских научных конференций.

### **Список статей**

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  $\text{O}$ : 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. Тухбатуллина, А.А. DFT-исследование трех изомерных фуллереновых структур  $C_{120}$  и их эндоэдральных комплексов с фторидом натрия / А.А. Тухбатуллина, Д.Ш. Сабиров // Вестник Башкирского университета. – 2018. – Т.23. – № 2.– С. 390-393.

4. Pankratyev, E.Yu. Dipole polarizability, structure, and stability of [2+2]-linked fullerene nanostructures ( $C_{60}$ )<sub>n</sub> ( $n \leq 7$ ) / E.Yu. Pankratyev, **A.A. Tukhbatullina**, D.Sh. Sabirov // Physica E. – 2017. – V. 86. – P. 237-242.
5. **Tukhbatullina, A.A.** Positional isomerism, stability, and polarizability of  $C_{20}(CH_2)_n$  ( $n = 1-10$ ), 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.
6. Sabirov, D.Sh. Dependence of static polarizabilities of  $C_{60}X_n$  fullerene cycloadducts on the number of added groups X = CH<sub>2</sub> and NH ( $n = 1-30$ ) / D.Sh. Sabirov, **A.A. Tukhbatullina, R.G. Bulgakov** // Computational and Theoretical Chemistry. – 2012. – V. 989. – P. 18-22.

#### **Соответствие содержания диссертации паспорту специальности**

Диссертационная работа Тухбатуллиной А.А. соответствует 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».

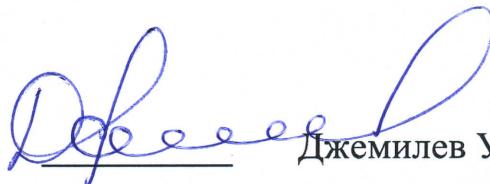
Диссертация «Строение и поляризуемость экзоэдральных производных фуллерена  $C_{60}$ » Тухбатуллиной Алины Асхатовны рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 02.00.04 – «Физическая химия», отрасль науки – химические науки.

Заключение принято на заседании объединенного научного семинара Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного

учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук.

Присутствовало на заседании 26 человек. Результаты голосования: «За» – 26 чел., «Против» – нет, «Воздержалось» – нет, протокол № 4 от 4 сентября 2020 г.

Председатель объединенного семинара ИНК УФИЦ РАН  
д.х.н., член-корр. РАН

  
Джемилев Джемилев У.М.

Секретарь объединенного семинара ИНК УФИЦ РАН  
к.х.н., доцент

  
Савченко Савченко Р.Г.