

ОТЗЫВ

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

Поляризуемость – это фундаментальная физико-химическая величина, которая определяет поведение молекулы в наложенном электрическом поле. Большой интерес к поляризуемости связан с возможностью ее применения для определения поведения молекул при взаимодействии с другими частицами (как с заряженными, так и с нейтральными). Данные о средней поляризуемости экзоэдральных производных фуллеренов относятся к ряду физико-химических характеристик, влияющих на эффективность использования аддуктов в областях наноэлектроники, медицины и солнечной энергетики. Оценка значений средней поляризуемости позволяет подобрать фуллереновые производные с необходимыми физико-химическими свойствами, что наиболее актуально при экзоэдральной функционализации производных фуллерена C_{60} . Однако исследование поляризуемости производных фуллерена экспериментальными методами является трудной задачей в связи с необходимостью проведения эксперимента с макроскопическими количествами вещества, поэтому целесообразно применение методов квантовохимического моделирования, что и было проведено в работе Тухбатуллиной Алины Асхатовны посвященной изучению средней поляризуемости экзоэдральных производных фуллерена C_{60} и зависимости от их строения.

Тухбатуллиной Алиной Асхатовной на высоком научно-методическом уровне проведено квантовохимическое исследование поляризуемости экзоэдральных соединений фуллерена содержащих от одного до семи каркасов C_{60} и изучено влияние структурных особенностей этих соединений на величину средней поляризуемости молекул. Впервые диссидентом предложено аналитическое выражение, которое связывает среднюю поляризуемость фуллереновых производных с числом аддендов, выявлена корреляция между экзальтацией поляризуемости олигомеров C_{60} и расстоянием между фуллереновыми ядрами. В диссертационной работе исследовано влияние изомерии на поляризуемость аддуктов с простыми и фуллереновыми аддендами. Установлено, что для аддуктов с небольшими аддендами влияние изомерии несущественно, а для многокаркасных производных фуллерена наоборот вносит существенный вклад. Информация о существующих зависимостях между строением и поляризуемостью экзоэдральных производных C_{60} имеет прогностическую значимость, т.к. позволяет

получить новые производные фуллерена C_{60} с заданными свойствами, что позволит получить новые материалы для фотовольтаики, медицины.

Достоверность полученных результатов не вызывает сомнений и обеспечена применением современных надежных методов квантовохимического моделирования. Основные результаты работы опубликованы в виде 6 статей в рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК, индексируемых в базах данных Scopus и Web of Science, и тезисов 4 докладов на международных и всероссийских научных конференциях.

Принципиальных замечаний по содержанию автореферата не имеется.

На основании вышеизложенного можно заключить, что диссертация **Тухбатуллиной Алины Асхатовны «Строение и поляризуемость экзоэдральных производных фуллерена C_{60} »** представляет собой завершенную научно-квалификационную работу, в которой решена важная в области физической химии фундаментальная задача по установлению общих закономерностей связи строения и средней поляризуемости аддуктов фуллерена C_{60} как с простыми, так и с фуллереновыми аддендами путем оценки вклада отдельных фрагментов в их поляризуемость с использованием квантовохимических методов и аддитивных схем.

По актуальности, научной новизне, теоретической значимости, объему выполненных работ диссертация отвечает требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, и соответствует критериям, изложенным в пп. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор Тухбатуллина Алина Асхатовна заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Диниахметова Диана Радиковна, кандидат химических наук (02.00.04 – Физическая химия), научный сотрудник лаборатории стереорегулярных полимеров УФИХ УФИЦ РАН. E-mail: diniakhmetova@rambler.ru; тел.: +7(347)235-61-66.

28.05.2021

Колесов Сергей Викторович, доктор химических наук (02.00.06 – Высокомолекулярные соединения), профессор (02.00.06 – Высокомолекулярные соединения), заведующий лабораторией стереорегулярных полимеров УФИХ УФИЦ РАН. E-mail: kolesov@anrb.ru; тел.: +7(347)235-61-66.

28.05.2021

Уфимский Институт химии – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (УФИХ УФИЦ РАН)

450054, Уфа, проспект Октября, 71

e-mail: chemdir@anrb.ru; тел.: +7(347)235-60-66; сайт: <http://w3.chem.anrb.ru/>

Мы, Колесов Сергей Викторович и Диниахметова Диана Радиковна, согласны на включение наших персональных данных в документы, связанные с работой докторской диссертационного совета Д 002.198.02, и их дальнейшую обработку.

Подписи Колесова С.В. и Диниахметовой Д.Р. заверяю

Ученый секретарь УФИХ УФИЦ РАН  / Гималова Ф.А.