

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
специальности 02.00.04 - Физическая химия

Стремительный прогресс вычислительной техники и обусловленное этим бурное развитие методов компьютерной химии позволяет в настоящее время уверенно моделировать квантовые системы, устанавливать пространственную и электронную структуру, оценивать энергетические, оптические, электромагнитные и другие макро- и микроскопические параметры атомно-молекулярных объектов с точностью, приближающейся к возможностям лучших экспериментальных физико-химических методов исследования вещества. В отличие от дорогостоящего эксперимента, который зачастую сопряжен с многочисленными трудностями (требует макроскопического количества чистых веществ, их труднопредсказуемым поведением в зависимости от условий эксперимента и т.п.), который в большинстве случаев может предоставить только определенный набор интегральных характеристик веществ, теоретические квантово-химические методы позволяют всесторонне исследовать молекулы, ионы и кластеры в мельчайших деталях, которые могут варьироваться в зависимости от изомерного строения и конформационных особенностей.

Ярким примером, демонстрирующим впечатляющие возможности современных квантово-химических методов, служит диссертационная работа Тухбатуллиной А.А., посвященная выявлению связи между строением молекул и их поляризумостью – важным физико-химическим параметром молекул, определяющим их стабильность, электрофильность, электрические, оптические и химические свойства. Объекты, выбранные для исследования – уникальные по своим свойствам и перспективные для приложений в различных областях науки и техники молекулы фуллеренов, их экзоэдralные и олигомерные производные. В силу своей многоатомности они представляют для квантово-химических методов особый вызов, с чем соискатель справился блестяще. Автором проделана масштабная трудоемкая вычислительная работа по установлению равновесной структуры большого числа молекул, необходимую для решения основной задачи – определения расчетной величины поляризумости. Проведен тщательный анализ полученных данных с целью установления закономерностей и взаимосвязи поляризумостей для нескольких рядов производных фуллеренов, включающих изомеры/олигомеры с разным сочетанием и числом аддендов/звеньев. Из автореферата видно, что соискатель хорошо владеет не только квантово-химическими расчетными методами, но и физическими познаниями и математическими приемами обработки данных. В работе использован интересный подход, основанный на сравнении величин поляризумости, полученных квантохимическими методами и с помощью аддитивных схем. Установлено, что отклонение этих величин друг относительно друга в ту или иную сторону (экзальтация и депрессия) является характеристичным для разных классов экзоэдralных производных C_{60} – однокаркасных и многокаркасных производных C_{60} . К сожалению, из автореферата не вполне ясно, в чем заключается физический смысл сравнения одних расчетных данных (поляризумости, рассчитанной кванто-

химическими методами) с другими (полученными по аддитивным схемам), хотя понятно, что такой подход обусловлен отсутствием экспериментальных данных, которые бы могли послужить более надежным ориентиром для установления корреляций.

Результаты работы представлены в рецензируемых отечественных и зарубежных журналах и докладывались на представительных международных конференциях; их достоверность не вызывает сомнения.

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 решены значимые для физико-химии проблемы, сводимые к установлению связи «структура-свойство», обнаружены важные корреляции, которые, несомненно, найдут применение при синтезе новых соединений с требуемыми характеристиками для создания катализаторов, композиционных материалов и устройств органической электроники.

Представленная работа по объему, актуальности и научной новизне 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.

Хатымов Рустем Владиславович, кандидат физико-математических наук (специальность 01.04.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний), доцент кафедры физики Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева. E-mail: rustem@muctr.ru; тел.: +7 (499) 978-59-30.
125047, г. Москва, Миусская площадь, д. 9; тел.: +7 (499) 978-86-60; e-mail: pochta@muctr.ru; web: <https://muctr.ru>

Я, Хатымов Рустем Владиславович, согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета Д 002.198.02, и их дальнейшую обработку.

25.05.2021

Подпись Хатымова Р.В. заверяю
Ученый секретарь РХТУ им. Д.И.Менделеева,

25.05.2021



/ Фамилия И. О.

Каминко И.К.