

## 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

Химия фуллеренов представляет собой активно развивающуюся в последние десятилетия область экспериментальных и теоретических исследований. Возможности экзодральной и эндодральной функционализации фуллеренов открывают широкие перспективы освоения их в качестве молекулярных устройств и нанотранспортеров, элементов органических солнечных батарей, наноразмерных капсул для эффективной транспортировки препаратов, диагностических контрастов и т.д. Получение соединений фуллеренов с необходимыми для практических приложений свойствами (растворимость, реакционная способность, электронно-акцепторные свойства и способности к комплексообразованию) может быть достигнуто с помощью варьирования мотивов присоединения, числа и химической природы присоединяемых аддендов, подбора инкапсулируемых элементов. Таким образом, является актуальным исследование корреляционных и функциональных зависимостей между структурными характеристиками соединений фуллеренов и их свойствами, с целью конструирования аддуктов с необходимыми физико-химическими свойствами.

Диссертационная работа Тухбатуллиной А.А. посвящена установлению связи между строением и средней поляризуемостью одно- и многокаркасных экзодральных производных фуллерена  $C_{60}$  с использованием методов теории функционала плотности и аддитивных схем. В ходе исследования были выявлены основные закономерности изменения поляризуемости экзодральных соединений  $C_{60}X_n$  в процессе функционализации углеродного каркаса и выведена формула, связывающая среднюю поляризуемость с числом присоединенных аддендов. Изучено влияние на величину средней поляризуемости прямого и опосредованного соединения каркасов, числа и химической природы мостиковых групп в димерных структурах, общего мотива присоединения в молекулах олигомеров и топологических особенностей гексамеров ( $C_{60}$ )<sub>6</sub>.

Достоверность результатов подтверждается использованием современных квантовохимических методов моделирования и исследования структур, ранее успешно примененных для оценки поляризуемости [1+1]-аддуктов фуллеренов и эндодральных производных фуллеренов с инкапсулированными атомами благородных газов. Выводы диссертационного исследования соответствуют перечню установленных задач и не противоречат основным концепциям физической химии и химии фуллеренов.

Содержание диссертационного исследования достаточно широко отражено в 10 научных публикациях автора диссертационной работы.

По автореферату имеются замечания

1. В тексте автореферата встречаются ссылки на литературу, оформленные в разном стиле.
2. Из автореферата следует, что установление корреляций «структура - свойство» (средняя поляризуемость) необходимо для теоретического прогнозирования соединений фуллеренов с ценными в практическом плане свойствами. Однако из

не ясно, указаны ли в работе рекомендуемые значения  $\alpha$  для приложений производных фуллеренов?

Сделанные замечания не снижают научной ценности представленного исследования и не меняют общую положительную оценку проведенной работы.

На основании вышеизложенного можно заключить, что диссертация Тухбатуллиной Алины Асхатовны «*Строение и поляризуемость экзоэдральных производных фуллерена C<sub>60</sub>*» представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, в которой выявлены основные закономерности между поляризуемостью и строением экзоэдральных производных фуллерена C<sub>60</sub>, характеризующиеся прогностической ценностью и практической значимостью.

Представленная работа по объёму, 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.

Янборисов Валерий Марсович, доктор химических наук (специальность 02.00.06 – Высокомолекулярные соединения), профессор кафедры «Физическая химия и химическая экология». E-mail: [YanborisovVM@mail.ru](mailto:YanborisovVM@mail.ru); тел.: 8(347)229-97-18.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Башкирский государственный университет»  
450076, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32. 8(347)272-63-70; e-mail: [rector@bsunet.ru](mailto:rector@bsunet.ru)  
[www.bashedu.ru](http://www.bashedu.ru).

Я, Янборисов Валерий Марсович, согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета Д 002.198.02, и их дальнейшую обработку.

26.05.2021

Подпись Янборисова В.М. заверяю  
Ученый секретарь Ученого совета БашГУ

  
\_\_\_\_\_  
  
\_\_\_\_\_/ Баïмова С.Р.

26.05.2021

Подпись   
Заверяю: ученый секретарь Ученого совета  
Башкирского государственного университета  
 С.Р. Баïмова  
« 26 / мая 2021 г. »  
