

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

Создание новых композиционных материалов на основе производных фуллеренов с регулируемыми физико-химическими свойствами является актуальной задачей современной науки. Электроноакцепторные свойства фуллеренов и их соединений делают их перспективными в активно развивающейся области исследований – солнечной энергетике. Интерес к экзоэдральным соединениям фуллерена обусловлен наличием у фуллеренов большой единой π -электронной системы, что открывает широкие возможности для функционализации углеродного каркаса и позволяет регулировать физико-химические свойства производных C_{60} варьированием химической природы, количества и взаимного расположения аддендов.

Поляризуемость – это свойство, характеризующие отклик молекулы на приложенное электрическое поле. При экспериментальных исследованиях производных фуллеренов исследователи сталкиваются с трудностями, связанными с трудностями разделения индивидуальных изомеров и необходимостью наработки достаточно больших количеств образцов. В результате этого недостаточно экспериментальных данных о свойствах экзоэдральных соединений фуллерена C_{60} , в том числе поляризуемости. В сложившихся условиях теоретическое исследование молекул методами квантовой химии является работоспособной альтернативой для оценки средней поляризуемости экзоаддуктов фуллерена C_{60} .

Диссертационная работа Тухбатуллиной Алины Асхатовны посвящена исследованию поляризуемости экзоэдральных аддуктов фуллерена C_{60} и установлению зависимостей между структурой производных фуллерена и их средней поляризуемостью. В ходе работы изучалась поляризуемость двух классов экзоэдральных соединений C_{60} – аддуктов с простыми аддендами и молекулярных структур включающих несколько фуллереновых каркасов. Выявлено и охарактеризовано неаддитивное поведение средней поляризуемости (депрессия и экзальтация поляризуемости) при увеличении числа присоединенных функциональных групп и каркасов фуллеренов в молекулах. Выведены формулы, связывающие величину средней поляризуемости $C_{60}X_n$ с числом присоединенных аддендов. Исследованы эффекты региоизомерии для обоих классов экзоэдральных производных C_{60} .

Выводы, приведенные в автореферате, соответствуют поставленным задачам. Содержание диссертации отражено в 10 научных работах, включающих 6 статей в журналах, из списка рекомендованных ВАК и индексируемых в базах данных WoS и Scopus, а также тезисы 4 докладов на научных конференциях.

К содержанию работы могут быть сделаны следующие замечания:

1. На стр 7-8 в таблице 1 не понятно, чем различаются соединения cis-1 ÷ cis-3 и trans-1 ÷ trans-3 по структуре.
2. Чем вы объясняете тот факт, что корреляция между вкладами $\alpha_{[C_{60}]}$ и $\alpha_{[X]}$ и расстоянием между аддендами в случае $C_{60}(CH_2)_2$ лучше, чем в случае $C_{60}O_2$?
3. Есть ли какие-то экспериментальные данные по поляризуемости аддуктов или олигомеров фуллерена? Как можно сделать вывод о соответствии данных расчета и эксперимента по этим соединениям?

Высказанные замечания не умаляют значимости полученных автором новых результатов и не влияют на общую положительную оценку рецензируемой работы.

На основании вышеизложенного можно заключить, что диссертация Тухбатуллиной Алины Асхатовны «Строение и поляризуемость экзоэдральных производных фуллерена C_{60} » представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, в которой решены задачи по установлению корреляционных и функциональных зависимостей между строением и поляризуемостью экзоэдральных соединений фуллерена (см. п. 9 Положения).

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.

Просочкина Татьяна Рудольфовна, доктор химических наук (специальность 02.00.13 – Нефтехимия), профессор (научная специальность - Нефтехимия), заведующий кафедрой нефтехимии и химической технологии. E-mail: agidel@ufanet.ru; тел.: 8(347)242-09-32.

Купова Ольга Юрьевна, кандидат химических наук (специальность 02.00.04 – Физическая химия), доцент кафедры нефтехимии и химической технологии. E-mail: olgakupova@gmail.com; тел.: 8(987) [REDACTED].

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет»
450064, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1. 8(347)243-19-77; e-mail: info@rusoil.net

Я, Просочкина Татьяна Рудольфовна, согласна на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета Д 002.198.02, и их дальнейшую обработку.

21.05.2021

Я, Купова Ольга Юрьевна, согласна на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета Д 002.198.02, и их дальнейшую обработку.

21.05.2021

Подписи Просочкиной Т.Р. и Куповой О.Ю. заверяю
Проректор по научной
и инновационной работе УГНТУ

21.05.2021

