ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.198.02, СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО НАУЧНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ УФИМСКОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЦЕНТРА РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК, МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

Аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 2 июня 2021 г., № 49

О присуждении Тухбатуллиной Алине Асхатовне, гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Строение и поляризуемость экзоэдральных производных фуллерена C_{60}» в виде рукописи по специальности 02.00.04 – Физическая химия принята к защите 24 марта 2021 г. (протокол заседания № 44) диссертационным советом Д 002.198.02, созданным на базе Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (450054, г. Уфа, проспект Октября, 71; диссертационный совет создан в соответствии с приказом №370/нк от 20 декабря 2018 года).

Соискатель – Тухбатуллина Алина Асхатовна, 1988 года рождения, в 2011 году окончила Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М.Акмуллы». С 2011 г. по 2017 г. обучалась в очной аспирантуре Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института нефтехимии и катализа Российской академии наук, где освоила программу подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки по научной

специальности 02.00.04 – Физическая химия (справка об обучении № 16/652.3 от 13.03.2020 г., удостоверение о сдаче кандидатского экзамена №17.652.3 от 13.03.2020 г.).

С марта 2018 г. и по настоящее время работает младшим научным сотрудником лаборатории математической химии Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена в Федеральном государственном бюджетном научном учреждении Уфимском федеральном исследовательском центре Российской академии наук Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, в лаборатории математической химии Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук.

Научный руководитель – Сабиров Денис Шамилевич, доктор химических наук, доцент, заведующий лабораторией математической химии, директор Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

Кузнецов Валерий Владимирович – доктор химических наук, профессор кафедры физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский государственный авиационный технический университет»,

Хаматгалимов Айрат Раисович – доктор химических наук, старший научный сотрудник лаборатории физико-химического анализа, заместитель

руководителя по научной работе Института органической и физической химии им. А. Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук»

дали положительные отзывы на диссертацию.

Официальный оппонент д.х.н. Кузнецов Валерий Владимирович в своем положительном отзыве приводит следующие замечания:

1. В разделе 1.4 в ходе описания электрического момента диполя утверждается, что «μ=q*l*, где …*l* – ***вектор, направленный от положительного заряда к отрицательному***» (с. 29). И далее, на с. 30 говорится, что дипольный момент молекулы «может быть представлен в виде произведения суммы положительных зарядов ***и вектора, направленного от центра тяжести положительных зарядов к центру тяжести отрицательных зарядов***» (курсив мой). Здесь присутствуют сразу два «греха». Во-первых, и электрический момент диполя и дипольный момент являются векторными величинами и должны в данном контексте отражаться соответствующей символикой: стрелками над соответствующим параметром, либо буквенным обозначением. выделенным жирным шрифтом: **μ**=q***l***. Во-вторых, как известно, вектор ***l*** (плечо диполя) всегда направлен **от отрицательного заряда к положительному.** Вероятно, автор путает это понятие с направлением силовых линий электрического поля, которые действительно идут от положительного заряда к отрицательному.

2. Автор достаточно плодотворно использует процедуру выявления корреляции между средней поляризуемостью и линейными величинами (ковалентные радиусы и расстояния между каркасами в димерах) либо числом самих каркасов. Не отрицая основные выводы такого подхода, хотелось бы отметить, что здесь явно не хватает более углубленного анализа полученных результатов. Как известно, в настоящее время возможность корреляции между двумя исследуемыми параметрами оценивается в рамках конкретных

приближений Чеддока, Пирсона, Стьюдента, Спирмена, Кендалля либо Фехнера и предполагает не просто выявление численного значения коэффициента корреляции, но и оценку самой зависимости в терминах, регламентируемых конкретным используемым приближением (слабая, средняя, высокая, очень высокая корреляция). Ничего подобного в работе нет, как нет и указаний на то, какое конкретно приближение и почему было использовано в рецензируемой работе.

3. На с. 71 утверждается: «*Как видно из графика на Рисунке 34 функция* ***с приемлемой точностью*** *описывает изменение поляризуемости молекул* $C_{60}X_n$ *(n = 1–30), происходящее в процессе [2+1]-циклоприсоединения»* (курсив мой). Остается непонятным, о какой точности ведется разговор, поскольку «за кадром» вообще остался вопрос: какая точность в данном случае является приемлемой, а какая – нет.

Кузнецов Валерий Владимирович отметил, что указанные замечания не снижают общей положительной оценки диссертации. Текст диссертации написан достаточно сжато, простым и ясным языком.

Официальный оппонент д.х.н. Хаматгалимов Айрат Раисович в своем положительном отзыве приводит следующие вопросы и замечания:

1. На с. 40 автор, сравнивая точность квантово-химических расчетов значений поляризуемости полуэмпирическими методами, методами *ab initio* и теории функционала плотности, констатирует, что точность расчета в полуэмпирических методах зависит от выбора базисного набора. Видимо, автор просто ошибся, поскольку речь до этого шла о влиянии различных базисных наборов на точность расчетов методами *ab initio*.

2. На с. 61 диссертант перечислил общие тенденции при описании средней поляризуемости аддуктов $C_{60}X_n$. Тот факт, что аддукты C_{60} обладают бóльшими значениями средней поляризуемости по сравнению с исходным фуллереном C_{60}, вполне понятен. Автор связывает это с изменением числа электронов в молекуле адденда и, как следствие, результатом влияния электронных облаков присоединенных функциональных групп. Кстати, следует отметить, что

увеличение средней поляризуемости может быть также связано с изменением (понижением) симметрии аддукта по сравнению с высокосимметричным исходным фуллереном C_{60}. Однако остается совершенно неясным отсутствие влияния *изомерии* полиаддуктов на общую их поляризуемость (в случае моноаддуктов ситуация вполне очевидна).

3. На графиках сравнения зависимостей значений поляризуемости, рассчитанных по аддитивной схеме и вычисленной квантово-химически (рис. 32-34), автор указывает на «высокую» или «приемлемую» точность их сопоставления. Для количественного сопоставления следовало бы указать среднеквадратичное отклонение.

4. Средняя поляризуемость аддуктов фуллерена C_{60} в случае с простыми аддендами характеризуется депрессией поляризуемости, тогда как для димеров и олигомеров C_{60} наблюдается противоположная картина - экзальтация поляризуемости. В чем все-таки заключается причина разного характера отклонений от аддитивной схемы (хотя, как и сам автор отмечает, дополнительные каркасы фуллеренов являются фактически друг для друга аддендами)?

5. В тексте диссертации присутствуют грамматические ошибки, например: «поляризуемость также связанна» (с. 4), «варианты функцианолизации …» (подпись к рис. 2, с. 10), «функцианолизированными продуктами…» (с. 15), «экзотремичностью» (с. 17), «… методом рентгеновской кристаллографией…» (подпись к рис. 11, с .19), «пленка C_{180}, нанесенных..» (с. 29), «значение ориентационная поляризация» (с. 30), «не систематичностью» (с. 42), «на Рисунок 32б» (с. 67), «функцианолизации» (с. 67, с.77, с. 86),

6. В тексте диссертации присутствуют множество пунктуационных ошибок, связанных, главным образом, с причастными и деепричастными оборотами. В отзыве приведены лишь часть подобных ошибок, например: «…основные термины и понятия связанные с…» (с. 9), «фуллероидные структуры, с контролируемыми …» (с. 11), «согласно литературным данным» (с. 12), «благодаря богатой π-электронной структуре» (с. 12), «для селективного

синтеза [6.6]-закрытых аддуктов предлагается» (с. 13), «синтеза метанофуллеренов, с различными» (с. 14), «… продуктами полициклоприсоединения, выделенными в индивидуальном виде являются…» (с. 15), «… по связи смежной для пентагона и гексагона…» (с. 16), «…реакции, приводящие к [5.6]-закрытым и [5.6]-открытым аддуктам характеризуются…» (с. 17), «каркасов входящих в состав молекулы» (с. 18), «соединений содержащих две…» (с. 22), «каркаса фуллерена C_{60} связанных…» (с. 22), «Громовым и соавторами, было показано…» (с. 22), «фуллерена C_{60}, содержащих кислородные мостики» (с 23), «димерам, существующим в *syn*- и *anti*-формах вызван» (с 25), «фотоизомеризации, и перспективностью» (с. 25) «в подобных соединениях,» (. 25), «связей, образующих циклобутановый фрагмент является» (с. 25), «момента μ_0 ($\mu_0 \geq 0$) имеющего место в отсутствии электрического поля служит» (с. 30), «молекул, обладающих собственным дипольным моментом кроме» (с. 30), «с вектором напряженности E» (с 31), «порядков соответственно» (с. 31), «полученный при преобразовании тензором может» (с. 31), «но не направление описывается» (с. 31), «поляризуемости основанные …» (с. 33), «…всем объеме соединения и» (с. 34), «дисперсионное взаимодействие присущее» (с. 34), «изотропна, вне зависимости» (с. 35), «рядом авторов, при исследовании» (с. 37), «частоте ω равной» (с. 37), «кремниевые подложки установлены»(с. 37), «значения ε_1 равные» (с. 37), «по формуле Клазиуса-Моссотти равны» (с. 38), «постоянных решетки a равные» (с. 38), «соответственно» (с. 38), «формуле Лоренца-Лоренца равны» (с. 38), «параметров, при описании графиков» (с. 38), «аппаратуры используемой…» (с. 38), «полученное из равенства» (с. 39), «соответственно» (с. 39), «как *ab initio* так и … » (с. 39), «равны 45,3» (с. 39), «6-31G* выще..» (с. 39), «поляризуемость фуллерена C_{70} рассчитанная…» (с. 39), «базисов расширенных…» (с. 40) и т.д. и т.п.

7. Повторюсь, что диссертация написана хорошим языком, но есть неудачные фразы, например: «…молекулы содержат по несколько фуллереновых коров, связанных между собой...» (с. 10). Видимо, имелись в

виду, ядра (англ. core), лучше бы было заменить это слово каркасом или остовом.

Хаматгалимов Айрат Раисович отметил, что достоинства и общее впечатление обсуждаемой диссертационной работы не могут быть обесценены сделанными замечаниями и не ставят под сомнение положения, выносимые на защиту.

В отзывах официальных оппонентов дано заключение, что диссертационная работа Тухбатуллиной Алины Асхатовны «Строение и поляризуемость экзоэдральных производных фуллерена C_{60}», представленная на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия представляет собой завершенную научно-квалификационную работу, в которой впервые методом функционала плотности проведено систематическое исследование поляризуемости функциональных производных, димеров и олигомеров фуллерена C_{60}, предложено аналитическое выражение, устанавливающее связь между средней поляризуемостью фуллереновых аддуктов с простыми аддендами и числом аддендов в молекуле, обнаружена корреляция между экзальтацией поляризуемости димеров и олигомеров фуллерена C_{60} и расстоянием между фуллереновыми каркасами, изучено влияние изомерии на поляризуемость гексамеров фуллерена C_{60}, что, в итоге, вносит вклад в решение важной актуальной задачи в области физической химии – установления связи между строением и средней поляризуемостью одно- и многокаркасных экзоэдральных производных фуллерена C_{60}. Представленная диссертационная работа Тухбатуллиной Алины Асхатовны отвечает критериям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, изложенным в пп. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства РФ 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.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М.Акмуллы» (г. Уфа) в своем положительном отзыве, подписанном Борисовым Иваном Михайловичем, доктором химических наук, профессором, профессором кафедры генетики и химии «Башкирский государственный педагогический университет им. М.Акмуллы», Юсуповым Азатом Равилевичем, кандидатом физико-математических наук, доцентом кафедры физики и нанотехнологий «Башкирский государственный педагогический университет им. М.Акмуллы» и утвержденном проректором по научной деятельности Федерального государственного бюджетного учреждения высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М.Акмуллы» доктором биологических наук Сухановой Натальей Викторовной, указала, что представленная диссертация является логически завершенной научной работой, содержащей принципиально новые, важные для науки и практики результаты. Диссертация Тухбатуллиной Алины Асхатовны «Строение и поляризуемость экзоэдральных производных фуллерена C_{60}» представляет собой научно-квалификационную работу, в которой решены важные для развития физической химии задачи по установлению связи между строением и средней поляризуемостью экзоэдральных производных фуллерена C_{60} с простыми и фуллеренсодержащими аддендами, с использованием методов теории функционала плотности и аддитивных схем.

В отзыве ведущей организации подробно проанализированы все аспекты работы и приведены следующие замечания и вопросы:

1. В работе недостаточно подробно обосновано вычисление и учет среднего значения поляризуемости молекулы. В частности, возникает вопрос, какие связи в процессе поляризации затрагиваются и как меняется данная картина в случае производных фуллеренов.
2. В тексте диссертации не указано, в явном виде, для какой фазы (жидкой, твердой или газообразной) проводились расчеты значений поляризуемости. Как

условия теоретического эксперимента повлияют на рассматриваемые параметры фуллеренсодержащих систем.

3. В таблице 7 главы 2 различие между расчетными и экспериментальными значениями поляризуемость фторидов фуллеренов составляет от 28,6 до 30,4 в «ед изм». На сколько такое качественное воспроизведение приемлемо?

4. Насколько обоснована аддитивная схема, используемая для вычисления аддитивной поляризуемости соединений вида $C_{60}X_n$?

5. Автор в достаточной мере показал соответствие эффекта депрессии поляризуемости аддуктов C_{60} с простыми аддендами имеющимся экспериментальным данным и общим химическим концепциям. Но есть ли экспериментальные предпосылки к обнаружению эффекта экзальтации поляризуемости олигомеров фуллерена, например, $(C_{60})_6$?

6. Создается впечатление, что аддитивные схемы – очень грубый инструмент для исследования распределения молекулярного свойства (средней поляризуемости) по фрагментам молекулы. Автор сам это показывает, сравнивая аддитивные расчеты с результатами сайт-специфического анализа моно- и бисаддуктов $C_{60}X$ (X = O, CH_2). Последний с высокой точностью показывает вклады от отдельных атомов в среднюю поляризуемость молекулы. Возникает логичный вопрос: почему такой анализ не проводился для других соединений C_{60}?

7. В диссертационном исследовании автор варьирует химические группы вокруг каркаса фуллерена C_{60}. В настоящее время известно большое число других фуллеренов (C_{70}, C_{76}, C_{78}, C_{84} и т.д.). Возникает вопрос о применимости найденных закономерностей к их экзоэдральным производным.

В заключении отмечается, что в целом, замечания не носят принципиального характера, а диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне. Представленная диссертационная работа А.А. Тухбатуллиной полностью соответствует требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям (п. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября

2013 г. № 842), а её автор – Тухбатуллина Алина Асхатовна заслуживает присуждения ей искомой степени кандидата химических наук по научной специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Отзыв обсужден на расширенном семинаре кафедры физики и нанотехнологий Федерального государственного бюджетного учреждения высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М.Акмуллы» (протокол № 8 от 13 апреля 2021 г.), присутствовало 12 человек из числа научного и профессорско-преподавательского состава.

Соискатель имеет 13 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 10 работ, из них 6 статей в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК и входящих в международные базы научного цитирования Web of Science и Scopus. Результаты работы представлены на 4 Международных и Всероссийских конференциях.

В публикациях полностью освещены все основные аспекты диссертационного исследования: представлены результаты анализа данных, полученных при проведении квантовохимических исследований. Все результаты, представленные на защиту, опубликованы в виде статей в рецензируемых научных журналах и тезисов докладов в сборниках научных конференций. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. **Tukhbatullina, A.A.** Distributed polarizability of fullerene [2+1]-adducts $C_{60}X_n$ (n = 1 and 2) with symmetric addends X=CH_2 and 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. Pankratyev, E.Yu. Dipole polarizability, structure, and stability of [2+2]-linked fullerene nanostructures $(C_{60})_n$ ($n \leq 7$) / E.Yu. Pankratyev, **A.A. Tukhbatullina**, D.Sh. Sabirov // Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures – 2017. – V. 86. – P. 237-242.

4. Sabirov, D.Sh. Dependence of static polarizabilities of $C_{60}X_n$ fullerene cycloadducts on the number of added groups X = CH_2 and NH (n = 1–30) / D.Sh Sabirov, **A.A. Tukhbatullina**, R.G. Bulgakov // Computational and Theoretical Chemistry. – 2012. – V. 989. – P. 18-22.

На автореферат диссертации поступили отзывы:

1. **Хатымова Рустема Владиславовича**, кандидата физико-математических наук (специальность 01.04.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний), доцента кафедры физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева». Отзыв положительный, содержит следующее замечание:

- к сожалению, из автореферата не вполне ясно, в чем заключается физический смысл сравнения одних расчетных данных (поляризуемости, рассчитанной квантово-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.

2. **Диниахметовой Дианы Радиковны,** кандидата химических наук (02.00.04 – Физическая химия), научного сотрудника лаборатории стереорегулярных полимеров и **Колесова Сергея Викторовича,** доктора химических наук (02.00.06 – Высокомолекулярные соединения), профессора (02.00.06 – Высокомолекулярные соединения), заведующего лабораторией стереорегулярных полимеров Уфимского Института химии – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного

научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук. Отзыв положительный, принципиальных замечаний по содержанию не имеется.

3. **Янборисова Валерия Марсовича**, доктора химических наук (специальность 02.00.06 – Высокомолекулярные соединения), профессора кафедры «Физическая химия и химическая экология» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет»». Отзыв положительный, содержит следующее замечание:

– в тексте автореферата встречаются ссылки на литературу, оформленные в разном стиле;

– из автореферата следует, что установление корреляций «структура - свойство» (средняя поляризуемость) необходимо для теоретического прогнозирования соединений фуллеренов с ценными в практическом плане свойствами. Однако не ясно, указаны ли в работе рекомендуемые значения α для приложений производных фуллеренов?

Янборисов В.М. отметил, что сделанные замечания не снижают научной ценности представленного исследования и не меняют общую положительную оценку проведенной работы.

4. **Просочкиной Татьяны Рудольфовны**, доктора химических наук (02.00.13 – Нефтехимия), профессора (02.00.13 – Нефтехимия), заведующей кафедрой нефтехимии и химической технологии и **Куповой Ольги Юрьевны**, кандидата химических наук (02.00.04 – Физическая химия), доцента кафедры нефтехимии и химической технологии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет». Отзыв положительный, содержит следующие замечания:

– на стр 7-8 в таблице 1 не понятно, чем различаются соединения cis1 ÷ cis3 и trans1 ÷ trans3 по структуре.

– чем вы объясняете тот факт, что корреляция между вкладами $\alpha_{[C60]''}$ и $\alpha_{[X]''}$ и расстоянием между аддендами в случае $C_{60}(CH_2)_2$ лучше, чем в случае $C_{60}O_2$?

– 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?

Просочкина Т.Р. и Купова О.Ю. отмечают, что замечания не умаляют значимости полученных автором новых результатов и не влияют на общую положительную оценку рецензируемой работы.

В отзывах отмечается актуальность, научная новизна, достоверность сделанных выводов, теоретическая и практическая значимость, а также соответствие требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, 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.

Выбор официальных оппонентов обосновывается тем, что доктор химических наук по специальности 02.00.03 – Органическая химия Кузнецов Валерий Владимирович, профессор кафедры физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский государственный авиационный технический университет» является высококвалифицированным специалистом в области физической и органической химии, в том числе, автором научных статей по схожей тематике – изучения физико-химических свойств производных фуллерена C_{60} квантовохимическими методами.

Доктор химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия, Хаматгалимов Айрат Раисович, старший научный сотрудник лаборатории физико-химического анализа, заместитель руководителя по научной работе Института органической и физической химии им. А. Е. Арбузова –

обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук» является высококвалифицированным специалистом в области физической и структурной химии фуллеренов, о чем свидетельствуют его научные труды.

Выбор ведущей организации обусловлен тем, что в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М.Акмуллы» проводятся научные исследования по научным направлениям, соответствующим теме диссертации: квантовохимическому исследованию проводящих свойств органических полимерных пленок, в том числе допированных производными фуллеренов, установление связи между строением пленок и эффективностью в отношении фото- и электропроводимости, конструирование фуллерен-полимерных композитов с регулируемыми характеристиками. Результаты работ данного коллектива широко известны как в российских, так и международных научных кругах.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

установлен субаддитивный характер изменения средней поляризуемости аддуктов фуллерена C_{60} с простыми аддендами при увеличении их числа. Изученные закономерности изменения поляризуемости были использованы для вывода аналитической зависимости средней поляризуемости производных фуллерена вида $C_{60}X_n$ от числа аддендов в молекуле;

охарактеризовано влияние взаимного расположения аддендов на среднюю поляризуемость в ряду региоизомерных бис- и гексакисаддуктов фуллерена C_{60} с циклопропановыми и азиридиновыми аддендами. Показано, что вклады фуллеренового каркаса и аддендов в среднюю поляризуемость молекул неодинаковы для разных региоизомеров: в пределах одного изомерного ряда оба вклада зависят от расстояния между аддендами; в ряду

фуллереновых аддуктов с различным числом одинаковых аддендов – зависят от степени функционализации каркаса фуллерена;

установлено наличие экзальтации поляризуемости димеров фуллерена C_{60}, не зависимо от природы и числа мостиковых групп, и возрастание средней поляризуемости димеров C_{60} при увеличении расстояния между фуллереновыми каркасами в молекуле;

выявлены корреляции между экзальтацией поляризуемости олигомеров $(C_{60})_n$ линейного и зигзагообразного строения и энергией их образования из фуллерена C_{60} – средняя поляризуемость изомерных гексамеров $(C_{60})_6$ возрастает с увеличением максимального расстояния между фуллереновыми каркасами в молекуле.

Теоретическая значимость исследования заключается в обнаружении корреляций между структурными особенностями экзоэдральных производных фуллерена C_{60} и их поляризуемостью. Аналитическое выражение, связывающее среднюю поляризуемость с числом присоединенных функциональных групп описывает поляризуемость производных фуллеренов разного размера с варьируемым количеством аддендов и различной химической природой аддендов.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что обнаруженные в работе корреляции могут быть использованы для конструирования производных фуллеренов с заранее известной поляризуемостью. Получаемые теоретические оценки поляризуемости могут быть использованы для анализа физико-химических процессов с участием соединений фуллеренов.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что теоретическая работа выполнена на высоком методическом уровне с применением современных квантовохимических методов моделирования и исследования структур. Полученные результаты не противоречат основным концепциям теоретической химии и соответствуют известным

экспериментальным данным о строении и поляризуемости фуллеренов и их соединений.

Идея работы базируется на анализе современной отечественной и зарубежной литературы, содержащей данные о значениях средней поляризуемости соединений фуллерена C_{60} различными аддендами, способах экспериментального и теоретического исследования поляризуемости производных C_{60}:

использованы современные данные научных исследований по теме диссертации, опубликованные в рецензируемых научных изданиях;

использованы современные системы сбора и обработки информации: электронные базы данных Scopus (Elsevier), Web of Science (Thomson Reuters), научная электронная библиотека eLIBRARY, а также полные тексты книг и статей в журналах.

Личный вклад соискателя состоит в сборе и анализе литературных данных по теме диссертации, планировании и проведении квантовохимических исследований с последующим анализом полученных расчетных данных, подготовке научных публикаций. Вывод аналитической зависимости $\alpha(C_{60}X_n) = f(n)$ осуществлен совместно с д.х.н. Д.Ш. Сабировым. Расчетные данные для проведения сайт-специфического анализа аддуктов $C_{60}X_2$ предоставлены к.х.н. Э.М. Хамитовым.

На заседании 2 июня 2021 г. диссертационный совет пришел к следующему выводу, что совокупность защищаемых положений позволяет заключить, что диссертация Тухбатуллиной Алины Асхатовны «Строение и поляризуемость экзоэдральных производных фуллерена C_{60}» имеет важное научное и практическое значение для решения актуальных проблем физической химии фуллеренов, связанных с прогнозированием их физико-химических свойств на основе данных об их строении. Рассматриваемая диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, в которой решена актуальная научная проблема по установлению связи между строением и средней поляризуемостью одно- и многокаркасных экзоэдральных

производных фуллерена C_{60}. Диссертационная работа полностью соответствует критериям, содержащимся в пунктах 9-11, 13-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, и отсутствует заимствованный материал без ссылок на авторов или источники заимствования.

На заседании 2 июня 2021 г. (протокол № 49) диссертационный совет принял решение присудить Тухбатуллиной Алине Асхатовне ученую степень кандидата химических наук по научной специальности 02.00.04 – Физическая химия (химические науки).

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 22 человек, из них 7 докторов наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия, участвовавших в заседании, из 29 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 22, против – нет, воздержавшихся – нет.

Председатель диссертационного совета
Д 002.198.02, д.х.н., проф.
_____ / Хурсан Сергей Леонидович

Ученый секретарь диссертационного совета
Д 002.198.02, к.х.н.
_____ / Цыпышева Инна Петровна

2 июня 2021 г.