

Председателю диссертационного совета 24.1.218.02, созданного на базе Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук

д-ру хим. наук, проф. Хурсану С.Л.

**Заключение экспертной комиссии диссертационного совета 24.1.218.02 по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук на базе Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук**

от «28» марта 2022 г. по ознакомлению с диссертационной работой Бикмухаметова Камиля Шамиловича, представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия

**Председатель комиссии:**

д-р хим. наук, проф. Хурсан Сергей Леонидович

**Члены комиссии:**

д-р хим. наук Сафиуллин Рустам Лутфуллович

д-р хим. наук, проф. Шарипов Глюс Лябибович

Комиссия диссертационного совета 24.1.218.02, ознакомившись с диссертационной работой ассистента кафедры «Транспорт и хранение нефти и газа» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет» Бикмухаметова Камиля Шамиловича на тему «Молекулярная и кристаллическая структура производных 1,2,4,5,7-тетраоксазоканов и тетраоксаспирододекан диаминов», представленной на

соискание ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия, пришла к следующему заключению:

работа по своему содержанию соответствует научной специальности 1.4.4. Физическая химия и может быть принята к защите в диссертационный совет 24.1.218.02, созданного на базе Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, на соискание ученой степени кандидата химических наук.

Представленная диссертация посвящена изучению молекулярной и кристаллической структуры 1,2,4,5,7-тетраоксазоканов и тетраоксаспирододекан диаминов.

Диссертационное исследование соответствует паспорту научной специальности 1.4.4 Физическая химия, а именно пунктам:

1. Экспериментальное определение и расчёт параметров строения молекул и пространственной структуры веществ.

4. Теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия.

Соответствие содержания диссертационной работы специальности 1.4.4 Физическая химия, по которой она представляется к защите, подтверждается апробацией работы, её научной новизной и практической значимостью. Диссертация представляет собой самостоятельно выполненное автором научное исследование, результаты которого обеспечивают решение научной задачи по установлению структуры ряда циклических органических пероксидов и выявлению орбитальных взаимодействий, определяющих строение исследуемых соединений, что является важным для развития современной структурной химии.

Комиссия отмечает следующие **основные научные результаты диссертационной работы:**

1. Впервые проведён систематический анализ молекулярного и кристаллического строения тринадцати новых производных тетраоксазоканов и четырёх тетраоксаспирододекан диаминов.
2. Выявлены предпочтительные конформации в твёрдой и газовой фазе для исследованных систем. Выявлено, что производные тетраоксазоканов в кристаллическом состоянии принимают три типа конформаций пероксидного цикла: *твист-ванна-кресло*, *кресло-кресло* и *ванна-кресло*. Обнаружено, что тетраоксепановое кольцо принимает конформацию *твист-кресло* во всех соединениях независимо от типа галогена и его положения на бензольных фрагментах.
3. Обнаружены и количественно оценены стереоэлектронные взаимодействия  $n_O \rightarrow \sigma^*_{C-O}$ ,  $n_O \rightarrow \sigma^*_{C-N}$ ,  $n_N \rightarrow \sigma^*_{C-O}$  и  $n_O \rightarrow \sigma^*_{O-C}$  в производных тетраоксазоканов и тетраоксаспирододекан диаминов.
4. Установлено, что энергия взаимодействия  $n_O \rightarrow \sigma^*_{C-N}$  в производных тетраоксазокана больше чем в тетраоксаспирододекан диаминах вследствие максимального взаимодействия неподелённой электронной пары атома кислорода с  $\sigma^*$ -орбиталью C–N связи, достигаемого в результате *антиперипланарной* ориентации неподелённой электронной пары атома кислорода и  $\sigma^*$ -орбитали C–N связи в структурах производных тетраоксазокана, в отличие от тетраоксаспирододекан диаминов, где неподелённая электронная пара атома кислорода и  $\sigma^*$ -орбиталь C–N связи находятся в *gаш*-положении.
5. Выполнена количественная оценка амплитуд складчатости циклов по методу Кремера-Попла. Выявлено, что полученные значения взаимосвязаны с типами формируемых внутримолекулярных взаимодействий.

### **Практическая и научная полезность результатов диссертационной работы.**

1. Расширены фундаментальные основы кристаллографического знания в области молекулярной и кристаллической структуры пероксидов.

2. Установленные особенности пространственного строения новых производных тетраоксазоканов и тетраоксаспиродекан диаминов будут способствовать поиску и целенаправленной разработке новых фармакологически перспективных соединений для медицины, обладающих потенциальной противомаларийной и противоопухолевой активностью.

**Требования ВАК Минобрнауки России к публикации основных научных результатов диссертации на соискание ученой степени доктора (кандидата) химических наук соискателем Бикмухаметовым Камилем Шамиловичем выполнены. Основные результаты диссертационной работы достаточно полно изложены в следующих печатных работах автора:**

1. Tyumkina, T.V. Synthesis, Molecular Structure, Conformation and Biological Activity of Ad-substituted N-Aryl-tetraoxaspiroalkanes / T.V. Tyumkina, N.N. Makhmudiyarova, G.M. Kiyamutdinova, E.S. Meshcheryakova, **K.Sh. Bismukhametov**, M.F. Abdullin, L.M. Khalilov, A.G. Ibragimov, U.M. Dzhemilev // *Tetrahedron*. – 2018. – V. 74. – P. 1749–1758.
2. Tulyabaev, A.R. What is responsible for conformational diversity in single-crystal tetraoxazaspiroalkanes? X-Ray, DFT, and AIM approaches / A.R. Tulyabaev, **K.Sh. Bismukhametov**, E.S. Meshcheryakova, N.N. Makhmudiyarova, R.Sh. Rakhimov, L.M. Khalilov // *CrystEngComm*. – 2018. – V. 20. – P. 3207–3217.
3. Khalilov, L.M. How the oxazole fragment influences the conformation of the tetraoxazocane ring in a cyclohexanespiro-3'-(1,2,4,5,7-tetraoxazocane): single crystal X-ray and theoretical study / L.M. Khalilov, E.S. Meshcheryakova, **K.Sh. Bismukhametov**, N.N. Makhmudiyarova, K.R. Shangaraev, A.R. Tulyabaev // *Acta Cryst. C*. – 2019. – V. C75. – P. 1439–1447.
4. Khalilov, L.M. Twist-chair conformation of the tetra-oxepane ring remains unchanged in tetraoxaspirododecane diamines / L.M. Khalilov, E.S. Meshcheryakova, **K.Sh. Bismukhametov**, N.N. Makhmudiyarova, K.R. Shangaraev and A.R. Tulyabaev // *Acta Cryst. C*. – 2020. – C76. – P. 276–286.

Результаты проверки диссертационной работы в системе поиска заимствованного материала без ссылки на автора и (или) источник заимствования, результатов научных работ, выполненных соискателем

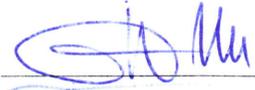
ученой степени в соавторстве, без ссылок на соавторов (использована система Антиплагиат) показали, что оригинальность текста диссертации Бикмухаметова Камиля Шамиловича на тему «Молекулярная и кристаллическая структура производных 1,2,4,5,7-тетраоксазоканов и тетраоксаспирододекан диаминов» составляет 88.64 %.

Диссертационная работа Бикмухаметова Камиля Шамиловича соответствует научной специальности 1.4.4 Физическая химия, отвечает требованиям ВАК Минобрнауки России, предъявляемым к кандидатским/докторским диссертациям, и рекомендуется к защите в совете 24.1.218.02.

Диссертация представляется к защите впервые.

Председатель комиссии  д-р хим. наук, проф, Хурсан С.Л.

Члены комиссии:

 д-р хим. наук Сафиуллин Р.Л.  
 д-р хим. наук, проф. Шарипов Г.Л.

« 28 » марта 20 22 г.

## Заключение

о допустимости выявленного объема текстовых совпадений между текстом диссертации и источниками, авторство которых установлено, для рассмотрения рукописи диссертации как оригинальной научной (квалификационной) работы по диссертации Бикмухаметова Камиля Шамиловича на тему «Молекулярная и кристаллическая структура производных 1,2,4,5,7-тетраоксазоканов и тетраоксаспирододекан диаминов» представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Экспертная комиссия в составе д-р хим. наук, проф, Хурсан С.Л., д-р хим. наук, проф. Сафиуллин Р.Л. д-р хим. наук, проф. Шарипов Г.Л. рассмотрела представленный для проведения экспертизы комплект документов в составе:

1. Полный текст диссертации в электронном виде.
2. Распечатка текста диссертации,
3. Автоматический отчет системы «Антиплагиат» о выявленных текстовых совпадениях с указанием ссылок на источники совпадающих фрагментов.

Отчёт о выявленных текстовых совпадениях и о количественно оцененной степени близости каждого выявленного совпадения, проведенной в системе Антиплагиат ([www.antiplagiat.ru](http://www.antiplagiat.ru)) выявил 11.36 % текстовых совпадений. Детальная экспертиза текстовых совпадений с учётом ссылок на источники совпадающих фрагментов, детальной информации о совпадающих фрагментах показала, что выявленные совпадения представляют собой цитаты собственных материалов и корректное цитирование источников с указанием ссылок на них, таким образом, на основании анализа информации о совпадающих фрагментах, их источниках и количества оцененной степени близости каждого выявленного совпадения комиссия постановила что выявленный объём текстовых совпадений 11.36 % допустим для рассмотрения рукописи диссертации как оригинальной научной работы. Диссертация Бикмухаметова Камиля Шамиловича на тему «Молекулярная и кристаллическая структура производных 1,2,4,5,7-тетраоксазоканов и

тетраоксаспирододекан диаминов» представленная на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия может считаться полностью оригинальной работой.

**Приложение:** автоматический отчёт о проверке на плагиат диссертации Бикмухаметова Камиля Шамиловича на тему «Молекулярная и кристаллическая структура производных 1,2,4,5,7-тетраоксазоканов и тетраоксаспирододекан диаминов» представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия (система антиплагиат [www.antiplagiat.ru](http://www.antiplagiat.ru)).

Пояснения к автоматическому отчету:

1. Источники № 1–5,7,9,11,14,20,23,28,31,32,35,36,58,64,65 – содержат общепринятые аббревиатуры и расшифровки, часто употребляемые фразы и словосочетания, не являющиеся предметом авторской работы,

2. Источники № 7,45,46 – ссылки на публикации автора диссертации.

3. Источники № 6,8,29,41,46,49,52 – являются ссылками на научную литературу по данной тематике, оформленными по гост.

Председатель комиссии:

д-р хим. наук, проф, Хурсан Сергей Леонидович

Члены комиссии:

д-р хим. наук Сафиуллин Рустам Лутфуллович

д-р хим. наук, проф. Шарипов Глюс Лябибович

Председатель диссертационного совета 24.1.218.02

д-р хим. наук, проф, Хурсан Сергей Леонидович

Учёный секретарь диссертационного совета 24.1.218.02

канд. хим. наук Цыпышева И.П.

«28» марта 2022г.