

Заместителю председателя диссертационного  
совета 24.1.218.02 при УФИЦ РАН  
д-ру хим. наук, доц. Парфеновой Л.В.

**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 «29» июня 2024 года по ознакомлению с диссертационной работой  
Ахметшиной Екатерины Степановны, представленной на соискание  
ученой степени кандидата химических наук по специальности  
1.4.4. Физическая химия

**Председатель комиссии** – д-р хим. наук, с.н.с. Сафиуллин Рустам Лутфуллович

**Члены комиссии:**

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

д-р хим. наук, проф. Халилов Леонард Мухибович

Комиссия диссертационного совета 24.1.218.02, ознакомившись с диссертационной работой младшего научного сотрудника лаборатории химической физики Уфимского Института Химии – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук Ахметшиной Екатерины Степановны на тему «Развитие концепции полного набора гомодесмотических реакций для анализа молекулярной энергетике органических веществ с невалентными эффектами стерической и электронной природы» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия, пришла к следующему заключению:

**1. Актуальность темы**

Определение индивидуальных термодинамических характеристик органических соединений и исследование на этой основе соотношений типа «структура - свойство» являются важной задачей физической органической химии. Большинство экспериментальных методов получения термодинамических характеристик вещества (энтальпия образования, энергия диссоциации связи, энергия напряжения и пр.) сопровождаются высокими временными и ресурсными затратами, поэтому

альтернативными методами являются теоретические методы расчета данных характеристик. Сочетая в себе простоту, экспрессность, высокую точность и возможность алгоритмизации и автоматизации, данные методы становятся все более актуальными и востребованными в исследовательской практике. В диссертации предложено развитие такого теоретического метода – концепции полного набора гомодесмотических реакций.

## **2. Личное участие соискателя в получении результатов, изложенных в диссертации**

Личный вклад Ахметшиной Е.С. состоит в поиске, анализе и обобщении научной литературы по теме диссертации; проведении расчетов, разработке методики, интерпретации полученных результатов; формулировке основных научных выводов; представлении результатов работы на конференциях; подготовке материалов к публикации в научных журналах.

## **3. Достоверность результатов проведенных исследований**

Достоверность представленных результатов обеспечена высоким методическим уровнем проведения работы и основана на значительном объеме расчетных данных, полученных с использованием высокоточных квантово-химических методов (G3, G4, W1BD, M06-2X/cc-pVTZ,), подтверждена корреляцией с экспериментальными литературными данными. Анализ «структура-свойство» проведен с использованием разнообразных методов анализа распределения электронной плотности – NBO, AIM, GIAO.

## **4. Научная новизна и практическая значимость**

Установлена применимость концепции полного набора ГДР к определению энтальпий образования и энергий диссоциации связей для стерически затрудненных органических соединений при условии выполнении баланса по невалентным эффектам.

Разработана методика количественного определения энергий невалентных взаимодействий при условии их нескомпенсированности в гомодесмотической реакции.

Впервые обнаружен эффект стабилизации в алкильных радикалах - слабое С-Н...π 1,5-взаимодействие Н-атома *gauche*-ориентированной группы с неспаренным электроном радикального центра

Получены следующие значимые результаты:

- энтальпии образования и энергии напряжения циклических органических соединений (65 циклических углеводородных и гетероциклических насыщенных и ненасыщенных соединений, содержащих от 3 до 6 атомов углерода в цикле, с различными заместителями)
- энтальпии образования свободных алкильных радикалов (C<sub>5</sub>-C<sub>9</sub> первичные, вторичные и третичные структуры нормального строения и метил-замещенные)

- энергии диссоциации связей C-H и C-CH<sub>3</sub> для алканов, соответствующих радикалам C<sub>5</sub>-C<sub>9</sub>)

## **5. Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных соискателем**

Основные научные результаты диссертации изложены в 7 статьях, из них 4 статьи в журналах, входящих в международные базы данных Web of Science и Scopus.

Требования к публикации основных научных результатов диссертации, предусмотренные пунктами 11 и 13 Положения о присуждении ученых степеней, выполнены.

### **Наиболее значимыми являются следующие работы:**

1. Ахметшина, Е.С. Использование формализма реакций разделения групп для анализа невалентных эффектов органических соединений: трехчленные углеродные циклы. / Е.С. Ахметшина, С.Л. Хурсан // Известия Академии Наук: Серия Химическая. – 2020. – №1. – С. 76-83.
2. Akhmetshina, E.S. Complete Set of Homodesmotic Reactions for the Analysis of Non-Valence Effects in the Three-to-Six-Membered Cyclic Organic Compounds / E.S. Akhmetshina, S.L. Khursan // *Thermochimica Acta*. – 2020. – V. 685. – 178541.
3. Khursan, S.L. Interplay of the Ring and Steric Strains in the Highly Substituted Cyclopropanes / S.L. Khursan, E.S. Akhmetshina // *Journal of Physical Chemistry A*. – 2021. – V. 125. – №35. – P. 7607-7615.
4. Akhmetshina, E.S. Theoretical Determination of the Standard Enthalpies of Formation of Alkyl Radicals Using the Concept of a Complete Set of Homodesmotic Reactions / E.S. Akhmetshina, S.L. Khursan // *Journal of Molecular Graphics & Modelling*. – 2023. – V. 125. – 108615.

## **6. Специальность, которой соответствует диссертация**

Тема и содержание диссертации соответствуют паспорту специальности 1.4.4 – «Физическая химия» ВАК РФ:

п.10 - Создание и разработка методов компьютерного моделирования строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений квантовой механики, различных топологических и статистических методов, включая методы машинного обучения, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойства.

## **7. Ценность научных работ соискателя**

Полученные в диссертационной работе новые результаты соответствуют фундаментальным направлениям развития современной физической химии. Концепция

полного набора гомодесмотических реакций адаптирована для задачи определения молекулярной энергетики органических соединений со стерическими и электронными эффектами строения на примере расчета термодинамических характеристик циклических органических соединений и свободных алкильных радикалов. Определенные в диссертационной работе стандартные энтальпии образования, энергии невалентных взаимодействий, энергии диссоциации связей органических соединений различных классов и свободных радикалов существенно расширяют базу данных термодинамических величин.

#### **8. Проверка диссертации на наличие заимствованного материала без ссылки на авторов**

В тексте диссертации соискатель ссылается на авторов и источники заимствования материалов и отдельных результатов, также отмечает полученные лично и (или) в соавторстве результаты, что говорит о соблюдении требований, установленных **пунктом 14 Положения о присуждении ученых степеней**. Итоговая оценка оригинальности по системе проверки использования заимствованного материала без ссылки на автора составила 91.44%, что включает самоцитирование (3.55%) (заключение экспертной комиссии и автоматический отчет прилагаются).

### **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Экспертная комиссия единогласно решила, что диссертация Ахметшиной Екатерины Степановны на тему «Развитие концепции полного набора гомодесмотических реакций для анализа молекулярной энергетики органических веществ с невалентными эффектами стерической и электронной природы» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия, представляет собой диссертационную работу, которая полностью соответствует критериям п. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842 в действующей редакции. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, отсутствует заимствованный материал без ссылок на авторов или источники заимствования. Текст диссертации, представленный в диссертационный совет 24.1.218.02, идентичен тексту диссертации, размещенному на сайте организации ([www.ufaras.ru](http://www.ufaras.ru)). Диссертация Ахметшиной Екатерины Степановны на тему «Развитие концепции полного набора гомодесмотических реакций для анализа молекулярной энергетики органических веществ с невалентными эффектами стерической и электронной природы» может быть принята

диссертационным советом 24.1.218.02 к защите по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.

**Рекомендовать официальными оппонентами следующих специалистов:**

**Туровцева Владимира Владимировича**, доктора физ.-мат. наук, доцента, заведующего кафедрой медицинской биофизики Федерального государственного бюджетного учреждения высшего образования "Тверской государственной медицинской академии" Министерства здравоохранения Российской Федерации 170100, Тверская область, Тверь, Советская улица, дом 4 +7 (4822) 32-11-70 сайт: <https://tvngmu.ru/>; e-mail: [turtsma@tversu.ru](mailto:turtsma@tversu.ru); ректор Тверского ГМУ доктор медицинских наук, профессор Чичановская Леся Васильевна

**Зими́на Ю́рия Степа́новича**, доктора химических наук, профессора кафедры физической химии и химической экологии Института химии и защиты в чрезвычайных ситуациях Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Уфимский университет науки и технологий» (УУНиТ), 450076 Республика Башкортостан, Уфа, улица Заки Валиди, дом 32 +7 (347) 226-96-94; сайт: <https://uust.ru/>; e-mail: [ZiminYUS@uust.ru](mailto:ZiminYUS@uust.ru); ректор УУНиТ, доктор химических наук, профессор Захаров Вадим Петрович

**Рекомендовать ведущую организацию:**

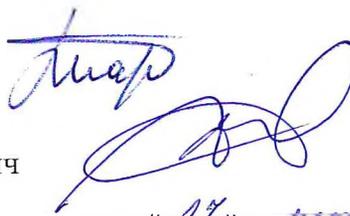
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет», 420015, Казань, ул. Карла Маркса, дом 68; тел.: +7 (843) 231-42-16; сайт: <https://www.kstu.ru/>; e-mail: [office@kstu.ru](mailto:office@kstu.ru); ректор КНИТУ, доктор технических наук, доцент Казаков Юрий Михайлович

**Председатель комиссии** – д-р хим. наук, с.н.с. Сафиуллин Рустам Лутфуллович



**Члены комиссии:**

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



д-р хим. наук, проф. Халилов Леонард Мухибович

« 27 » июня 2024 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 Ахметшиной Екатерины Степановны на тему «Развитие концепции полного набора гомодесмотических реакций для анализа молекулярной энергетики органических веществ с невалентными эффектами стерической и электронной природы», представленной на соискание ученой степени кандидата наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Экспертная комиссия в составе

**председателя комиссии** – д-ра хим. наук, с.н.с. Сафиуллина Рустама Лутфулловича,

**членов комиссии** – д-ра хим. наук, проф. Шарипова Глюса Лябибовича, д-ра хим. наук, проф. Халилова Леонарда Мухибовича

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.

Отчет 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 8,28 % текстовых совпадений. Содержательная экспертиза текстовых совпадений с учетом 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 объем текстовых совпадений 8,28 % допустим для рассмотрения рукописи диссертации как оригинальной научной работы. Диссертация Ахметшиной Екатерины Степановны на тему «Развитие концепции полного набора гомодесмотических реакций для анализа молекулярной энергетики органических веществ с невалентными эффектами стерической и электронной природы», представленной на соискание ученой степени кандидата наук по специальности 1.4.4. Физическая химия может считаться полностью оригинальной работой.

**Приложение:** Автоматический отчет о проверке на плагиат диссертации «Развитие концепции полного набора гомодесмотических реакций для анализа молекулярной энергетики органических веществ с невалентными эффектами стерической и электронной природы» представленной на соискание ученой степени кандидата наук по специальности .4.4. Физическая химия (система антиплагиат [www.antiplagiat.ru](http://www.antiplagiat.ru)).

Пояснения к автоматическому отчету:

1. Источники № 03, 09, 10, 12, 13, 20 – ссылки на публикации автора диссертации.
2. Источники № 01, 02, 04, 08, 11, 14, 15, 19, 21, 22, 24, 26, 28, 29, 31-36, 38, 41, 42, 44-50, 55-58, 63-86 – содержат общепринятые аббревиатуры и расшифровки, часто употребляемые фразы и словосочетания, не являющиеся предметом авторской работы.

**Председатель комиссии** – д-р хим. наук, с.н.с. Сафиуллин Рустам Лутфуллович

**Члены комиссии:**

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

д-р хим. наук, проф. Халилов Леонард Мухибович

Заместитель председателя диссертационного совета 24.1.218.02

д-р хим. наук, доц.



Парфенова Л.В.

Ученый секретарь диссертационного совета 24.1.218.02

д-р хим. наук, проф.

Шарипов Г.Л.

«27» июня 2024 г.