

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет»

от 25 сентября 2018г.

Диссертация «Закономерности организации кристаллов фосфониевых солей и комплексов с переносом заряда на основе тетрафтортетрациано-парахинодиметана» выполнена на кафедре высокомолекулярных и элементоорганических соединений Химического института им. А.М. Бутлерова ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет».

В 2012 году Исламов Даут Ринатович с отличием окончил химический институт им. А.М. Бутлерова ФГАОУ ВПО «Казанский (Приволжский) федеральный университет» по специальности «Химия».

В период подготовки диссертации с 2012 г. по 2015 г. соискатель Исламов Даут Ринатович являлся аспирантом кафедры высокомолекулярных и элементоорганических соединений Химического института им. А.М. Бутлерова ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет» и в настоящее время работает в лаборатории синтетических физиологически активных веществ ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет». Удостоверение о сдаче кандидатских экзаменов по иностранному языку (английский) и истории философии науки (химические науки) выдано в 2017 г. ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», справка о сдаче кандидатского экзамена по специальности выдана в 2018 г. ФИЦ КазНЦ РАН ИОФХ им. А.Е. Арбузова.

Научный руководитель – Катаева Ольга Николаевна, доктор химических наук, старший научный сотрудник Химического института им. А.М. Бутлерова ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет».

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

– Личное участие соискателя ученой степени в получении результатов, изложенных в диссертации

Исламов Д.Р. самостоятельно выполнил экспериментальную часть работы. Автор принимал участие в формулировании основных проблем диссертации, в обсуждении, написании и оформлении статей и тезисов докладов. Выводы диссертации полностью основаны на теоретическом и экспериментальном материале, полученном соискателем в ходе выполнения работы. Диссертация написана единолично Исламовым Д.Р., имеет внутреннее единство и целостность и свидетельствует о решающем личном вкладе автора. В процессе выполнения работы Исламов Д.Р. провел глубокий анализ литературных данных по теме диссертации, получил и проанализировал большой объем экспериментальных результатов и проявил себя грамотным, хорошо подготовленным и целеустремленным исследователем, овладевшим современными физическими и физико-химическими методами исследования соединений.

– Степень достоверности результатов, приведенных соискателем ученой степени исследований

Результаты работы обоснованы и достоверны. Диссертационная работа Исламова Д.Р. выполнена на высоком теоретическом и экспериментальном уровне. Основные результаты и выводы работы логичны и сделаны на основе большого экспериментального материала. Достоверность результатов проведенных исследований основана на использовании экспериментальных данных рентгеноструктурного анализа монокристаллов, выполненного при температурах от 100 К до 293 К, низкими R-факторами и дополнительно подтверждена результатами квантово-химических расчётов.

– Новизна и практическая значимость результатов, проведенных соискателем ученой степени исследований

Научная новизна полученных результатов состоит в следующем:

Впервые охарактеризованы структуры комплексов с переносом заряда F₄-TCNQ – пицен, F₄-TCNQ – коронен (1:2) и F₄-TCNQ – коронен – ацетонитрил (1:1:1) и оценены степени переноса заряда в них.

Впервые исследована кристаллическая структура коронена при 100 К методом РСА.

Впервые показано влияние кристаллографической симметрии на высоту барьера вращения молекул в кристаллах.

Впервые выявлена общая закономерность, состоящая в том, что высота

барьера вращения выше при расположении частицы на кристаллографическом элементе симметрии, который входит в точечную группу молекулы, чем при расположении ее в общем положении или в частном положении с разупорядочиванием кристаллографической симметрии.

Впервые выявлена закономерность во взаиморасположении противоионов с три-трет-бутил-замещенными катионами фосфония в кристалле.

Практическая значимость работы:

Полученные в работе результаты исследования влияния кристаллографической симметрии на вращательные способности молекул в кристалле могут быть использованы для регулирования высоты барьера вращения молекул в кристаллах. На основе установленной закономерности предсказано, что среди всех полиморфов бензола барьер вращения будет наименьшим в кристаллах бензола V. Предсказано, что при сокристаллизации металлоценов, имеющих ось вращения 5 порядка, с энантиочистым компаньоном будет невозможно частное положение циклопентадиенильного кольца, что согласно обнаруженной закономерности приведет к более низкому барьеру вращения, чем в известных кристаллах, в которых циклопентадиенильное кольцо находится в частном положении на плоскости симметрии.

– Ценность научных работ соискателя ученой степени

Ценность научных работ соискателя заключается в установлении закономерности влияния кристаллографической симметрии на вращение молекул в кристаллах и объяснении явления. Установленная закономерность организации кристаллов фосфониевых солей вносит весомый вклад в развитие экспериментальных и теоретических взглядов в химию фосфорорганических соединений.

- Соответствие диссертации требованиям, установленным пунктом 14 «Положения о присуждении ученых степеней»

Результаты проверки диссертационной работы в системе «Антиплагиат» показали, что оригинальность текста диссертации Исламова Д.Р. составляет 90.69%. Диссертационная работа Исламова Даута Ринатовича на тему «Закономерности организации кристаллов фосфониевых солей и комплексов с переносом заряда на основе тетрафтортетрациано-пара-хинодиметана» отвечает требованиям п. 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г. (в ред. Постановления Правительства РФ от 21.04.2016 № 335). В диссертационной работе отсутствует заимствованный материал без ссылки на

автора и(или) источник заимствования, а также результаты научных работ, выполненных Исламовым Д.Р. в соавторстве, без ссылок на соавторов.

– Научная специальность и отрасль науки, которой соответствует диссертация

Диссертация Исламова Даута Ринатовича посвящена установлению закономерностей организации кристаллов фосфониевых солей и комплексов с переносом заряда на основе тетрафтортетрацианохинодиметана. Полученные результаты диссертационной работы полностью соответствуют специальности 02.00.04 – физическая химия (химические науки) и удовлетворяет п. 1. – «Экспериментальное определение и расчет параметров строения молекул и пространственной структуры веществ» паспорта специальности 02.00.04 – физическая химия.

– Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных соискателем ученой степени

Автором по теме диссертации опубликовано 6 статей в журналах, входящих в Перечень рецензируемых научных изданий, установленный Министерством образования и науки Российской Федерации и входящих в международные реферативные базы данных и системы цитирования, тезисы 4 докладов на международных и всероссийских конференциях. Опубликованные работы полно и правильно отражают основное содержание диссертации.

Публикации в рецензируемых изданиях, рекомендованных ВАК для размещения материалов диссертаций:

1. Mahns B. Crystal Growth, Structure, and Transport Properties of the Charge-Transfer Salt Picene/2, 3, 5, 6-Tetrafluoro-7, 7, 8, 8-tetracyanoquinodimethane / B. Mahns, O. Kataeva, **D. Islamov**, S. Hampel, F. Steckel, C. Hess, M. Knupfer, B. Büchner, C. Himcinschi, T. Hahn, R. Renger, J. Kortus // Crystal Growth & Design – 2014. – Т. 14. – №. 3. – С. 1338-1346. авт. вклад – 0.4 усл. печ. л. из 0.8.
2. Kataeva, O. Crystal growth, dynamic and charge transfer properties of new coronene charge transfer complexes / O. Kataeva, M. Khrizanforov, Y. Budnikova, **D. Islamov**, T. Burganov, A. Vandyukov, K. Lyssenko, B. Mahns, M. Nohr, S. Hampel, M. Knupfer // Crystal Growth & Design – 2015. – V. 16, N 1. – P. 331-338. авт. вклад – 0.5 усл. печ. л. из 0.8.
3. **Islamov D. R.** Symmetry influence on the rotation of molecules in crystals. / **D. R. Islamov**, V. G. Shtyrlin, N. Y. Serov, I. V. Fedyanin, K. A. Lyssenko // Crystal Growth & Design – 2017. – Т. 17. – №. 9. – С. 4703-4709. авт. вклад – 0.7 усл. печ. л. из 0.8.
4. Romanov, S. R. Triphenylphosphine in reactions with ω -haloalkylcarboxylic acids / S. R. Romanov, A. F. Aksunova, **D. R. Islamov**, A. B. Dobrynin, D. B. Krivolapov, O. N.

- Kataeva, Yu. V. Bakhtiyarova, O. I. Gnezdilov, I. V. Galkina, V. I. Galkin // Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements – 2016. – V. 191, N 11-12. – P. 1637-1639. авт. вклад – 0.1 усл. печ. л. из 0.2.
5. Bakhtiyarova, Y. V. Synthesis, structure, and biological activity of dicarboxylate phosphobetaines / Y. V. Bakhtiyarova, R. R. Minnullin, M. V. Morozov, D. I. Bakhtiyarov, **D. R. Islamov**, A. B. Dobrynin, O. N. Kataeva, R. A. Cherkasov, V. I. Galkina, Galkina, I. V. // Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements – 2016. – V. 191, N 11-12. – P. 1633-1636. авт. вклад – 0.15 усл. печ. л. из 0.3.
 6. Zhiltsova, E. P. A new surfactant–copper (II) complex based on 1, 4-diazabicyclo [2.2.2] octane amphiphile. Crystal structure determination, self-assembly and functional activity / E. P. Zhiltsova, T. N. Pashirova, M. R. Ibatullina, S. S. Lukashenko, A. T. Gubaidullin, **D. R. Islamov**, O.N. Kataeva, M. P. Kutyreva, L. Y. Zakharova // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2018. – V. 20, N 18. – P. 12688-12699. авт. вклад – 0.4 усл. печ. л. из 0.8.

Тезисы и материалы конференций:

1. **Исламов, Д.Р.** Влияние кристаллографической симметрии на высоту барьера вращения / Д.Р. Исламов, Н.Ю. Серов, В.Г. Штырлин, О.Н. Катаева, И.В. Ананьев, К.А. Лысенко // Программа и тезисы VIII Национальной кристаллохимической конференции. 30 мая-3 июня 2016. - Москва: изд-во "Граница" - 2016. - С. 144. авт. вклад – 0.1 усл. печ. л. из 0.1.
2. **Исламов, Д.Р.** Строение амфифильных солей фосфония в кристалле / Д.Р. Исламов, О.Н. Катаева, Д.Б. Криволапов, В.В. Ермолаев, Д.М. Архипова, В.А. Милюков // Сборник Тезисов Всероссийской школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века» / Отв. ред. А.В.Герасимов. [Электронный ресурс] – Казань.: Изд-во КФУ, 2014. –С. 248. – 1 электрон. опт. Диск (CD-ROM). авт. вклад – 0.1 усл. печ. л. из 0.1.
3. **Исламов, Д.** Кристаллическая структура новых комплексов с переносом заряда пицен-F₄-TCNQ / Д. Исламов, О. Катаева, В. Mahns, S. Hampel, M. Knupfer, V. Büchner // Сборник Тезисов Всероссийской школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века» / Отв. ред. А.В.Герасимов. [Электронный ресурс] – Казань.: Изд-во КФУ, 2014. –С. 249. – 1 электрон. опт. Диск (CD-ROM). авт. вклад – 0.1 усл. печ. л. из 0.1.
4. **Исламов, Д.Р.** Связь кристаллографической симметрии и высоты барьера вращения / Д.Р. Исламов, В.Г. Штырлин, И.В. Федянин, К.А. Лысенко, О.Н. Катаева, Н.Ю. Серов // Сборник Тезисов II Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века» / Отв. ред. А.В.Герасимов. [Электронный ресурс] – Казань.: Изд-во КФУ, 2016. –С. 244. – 1 электрон. опт. Диск (CD-ROM). авт. вклад – 0.1 усл. печ. л. из 0.1.

Опубликованные материалы написаны в соавторстве с научным руководителем О.Н. Катаевой, В.Г. Штырлиным, К.А. Лысенко, И.В. Федяниным, Н.Ю. Серовым, И.В. Ананьевым, Д.Б. Криволаповым, А.Б. Добрыниным, М. Knupfer, В. Büchner, Ю.Г. Будниковой И.В. Галкиной, В.И. Галкиным, Р.А. Черкасовым, В.А. Милюковым, S. Hampel, F. Steckel, C. Hess, C. Nimcinschi, T. Hahn, R. Renger, M. Хризанфоровым, Т. Бургановым, В. Mahns, M. Nohr, С.Р. Романовым, А.Ф. Аксуновой, Ю.В. Бахтияровой, О.И. Гнездиловым, Р.Р. Миннуллиным, М.В. Морозовым, Д.И. Бахтияровым, В.В. Ермолаевым, Д.М. Архиповой, А. Вандюковым, J. Kortus. Соавторы не возражают против использования данных совместных публикаций в диссертации Исламова Д.Р.

Диссертационная работа Исламова Даута Ринатовича на тему «Закономерности организации кристаллов фосфониевых солей и комплексов с переносом заряда на основе тетрафтортетрациано-пара-хинодиметана» полностью соответствует критериям пп. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», предъявленным к кандидатским диссертациям, и рекомендуется к защите в диссертационном совете на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Заключение принято на расширенном заседании кафедры физической химии и высокомолекулярных и элементоорганических соединений Химического института им. А.М. Бутлерова ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет».

Присутствовало на заседании – 25 чел., из них с правом решающего голоса - 22 чел. Результаты голосования: «за» - 22 чел., «против» - 0 чел., «воздержалось» - 0 чел., протокол № 4 от «25» сентября 2018 г.

/Соломонов Б.Н./

/ Бусыгина Н.В./