

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д **022.004.02**,
на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки
«Федеральный исследовательский центр
«Казанский научный центр Российской академии наук»
(Министерства науки и высшего образования Российской Федерации)
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

Аттестационное дело № _____

Решение диссертационного совета от 30 сентября 2020 года, протокол № 28

о присуждении Латыпову Камилу Фаридовичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация **«Прогноз потенциалов ионизации и средства к электрону на основе интегральных спектроскопических дескрипторов для ряда азот- и кислородсодержащих соединений»** по специальности 02.00.04 – Физическая химия, принята к защите 17 июля 2020 года, протокол № 24, диссертационным советом Д 022.004.02, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук» (ФИЦ КазНЦ РАН), 420111, Республика Татарстан, г. Казань, ул. Лобачевского, д. 2/31, приказ Минобрнауки РФ № 553/нк от 23.05.2018.

Соискатель, **Латыпов Камил Фаридович**, 1985 года рождения, в 2008 году окончил Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Башкирский государственный университет» по специальности «Физика»; в период с 2008 по 2011 гг. обучался в очной аспирантуре Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Башкирский государственный университет» по специальности 05.13.18 - Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. В настоящее время Латыпов К.Ф. является старшим преподавателем кафедры

физической электроники и нанофизики физико-технического института Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет».

Диссертация выполнена на кафедре физической электроники и нанофизики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет».

Научный руководитель – доктор химических наук Доломатов Михаил Юрьевич, профессор кафедры физической электроники и нанофизики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет».

Официальные оппоненты:

Волошин Александр Иосифович, гражданин Российской Федерации, доктор химических наук, старший эксперт Общества с ограниченной ответственностью «РН-Башкирский научно-исследовательский и проектный институт нефти»,

Кобраков Константин Иванович, гражданин Российской Федерации, доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой органической химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский государственный университет имени Алексея Николаевича Косыгина (Технологии. Дизайн. Искусство)»

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук (г. Томск), в своем положительном заключении, составленном и подписанном к.х.н. Петренко Т.И., д.х.н. Сагаченко Т.А. и к.т.н. Богословским А.В., указала, что в работе Латыпова Камила Фаридовича содержится решение научно-технической задачи экспресс определения потенциалов ионизации и сродства к электрону по интегральным спектроскопическим дескрипторам, разработаны соответствующие методики

и определены эмпирические коэффициенты установленных зависимостей для ряда азот- и кислородсодержащих соединений. Полученные результаты вносят существенный вклад в развитие научного направления физическая химия органических соединений.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается общностью тематики исследования диссертационной работы и областью научных интересов, как ведущей организации, так и официальных оппонентов, являющихся ведущими специалистами в области спектроскопии азот- и кислородсодержащих гетероорганических соединений, высокомолекулярных азот- и кислородсодержащих соединений нефти и разработки баз данных и компьютерных расчётов свойств органических соединений.

На автореферат диссертации поступило 10 отзывов, все положительные. Отзывы получены от:

- д.т.н., профессора Бадиковой А.Д. (Уфимский государственный нефтяной технический университет), *отзыв содержит замечания по оформлению автореферата;*
- д.т.н. Бобринецкого И.И. (Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники»), *отзыв содержит вопросы: чем вызвана разница в коэффициентах детерминации R^2 для разных соединений, почему потенциал ионизации и сродство к электрону для одних соединений описываются моделью лучше, чем для других;*
- д.х.н. Борисова И.М. (Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы), *без замечаний;*
- д.ф.-м.н. Бычкова И.В. (Челябинский государственный университет), *в качестве недостатка работы отмечено ее использование для узкого круга наночастиц нефтяных асфальтенов;*

- к.ф.-м.н. Гафурова М.Р. (Казанский (Приволжский) федеральный университет), в качестве замечания отмечено отсутствие данных по экспериментальным исследованиям изученных образцов рядом спектральных методов;
- д.т.н. Кемалова А.Ф. (Казанский (Приволжский) федеральный университет), в качестве замечания отмечено отсутствие в диссертации данных, связанных с донорно-акцепторными свойствами серосодержащих соединений;
- к.т.н. Мукаевой Г.Р. (Уфимский государственный авиационный технический университет)», отзыв содержит замечания по оформлению автореферата;
- д.ф.-м.н. Нурахметова Т.Н. (Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева), в качестве недостатка работы отмечено ограничение объектов исследования лишь органическими соединениями, предложено распространить развиваемую методологию на неорганические полупроводники и твердые тела, например металлы;
- д.ф.-м.н. Скворцова М.А. (Сколковский институт науки и технологий), автору отзыва представляется неочевидными объяснения наблюдаемых закономерностей связи ИСО и ИАКП с ПИ и СЭ явлениями квантовой запутанности, также отмечено отсутствие исчерпывающего теоретического доказательства зависимости ПИ и СЭ от спектроскопических характеристик;
- д.х.н., профессора Халилова Л.М. (Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН), без замечаний.

Соискатель имеет 45 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликована 1 статья в реферируемом научном журнале, включенном в базу SCOPUS, 15 статей в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ, 5 статей – в изданиях, не входящих в перечень ВАК, включая международные журналы, 1 монография.

Диссертационная работа содержит технические ошибки об опубликованных соискателем работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации.

Список наиболее значимых работ соискателя:

1. Доломатов, М.Ю. Структура молекул асфальтенов и нанокластеров на их основе / М.Ю. Доломатов, С.А. Шуткова, Р.З. Бахтизин, **К.Ф. Латыпов**, М.М. Доломатова, К.А. Гильманшина, Б.Р. Бадретдинов // Нефтехимия. – 2020. – Т. 60. – №1. – С. 20-25.
2. Доломатов, М.Ю. Интегральные характеристики оптических спектров, как новый класс дескрипторов для сложных молекулярных систем / М.Ю. Доломатов, Э.А. Ковалева, **К.Ф. Латыпов**, М.М. Доломатова, Г.У. Ярмухаметова, Н.Х. Паймурзина // Бутлеровские сообщения. – 2019. - Т.57. - №1. –С. 1-14.
3. Латыпов, К.Ф. Определение потенциала ионизации гетероциклических молекул по оптическим спектрам поглощения электромагнитного излучения в видимой и УФ области / **К.Ф. Латыпов**, М.Ю. Доломатов // Фотоника. – 2017. – №4 (64). – С. 60-67.
4. Доломатов, М.Ю. Применение методов статистической радиофизики для оценки потенциалов ионизации и сродства к электрону молекул по спектрам поглощения электромагнитного излучения в петагерцевой области / М.Ю. Доломатов, **К.Ф. Латыпов** // Электромагнитные волны и электронные системы. – 2017. – Т. 22. – №2. – С. 54-61.
5. Доломатов, М.Ю. Оценка донорно-акцепторных свойств кислородсодержащих соединений и ширины запрещённой зоны в нанокластерах антрахинона по интегральным характеристикам сигналов оптических спектров поглощения / М.Ю., Доломатов, **К.Ф. Латыпов**, Р.З. Бахтизин // Бутлеровские сообщения. – 2018. – Т. 54. - № 5. – С. 32-39.

Диссертационный совет отмечает, что на основе выполненных соискателем исследований:

предложен новый подход, основанный на обнаруженных зависимостях интегральных спектроскопических дескрипторов (интегрального автокорреляционного параметра) с донорно-акцепторными свойствами для их прогнозирования в ряду кислород- и азотсодержащих органических соединений;

предложены экспериментальные методики определения донорно-акцепторных свойств молекул по ИАКП спектров;

предложена нелинейная двухпараметрическая регрессионная модель, использующая интегральную силу осцилляторов (ИСО) и общее количество электронов в молекуле, для прогноза потенциалов ионизации (ПИ) кислород- и азотсодержащих соединений: кетонов и альдегидов, спиртов и оксисоединений, пиридинов и акридинов, аминов, пиридазинов, фталазинов, замещённых антрахинонов;

обнаружена связь ИСО с индуктивным положительным и отрицательным эффектами в рядах замещённых фенолов, акридинов и антрахинонов.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

установлены феноменологические закономерности, связывающие энергии молекулярных орбиталей с интегральными широкополосными характеристиками поглощения электромагнитного излучения;

установлена связь ИСО широкополосного сигнала спектров поглощения в УФ и видимом диапазонах и общего числа электронов с донорно-акцепторными свойствами, которая передается двухпараметрическими нелинейными моделями для различных классов кислород- и азотсодержащих соединений. Для кетонов и альдегидов, фенолов, спиртов и оксисоединений, пиридинов и акридинов, аминов, пиридазинов и фталазинов получены линейные модели без учёта числа электронов;

показана возможность прогнозирования донорно-акцепторных свойств некоторых биологически активных соединений, таких как замещённые антрахиноны.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

предложен новый подход к определению донорно-акцепторных свойств кислород- и азотсодержащих высокомолекулярных соединений нефти – нефтяных асфальтенов и процесса взаимодействия молекул этих соединений;

апробированы дескрипторы, которые могут быть применены для прогнозирования донорно-акцепторных свойств сложных молекулярных систем – нефтяных асфальтенов;

разработана методика определения донорно-акцепторных свойств азот- и кислородсодержащих органических соединений, позволяющая определять эти характеристики в лабораторных условиях по данным оптических спектров поглощения на стандартном оборудовании без проведения сложных экспериментов и квантовых расчётов.

Обоснованность и достоверность полученных результатов обусловлена применением методов математической статистики, исследованием спектров с применением неэмпирических методов квантовой химии и специально разработанного алгоритма и авторской программы ФЕНИКС-ЛД[©]. Кроме того, использована информация современных БД по электронным спектрам поглощения органических соединений и многокомпонентных веществ в УФ, видимой и ближней ИК-областях спектра. Все выводы подтверждены расчетами статистических показателей и проверены на соответствие статистическим критериям.

Личный вклад соискателя заключается в постановке задач и планировании экспериментов, проведении экспериментальных исследований и анализе полученных данных, теоретических обоснованиях полученных закономерностей, формулировке выводов и написании статей. Автором разработаны алгоритмы и программы для компьютерной информационной системы ФЕНИКС-ЛД[©], включающую БД спектров и программные средства для соответствующей обработки электронных спектров органических соединений. Обсуждение результатов исследований, подготовка публикаций

осуществлялись совместно с соавторами.

Диссертационным советом сделан вывод о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям, установленным пп.9-11,13,14 Положения о присуждении ученых степеней (постановление Правительства РФ от 24.09.2013 № 842).

На заседании 30 сентября 2020 года диссертационный совет принял решение присудить Латыпову К.Ф. ученую степень кандидата химических наук.

При проведении открытого голосования диссертационный совет в количестве 19 человек, из них 6 докторов наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия, участвовавших в заседании, из 27 человек, входящих в состав совета, проголосовали за - 13, против - 6.

Председатель диссертационного совета,
академик



Синяшин Олег Герольдович

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат химических наук

Торопчина Асия Васильевна

30.09.2020