

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного образовательного
учреждения высшего образования
«Башкирский государственный университет».

Диссертация «Прогноз потенциалов ионизации и сродства к электрону на основе интегральных спектроскопических дескрипторов на примере ряда азот- и кислородсодержащих соединений» выполнена на кафедре физической электроники и нанофизики физико-технического института Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет».

В период подготовки диссертации соискатель Латыпов Камил Фаридович являлся аспирантом очной формы обучения в аспирантуре Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Башкирский государственный университет» по специальности 05.13.18 "Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ" (с 05.04.2008г. по 10.11.2011г.). В настоящее время Латыпов К.Ф. является старшим преподавателем кафедры физической электроники и нанофизики физико-технического института ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет».

В 2008 году окончил магистратуру очной формы обучения Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Башкирский государственный университет» по направлению подготовки 03.04.02 – Физика.

Справки о сдаче кандидатских экзаменов выданы 20.03.2020г. (физическая химия, английский язык, философия) Федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования «Башкирский государственный университет».

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор Доломатов Михаил Юрьевич, работает в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Башкирский государственный университет» – в должности профессора кафедры физической электроники и нанофизики физико-технического института.

По итогам обсуждения принято следующее заключение: диссертационная работа посвящена экспериментальному и теоретическому обоснованию использования интегральных спектроскопических параметров в качестве дескрипторов для прогноза потенциалов ионизации и сродства к электрону ряда азот- и кислородсодержащих органических соединений и разработке соответствующих методик.

В работе рассматривается установление количественных закономерностей между структурными характеристиками вещества, полученными из спектров поглощения в УФ и видимой областях, и его свойствами. В данном случае, потенциала ионизации (ПИ) и сродства к электрону (СЭ), которые также определяются структурой вещества.

Кроме того, работа затрагивает следующие области, перечисленные в паспорте специальности:

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

(в данном случае исследуется потенциал ионизации и сродство к электрону как характеристики строения молекулярных орбиталей. Все квантовые расчёты проводились с определением структурных параметров, т.к. проводилась оптимизация геометрии).

5. Изучение физико-химических свойств систем при воздействии внешних полей, а также в экстремальных условиях высоких температур и давлений

(в данном случае энергии ионизации и сродства к электрону определяются по интегральным характеристикам внешних электромагнитных полей в диапазоне 6,20...2,48 эВ. Поэтому работа соответствует пункту 5 паспорта специальности).

11. Физико-химические основы процессов химической технологии

(поскольку ПИ и СЭ являются характеристикой реакционной способности донорно-акцепторных реакций и орбитально-контролируемых реакций, которые широко использованы в технологии основного органического синтеза и нефтехимии, то работа затрагивает пункт 11 данного паспорта).

Таким образом, представленная работа соответствует паспорту специальности и может быть защищена по специальности 02.00.04 "Физическая химия".

Научная новизна диссертационной работы состоит в следующем:

1) Экспериментально и теоретически обосновано применение интегральной силы осциллятора (ИСО), интегрального автокорреляционного параметра спектра (ИАКП) как интегрального спектрального дескриптора (ИСД) для прогноза ПИ и СЭ молекул кислород- и азотсодержащих соединений, определённый по полосам поглощения в видимой и УФ области в диапазоне 190-700нм.

2) Впервые предложена нелинейная двухпараметрическая регрессионная модель для прогноза ПИ кислород- и азотсодержащих

соединений: кетонов и альдегидов, спиртов и окси-соединений, пиридинов и акридинов, аминов, пиридазинов, фталазинов, антрахинонов, связывающая ИСД и общее количество протонов (или электронов) в молекуле.

Непосредственно Латыповым К.Ф. проведена подготовка образцов, основная часть измерений методами электронной спектроскопии и анализ экспериментальных данных. Активное участие в постановке задач и планировании экспериментов, формулировке выводов и написании статей. Автором разработаны алгоритмы и программа для компьютерной информационной системы «ФЕНИКС-ЛД», включающую базу данных спектров и программные средства для соответствующей обработки электронных спектров органических соединений. Обсуждение результатов исследований, подготовка публикаций осуществлялись совместно с соавторами.

Основные результаты работы, представленные в диссертации, изложены в 42 печатных источниках, из них 1 – в научных журналах, включенных в базу данных SCOPUS, 14 – в реферируемых научных журналах, включенных в перечень ВАК; 1 – монография; 4 – в научных журналах, не входящих в перечень ВАК; 18 – в материалах докладов конференций, получено 2 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ и базы данных и 2 патента РФ.

Основные публикации:

Публикации в реферируемых журналах, входящие в перечень ВАК:

1. Долوماتов М.Ю. Влияние низших энергетических уровней на первые адиабатические потенциалы ионизации молекул азотосодержащих соединений /Долوماتов М.Ю., Латыпов К.Ф.//Известия Высших Учебных заведений Поволжский регион. Физико-математические науки. 2011. №3(19). С.69-76.
2. Латыпов К.Ф., Долوماتов, М.Ю. Взаимосвязь первых потенциалов ионизации и интегральных сил осцилляторов электронных спектров для азотосодержащих природных соединений // Башкирский химический журнал. 2011. Т.18. №3. С.143-146.

3. Латыпов, К.Ф., Доломатов, М.Ю. Определение первых адиабатических потенциалов ионизации молекул кислород- и азотсодержащих веществ по интегральным характеристикам электронных спектров // Башкирский химический журнал. 2012. Т.19. №1. С.144-148.
4. Латыпов К.Ф. Способ определения первых адиабатических потенциалов ионизации молекул азотсодержащих соединений по электронным спектрам поглощения /Латыпов К.Ф., Доломатов М.Ю. //Наукоёмкие технологии. 2012. Т.13. №5. С.48-52.
5. Латыпов К.Ф. Оценка сродства к электрону молекулярных кислородсодержащих органических полупроводников по интегральным характеристикам поглощения УФ и видимого излучения /Латыпов К.Ф., Доломатов М.Ю. // Электротехнические и информационные комплексы и системы, раздел наноэлектроника и квантовые информационные системы. 2013. Т.9. №1. С. 107-111.
6. Доломатов М.Ю. Нарушение квантового принципа ортогональности в атомных системах / Доломатов М.Ю., Латыпов К.Ф. // Электротехнические и информационные комплексы и системы, раздел наноэлектроника и квантовые информационные системы. 2013. Т.9. №4. С. 153-161.
7. Латыпов К.Ф. Статистическая корреляционная взаимосвязь энергий электронных состояний в атомных системах /Латыпов К.Ф., Доломатов М.Ю. // Вестник Башкирского Университета. Серия физика. 2014. Т.19. №1. С.19-23.
8. Латыпов К.Ф., Доломатов, М.Ю. Полуэмпирическая оценка энергии потенциалов ионизации металлов по интегральным коэффициентам отражения электромагнитного излучения // Электротехнические и информационные комплексы и системы, раздел наноэлектроника и квантовые информационные системы. Т.12. №2. 2016. С. 90-95.
9. Латыпов К.Ф. Определение потенциала ионизации гетероциклических молекул по оптическим спектрам поглощения электромагнитного

излучения в видимой и УФ области /К.Ф. Латыпов, М.Ю. Долломатов
//Фотоника. 2017. №4. С.78-82.

10. Долломатов М.Ю. Применение методов статистической радиофизики для оценки потенциалов ионизации и сродства к электрону молекул по спектрам поглощения электромагнитного излучения в петагерцевой области /Долломатов М.Ю., Латыпов К.Ф. // Электромагнитные волны и электронные системы. 2017. Т. 22. №2. С.54-60.
11. Латыпов К.Ф., Долломатов М.Ю., Бахтизин Р.З. Определение сродства к электрону гетероциклических молекулярных полупроводников по автокорреляционным параметрам спектров оптического поглощения // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». 2018. Т. 10. № 1. С. 72–75.
12. Долломатов М.Ю., Латыпов К.Ф., Бахтизин Р.З. Оценка донорно-акцепторных свойств кислородсодержащих соединений и ширины запрещённой зоны в наноклстерах антрахинона по интегральным характеристикам сигналов оптических спектров поглощения // Бутлеровские сообщения. 2018. №4. С.26-33.
13. Долломатов М.Ю. Интегральные характеристики оптических спектров, как новый класс дескрипторов для сложных молекулярных систем / М. Ю. Долломатов, Э. А. Ковалева, Қ. Ф. Латыпов, М. М. Долломатова, Г. У. Ярмухаметова, Н. Х. Паймурзина // Бутлеровские сообщения. 2019. №1. С.1-13.
14. Латыпов К.Ф., Долломатов М.Ю. Оценка ширины запрещённой зоны фотопроводимости органических полупроводников // Фотоника. 2020. Т.14. №2. С. 50-58.

Публикации, в реферируемых журналах, входящих в базу SCOPUS:

15. Долломатов М.Ю., Шуткова С.А., Бахтизин Р.З., Латыпов К.Ф., Долломатова М.М., Гильманшина К.А., Бадретдинов Б.Р. Структура

молекул асфальтенов и нанокластеров на их основе // Нефтехимия. 2020. Т.60. №1. Вып.1. С.1-7.

Авторские свидетельства и патенты:

16. Латыпов К.Ф., Долوماتов М.Ю. Компьютерная программа «Феникс-ЛД». Свидетельство о регистрации программы №2012613372, внесено в гос. реестр 10.04.2012.
17. Долوماتов М.Ю., Казаков М.А., Журавлева Н.А., Латыпов К.Ф. и др. База данных видимых и ультрафиолетовых спектров для многокомпонентных систем с хаосом химического состава. Свидетельство о регистрации базы данных №RU 2017620916, внесено в гос. реестр 15.08.2017г.
18. Латыпов К.Ф., Долوماتов М.Ю. Способ определения потенциала ионизации и сродства к электрону органических молекул кислород- и азотсодержащих соединений. Патент №2649243, зарегистрирован 30.03.2018г.
19. Латыпов К.Ф., Долوماتов М.Ю. Способ определения ширины запрещённой зоны органических полупроводников на основе гетероатомных соединений. Патент №2668631 от 02.10.2018г.

Научная и практическая значимость работы:

1) Установленные закономерности и развитые в работе расчётные и экспериментальные методики позволяют предсказать влияние интегральных характеристик спектра и структурных параметров молекул кислород- и азотсодержащих соединений на ПИ и СЭ.

2) Доказана эффективность применения автокорреляционного параметра в качестве дескриптора для прогнозирования донорно-акцепторных характеристик молекул ряда кислород и азотсодержащих соединений. Точность прогноза для ПИ составляет $\pm[0.10..0,22]$ эВ, для СЭ $\pm[0.06..0.13]$ эВ. В частности, определены донорно-акцепторные свойства

ряда сложных органических соединений – замещённых антрахинонов, использующихся в фармацевтике

3) Разработаны алгоритм и база данных, включающие ИСД, а также экспериментальные методики, которые позволяют в лабораторных условиях по данным оптических спектров поглощения на стандартном оборудовании без проведения сложных экспериментов и квантовых расчётов определять ПИ и СЭ азот- и кислородсодержащих органических соединений. Порог чувствительности методик 0,1 эВ.

4) Предложенные дескрипторы могут быть применены для прогнозирования усредненных ПИ и СЭ сложных молекулярных систем – нефтяных асфальтенов и углеводородных фракций.

Достоверность полученных результатов обосновывается статистической достоверностью модели «спектр-свойства», исследованием спектров с применением неэмпирических методов квантовой химии и специально разработанными алгоритмами и программами. При этом отклонения значений ПИ и СЭ, определенных различными методами, находятся в пределах точности эксперимента. Для экспериментальных оптических исследований применена современная аппаратура и комплекс кванто-химических программ. Кроме того, использована информация с разработанной для решения задачи базы данных по исследованию свойств и идентификации многокомпонентных органических систем в УФ, видимой и ближней ИК-областях спектра. Все выводы подтверждены расчетами статистических показателей и проверены на соответствие статистическим критериям.

Диссертация «Прогноз потенциалов ионизации и сродства к электрону на основе интегральных спектроскопических дескрипторов на примере ряда азот- и кислородсодержащих соединений» Латыпова Камила Фаридовича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 02.00.04 "физическая химия".

Заключение принято на заседании кафедры теоретической физики Башкирского государственного университета. Присутствовало на заседании 14 чел. Выступали при обсуждении диссертации:

д.ф.-м.н., заведующий кафедрой физической электроники и нанофизики, д.ф.-м.н., профессор Бахтизин Р.З., д. ф.-м.н., профессор Гоц. С.С., д.ф.-м.н., профессор Якшибаев Р.А., д.х.н., профессор Доломатов М.Ю., д.ф.-м.н., заведующий кафедрой теоретической физики, д.ф.-м.н, профессор Вахитов Р.М., д.ф.-м.н., профессор Шайхитдинов Р.З., д.х.н., профессор Зимин Ю.С., д.ф.-м.н., профессор Балапанов М.Х., д.ф.-м.н., профессор Юмагузин Ю.М., к.т.н., доцент Рыжиков О.Л., к.ф.-м.н., доцент Шарипов Т.И., д.ф.-м.н., к.ф.-м.н., доцент Закирьянов Ф.К., к.ф.-м.н., доцент Шарафуллин И.Ф.

В голосовании приняли участие 14 человек, имеющих право голоса. Результаты голосования: "за" - 14 чел., "против" - 0 чел., "воздержалось" - 0 чел., протокол №6 от "02" июня 2020 г.



Бахтизин Рауф Загидович, доктор