

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.479.04,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО
ОБРАЗОВАНИЯ «УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ»
МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 14 декабря 2023 г. № 21

О присуждении Ахметьяновой Альбине Ильшатовне, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Теоретико-графовый подход моделирования гомодесмотических реакций для расчета стандартной энтальпии образования органических соединений» по научной специальности 1.4.4. Физическая химия принята к защите 12 октября 2023 года (протокол № 16) диссертационным советом 24.2.479.04, созданным на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (450076, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32), приказ № 519/нк от 24.03.2023 г.

Соискатель, Ахметьянова Альбина Ильшатовна, 06 февраля 1996 года рождения. В 2020 году окончила с отличием Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Башкирский государственный университет» по направлению подготовки 01.04.02 Прикладная математика и информатика с присвоением квалификации Магистр.

Работает в должности ассистента кафедры математического моделирования Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре математического моделирования Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – Исмагилова Альбина Сабирьяновна, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой управления информационной безопасностью Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий».

Официальные оппоненты:

1. Туровцев Владимир Владимирович, доктор физико-математических наук (02.00.04 – Физическая химия), доцент, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный медицинский университет», заведующий кафедрой медицинской биофизики;

2. Миненков Юрий Валерьевич, PhD, соответствует кандидату химических наук (Физическая химия), Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН), ведущий научный сотрудник отдела кинетики и катализа

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация - Институт нефтехимии и катализа – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального

исследовательского центра Российской академии наук, г. Уфа, в своем положительном отзыве, подписанном Колединой Камилой Феликсовной – доктором физико-математических наук, доцентом, старшим научным сотрудником лаборатории математической химии, Галимовым Димом Иршатовичем – кандидатом физико-математических наук, доцентом, старшим научным сотрудником лаборатории химии высоких энергий и катализа, заместителем директора Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук», утвержденном руководителем Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук», доктором биологических наук Василием Борисовичем Мартыненко, указала, что по своей актуальности, научной новизне, теоретической и практической значимости, количеству и качеству публикаций представленная диссертационная работа является научно-квалификационным исследованием, совокупность результатов которого можно квалифицировать как научное достижение, определяющее инновационный подход к исследованию термохимических свойств органических соединений и способствующее более глубокому их изучению и отвечает требованиям п.п. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в действующей редакции), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а автор представленной работы заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности

1.4.4. Физическая химия.

Соискатель имеет 43 научные работы, в том числе 2 научные статьи, в изданиях, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Российской

Федерации, 2 в отечественных изданиях, которые входят в международные реферативные базы данных и системы цитирования (RSCI), 5 в ведущих зарубежных рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus, а также 4 в журналах, входящих в РИНЦ. У соискателя также имеется 5 свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ и баз данных.

Общий объём публикаций по теме диссертации 9,4 п.л., авторский вклад – 4,9 п.л. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Бурцева Е.С. Гомодесмический метод определения невалентных эффектов в ряду производных циклопропана / Е.С. Бурцева, А.И. Ахметьянова, А.С. Исмагилова, С.Л. Хурсан // Вестник Башкирского университета. – 2017. – Т. 22, № 4. – С. 946-952.

2. Ахметшина Е.С. Гомодесмотический метод определения энтальпий образования свободных радикалов I. Первичные алкильные радикалы / Е.С. Ахметшина, А.И. Ахметьянова, А.С. Исмагилова, С.Л. Хурсан // Вестник Башкирского университета. – 2020. – Т. 25, № 4. – С. 731-736.

3. Хурсан, С.Л. Конструирование полного набора гомодесмических реакций с использованием метода Depth-First Search / С.Л. Хурсан, А.С. Исмагилова, Ф.Т. Зиганшина, А.И. Ахметьянова // Журнал физической химии. – 2021. – Т. 95, № 7. – С. 1059-1067. (Khursan S.L. Constructing a Complete Set of Homodesmic Reactions Using the Depth-First Search Procedure / S.L. Khursan, A.S. Ismagilova, F.T. Ziganshina, A.I. Akhmetyanova // Russian Journal of Physical Chemistry Athis link is disabled. – 2021. – Т.95. – №7. – С. 1386–1393.).

4. Хурсан, С.Л. Определение базиса гомодесмотических реакций циклических органических соединений с использованием теории графов / С.Л. Хурсан, А.С. Исмагилова, А.И. Ахметьянова // Журнал физической

химии. – 2018. – Т. 92, № 7. – С. 1076-1085. (Khursan S.L. Determining the Basis of Homodesmotic Reactions of Cyclic Organic Compounds by Means of Graph Theory / S.L. Khursan, A.S. Ismagilova, A.I. Akhmetyanova // Russian Journal Of Physical Chemistry A. – 2018. — Т.92. – №7. – С. 1312–1320.).

5. Akhmetyanova A.I. Development and automation of the algorithm for determining the enthalpy of formation for organic compounds // Journal of Physics: Conference Series. – 2021. – 1902(1). – С. 012099.

6. Akhmetyanova A.I. Mathematical Apparatus for the Construction of Homodesmic Reactions / A.I. Akhmetyanova, F.T. Ziganshina, A.S. Ismagilova // I-st International Conference on Control Systems, Mathematical Modeling, Automation and Energy Efficiency (SUMMA). – 2019. – pp. 69- 72.

7. Akhmetyanova A.I. Development and Automation of an Algorithm for Determining the Basis of Homodesmic Reactions / A. Akhmetyanova, A. Ismagilova // 2021 3rd International Conference on Control Systems, Mathematical Modeling, Automation and Energy Efficiency (SUMMA). – 2021. – pp. 27-31.

8. Akhmetyanova A.I. Mathematical modeling of organic compounds on the example of the cyclic compound cyclobutanecarbonitrile /A. Akhmetyanova, A. Ismagilova //4-th International Conference on Control Systems, Mathematical Modeling, Automation and Energy Efficiency (SUMMA). – 2022. – pp. 88–91.

9. 12. Akhmetyanova A.I. Description of Next-Generation Software and a Historical Overview of the Rise of the Homodesmic Approach /A. Akhmetyanova, A. Kuznetsov // 4-th International Conference on Control Systems, Mathematical Modeling, Automation and Energy Efficiency (SUMMA). – 2022. – pp. 143-146.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. Ведущей организации – Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального

исследовательского центра Российской академии наук. Отзыв положительный. Имеются замечания: 1) Во второй и третьей главах не указаны погрешности экспериментальных данных, которые бы позволили оценить точность расчетных результатов, полученных с помощью квантово-химических методов G3 и G4 в гомодесмотических реакциях. 2) Неясно, что подразумевается в работе под термином «простой и сложный атом». 3) Ошибочное использование терминологии на с. 95 диссертации. SQL – это не СУБД, а язык структурированных запросов, который используется в СУБД. Поэтому остается неясным в какой из СУБД была реализована база данных базисов гомодесмотических реакций. Также в работе не указано на каком языке программирования и в какой среде была разработана авторами программа конструирования базиса ГДР. 4) На с. 55-58 диссертации приводится ручной расчет теплового эффекта ГДР со всеми арифметическими операциями, что является излишним. 5) В тексте диссертации встречаются орфографические и синтаксические ошибки, а также небрежности в оформлении: с. 46 предложение не закончено; одинаковый абзац об описании топологии молекул повторяется на с. 37, с. 49; таблица 3.5 на стр. 61 полностью повторяется с таблицей 1 Приложения 2 на стр. 146; аналогично, таблица 3.7 на стр. 66 полностью повторяется с таблицей 1 Приложения 3 на стр. 151; аналогично, таблица 3.9 на стр. 71 полностью повторяется с таблицей 2.15 (неверная нумерация) Приложения 4 на стр. 158; аналогично, таблица 3.11 на стр. 75 полностью повторяется с таблицей 1 Приложения 5 на стр. 164; аналогично, таблица 3.13 на стр. 78 полностью повторяется с таблицей 1 Приложения 6 на стр. 169. 6) Работа была бы более информативной, если бы экспериментальные и вычислительные данные были представлены в виде таблиц для большего количества органических соединений.

2. Официального оппонента, доктора физико-математических наук, доцента, заведующего кафедрой медицинской биофизики Федерального

государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственной медицинской академии» Тууровцева Владимира Владимировича. Отзыв положительный.

Имеются замечания: 1) Можно отметить некоторую разбросанность мыслей. Так в Главе 1 описание метода гипотетических реакций даётся в разных местах и близкими словами (иногда избыточно). 2) Часть предложений в Главе 1 диссертации появилась методом «копировать/вставить» без последующих исправлений в тексте, поэтому на страницах 20-21 и 23-25 выглядит странно. 3) Значительную часть Главы 1 при литературном обзоре занимают перечисления расчётов, выполненных различными авторами. Желательно было бы их сгруппировать и дать по группам пояснения с выводами. 4) В Главе 1 много описок и плохо переведённых английских терминов. 5) В Главе 2 говорится, что у «ациклических соединений является возможность свободного вращения вокруг своей связей». Это не так. Свободное вращение практически не встречается. Почти всё вращение около одинарных связей заторможено. 6) В Главе 2 введён странный термин «податливость» для конформационных изменений. 7) На страницах 35-36 структура 4-метил-2,6-октадиена ошибочна. Это 3-метил-октадиен-1,6. 8) На странице 41 использованы обозначения «бутала» и «пропанал», лучше писать «бутаналь» и «пропаналь». 9) Формулы для расчёта стандартного отклонения нигде не пронумерованы. К формулам на страницах 41,42,44,46 вопрос: почему в знаменателе стоит 2, а не 3? 10) В пронумерованных формулах в середине страницы 56 нет размерностей величин. 11) Вывод к Главе 2 (последнее предложение на странице 46 непонятно. Даже в исправленном виде он не согласуется с приведенными в таблицах значениями. Но при этом, на странице 50 весь раздел 3.3 суть противоположный вывод по отношению к таковому на странице 46. 12) В главе 3 после раздела 3.3.3 идут три раздела 3.3.4 (т.е. нарушена нумерация). 13) В Таблице 3.3 указано среднее значение

энтальпии образования, найденное с помощью метода G3 как -383,8 кДж/моль. Это ошибка. Если числа в столбце записаны правильно, то среднее значение есть -384,4 кДж/моль. 14) В тексте при упоминании термина «Хартри» иногда следует считать, что это либо коэффициент, либо метод. Например, в предложении над Таблицей 3.5. – «для расчета энтальпии образования ΔfH^0 по Хартри» или см. последние предложения на страницах 70 и 74 и др. Хартри – это фамилия и название единицы энергии в атомной системе единиц. 15) В Таблицах 3.7, 3.9, 3.11, 3.13, в Приложении 2 (Таблица 1), в Приложении 3 (Таблица 1), в Приложении 4 (Таблица 2.15), в Приложении 5 (Таблица 1), в Приложении 6 (Таблица 1) в колонке с экспериментальными данными (озаглавленной как «Эксперимент» включены расчётные значения, полученные по методам G3 и G4. 16) В Таблицах 3.8, 3.10, 3.12, 3.14, в Приложении 2 (Таблицы 2-6), в Приложении 3 (Таблицы 2-10), в Приложении 4 (Таблицы 2-10), в Приложении 5 (Таблицы 2-10), в Приложении 6 (Таблицы 2-6) в колонках с заголовками «Эксперимент» указаны только расчётные значения, полученные по методам G3 и G4. 17) На странице 70 говорится, что «концевые группы, а именно: K01, K04 представленных на рисунке 3.14». Хотя из текста абзаца следует, что они представлены на Рисунке 3.11. 18) Странно то, что нигде не указывается название созданной автором программы. Пишется просто «программа». 19) В списке литературы во многих случаях пропущены годы выпуска. 20) В Приложении 2 две Таблицы 2. 21) В диссертации есть странные таблицы: Таблица 3 в Приложении 2, Таблица 8 в Приложении 3, Таблицы 3 и 9 в Приложении 4, Таблица 5 в Приложении 5, где среднее значение и стандартное отклонение вычислено по одному исходному значению. 22) В тексте диссертации почти нет ссылок на Приложения 2-6, хотя все таблицы собраны там в одном месте. 23) В Приложение 4 нумерация таблиц начинается не с 1, а с 2.15.

3. Официального оппонента, PhD, соответствует кандидату химических

наук, ведущего научного сотрудника отдела кинетики и катализа Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН) Миненкова Юрия Валерьевича. Отзыв положительный.

Имеются замечания: 1) Предсказанные в работе энтальпии образования соединений в газовой фазе характеризуются усредненной по набору гомодесмотических реакций ΔH_f и стандартным отклонением. Утверждается, что разница в ΔH_f соединений из разных гомодесмотических реакций появляется из-за возможных неточностях в энтальпиях образования «опорных» соединений. Рассматривают ли авторы возможность учитывать погрешность в «опорных» экспериментальных энтальпиях образования для конкретных гомодесмотических реакций? Например, такая погрешность (Δf) в предсказанной ΔH_f может быть оценена по формуле:

$$\Delta f = \left[\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)^2 \Delta x^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 \Delta y^2 + \dots \right]^{\frac{1}{2}}, \text{ где производная } \frac{\partial f}{\partial x} - \text{ численно}$$

равна стехиометрическому коэффициенту при опорном соединении x в химической реакции, Δx - погрешность в энтальпии образования опорного соединения x . 2) Для ряда соединений, исследуемых в данной работе (1-бутанол, бутаналь, 1-этоксипропан, монометилэфир триметиленгликоля, 1,3-пропандиол, 2,2-Оксибисэтанол, 1,4-Бутилдиамин и др.) в газовой фазе существует множество устойчивых конформеров. Учитывалось ли конформационное многообразие этих систем в данной работе? Проводился ли систематический конформационный поиск? Усреднение по Больцману? 3) На стр. 50 и далее по тексту утверждается, что после многочисленных тестов, для расчетов энтальпий образования циклических соединений было принято решение использовать методы G3 и G4, обладающей более высокой точностью. О.В. Дорофеева в своей работе *J. Comput. Chem.* 2020, 41, 2352 – 2364 (DOI: 10.1002/jcc.26394) показала, что при расчете ΔH_f адамантана и его производных через набор изодесмических

реакций, использование G4 метода приводит к значительным (до 10 кДж/моль) ошибкам по сравнению с DLPNO-CCSD(T1)/CBS приближением. Может ли неточность G3/G4 приближений отвечать за найденные расхождения между предсказанными и экспериментальными энтальпиями образования исследуемых в диссертации соединений? 4) В вычислительной термодинамике хорошо известно, что при фиксированном уровне теории, энергия реакции тем точнее, чем большие молекулярные фрагменты сохранены с двух сторон реакций из-за компенсации ошибок в абсолютных энергиях (энтальпиях) продуктов и реагентов. См. ссылки 33,34 в работе J. Phys. Chem. A 2013, 117, 1834 – 1842 (DOI: 10.1021/jp312585r). Возможно ли составление таких реакций в рамках предложенного в работе подхода? 5) В тексте работы встречаются опечатки, некоторые из них приведены ниже: стр. 17 «энтальпию образования $\Delta_f H(298)$ »; стр. 17 «теплоту образования $HBrO_x$ »; стр. 18 «методов функционала плотности при $B3LYP \approx 6-31G(d,p)$ »; стр. 25 «энтальпиях образования ($\Delta_f H$)»; стр. 27 «энергией $sp(3)-sp(3)$ гош-взаимодействий»; стр. 44 «3-метилпентана $et_2c=CH_2$;» .

4. Кандидата химических наук, ассоциированного профессора кафедры химии некоммерческого акционерного общества «Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева» Сейтеновой Гайни Жумагалиевны. Отзыв положительный. Имеются замечания: 1) Какова относительная погрешность расчётов? Имеет ли смысл ее рассчитать? 2) Из названия автореферата следует, что в работе Вы рассчитываете характеристики органических соединений. Любой ли тип органического соединения можно рассчитать этим способом?

5. Доктора физико-математических наук, доцента, заведующего кафедрой «Корпоративные финансы и учетные технологии» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет» Кантор Ольги Геннадиевны. Отзыв положительный. Имеется

замечание: Формула (1), определяющая все гомодесмотические реакции недостаточно обоснована в автореферате.

6. Доктора химических наук, профессора, заведующего кафедрой физической химии и высокомолекулярных соединений Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Чувашский государственный университет имени И.Н. Ульянова» Кольцова Николая Ивановича. Отзыв положительный. Имеется замечание: На странице 3 указано, что термодимический анализ энергетики исследуемых соединений с помощью теоретических вычислений доступен только для очень малых молекул. Автор не указал, на сколько малых.

7. Кандидата химических наук, доцента кафедры физическая химия Химического института им. А.М. Бутлерова Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет» Нагриманова Руслана Наильевича. Отзыв положительный. Имеются замечания: 1) Уравнение (3) содержит ошибочные материалы. 2) На странице 16 приведено «А стандартное отклонение получилось меньше 1 ккал/моль...». Скорее всего, имелось в виду «кал/моль». 3) Не понятно для какого из изомеров (цис- или транс-) 3-гексена ошибочна энтальпия образования на странице 16.

8. Доктора химических наук, профессора, Члена-корреспондента Академии наук Республики Башкортостан, Академика-секретаря отделения химических технологий и новых материалов Академии наук Республики Башкортостан Докичева Владимира Анатольевича. Отзыв положительный. Имеются вопросы и замечания: 1) На странице 8 указано, что количество всех гомодесмотических реакций рассчитывается по формуле (1), но не описан алгоритм появления данной формулы. 2) Для молекул 4-метилциклопентена и 1-метилциклопентена не приведены результаты расчета стандартной энтальпии образования по всем гомодесмотическим реакциям.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их высокой профессиональной квалификацией, наличием публикаций по проблематике, связанной с темой диссертации, компетенциями в вопросах, имеющих отношение к теме работы. Ведущая организация и оппоненты не имеют совместных проектов и публикаций с соискателем.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований, к наиболее значимым результатам необходимо отнести следующие:

- проведенный анализ физико-химических и термодинамических свойств органических соединений, позволил сделать вывод, что гомодесмотический метод определения невалентных эффектов для органических соединений можно рассматривать в качестве альтернативы дорогостоящим и затратным по времени экспериментальным методам. Исследование известного массива экспериментальных данных по энтальпиям образования органических соединений позволило сформировать репрезентативный набор соединений для дальнейшего анализа энергетических характеристик;

- предложенная теоретико-графовая интерпретация и разработанный метод конструирования всевозможных гомодесмотических реакций является принципиально новым решением задач определения термодинамических свойств органических соединений. Большинство имеющихся данных ряда исследуемых структур, показало высокую степень сходимости расчетных и экспериментальных данных. В то же время, данный подход позволил выявить ошибочные данные и, как следствие, точно определить стандартную энтальпию образования органических соединений;

- проведенный сравнительный анализ примененных квантово-химических методов расчета стандартной энтальпии образования органических соединений позволил выявить, что ациклические соединения

малочувствительны к уровню сложности квантово-химических приближений;

- гомодесмотический метод, реализованный в программном коде, позволяет повысить эффективность теоретического расчета стандартной энтальпии образования органического соединения. Спроектирована реляционная база данных, содержащая информацию о строении молекул, энергетических характеристиках репрезентативного набора органических соединений и квантово-химических методах расчета, пополнение которой предусмотрено программным кодом. Разработанное программное обеспечение позволяет рассчитать стандартные энтальпии образования в различных квантово-химических приближениях для органических соединений, представляющих классы спиртов, простых и сложных эфиров, карбонильных соединений, алканов, алкинов.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- разработанный метод конструирования базиса гомодесмотических реакций является принципиально новым решением задач определения стандартной энтальпии образования органических соединений;

- ряд исследованных соискателем структур, показал высокую степень сходимости расчетных и экспериментальных данных;

- разработанный подход позволяет выявить ошибочные данные и, как следствие, определить стандартную энтальпию образования органических соединений;

- разработанная программа и база данных позволяют рассчитать стандартные энтальпии образования в различных квантово-химических приближениях для органических соединений.

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

- создано программное обеспечение расчета стандартной энтальпии образования органических соединений с применением теоретико-графового

подхода;

- теоретико-графовый метод для определения базиса гомодесмотических реакций внедрен в образовательные программы кафедры математического моделирования ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий».

Оценка достоверности результатов обеспечена использованием в качестве основ фундаментальных законов математики, химии, физики и выбором теоретически обоснованных методов, а также подтверждается удовлетворительным согласованием результатов проведенных расчетов с экспериментальными данными и опубликованными данными других исследователей.

Личный вклад соискателя состоит в непосредственном участии во всех стадиях научно-исследовательского процесса: от постановки задачи до проведения экспериментальных работ и подготовки публикаций. Научные результаты, вынесенные на защиту, получены автором самостоятельно.

В ходе защиты диссертации было высказано критическое замечание, о том, что для расчетов энтальпий образования циклических соединений использовали квантово-химические методы, обладающие высокой точностью. Однако существуют другие квантово-химические методы, использование которых приведет к менее значимым ошибкам.

Соискатель Ахметьянова А.И. согласилась с высказанным замечанием.

На заседании 14 декабря 2023 г. диссертационный совет принял решение за научное достижение, заключающееся в разработке теоретико-графового подхода моделирования гомодесмотических реакций для расчета стандартной энтальпии образования органических соединений, присудить Ахметьяновой Альбины Ильшатовны ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 8 докторов физико-математических наук по

профилю защищаемой диссертации, участвовавших в заседании; из 18 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за – 16, против – 0.

Председатель
диссертационного совета



Мустафин Ахат Газизьянович

Ученый секретарь
диссертационного совета

Ирмагилова Альбина Сабирьяновна

14 декабря 2023 г.