

ОТЗЫВ

научного руководителя на диссертационную работу

Ахметьяновой Альбины Ильшатовны

«Теоретико-графовый подход моделирования гомодесмотических реакций для расчета стандартной энтальпии образования органических соединений», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия

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

В период подготовки диссертации Ахметьянова Альбина Ильшатовна обучалась и по настоящее время обучается в аспирантуре по очной форме обучения Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» по направлению подготовки 09.06.01 Информатика и вычислительная техника.

Диссертационная работа Ахметьяновой А.И. посвящена созданию универсальных, высокоточных теоретических методов расчета и прогнозирования свойств химических соединений. Разработанный диссертантом метод дает возможность независимой оценки энергосодержания вещества, выявления ошибочных данных и, в конечном счете, надежного определения тепловых эффектов химических реакций, что важно для разработки технологических регламентов и осознанного управления химическими процессами. Предложенный в диссертационной работе теоретико-графовый подход моделирования гомодесмотических реакций (ГДР) для расчета стандартной энтальпии образования органических соединений является новым и основан на комбинации теоретического метода оценки энергосодержания, опирающегося на надежные экспериментальные

значения для реперных молекул, и теоретико-графового анализа строения химического соединения.

Актуальность выбранной темы диссертационного исследования обусловлена тем, что наилучшее решение вопросов разработки процессов химической технологий возможно лишь при наличии надежной информации по физико-химическим и термодинамическим свойствам химических соединений. Накоплен значительный массив этих данных. Однако быстрый прогресс технологий и появление все большего количества новых химических соединений обуславливают разрыв между потребностью в данных и их наличием. Определение в эксперименте термодинамических величин органических соединений часто бывает затруднительным, а иногда и невозможным. К тому же среди этого огромного количества экспериментальной информации содержатся и недостоверные данные.

Теоретико-графовая интерпретация органических соединений, ставшая основой для создания алгоритма расчета соотношения параметров при конструировании базиса ГДР, позволяет автоматизировать процедуру выделения базиса ГДР, а также получить наглядную геометрическую интерпретацию базиса, что важно для последующего физико-химического анализа. Представленный метод может быть применен для расчетов энтальпий образования ациклических и циклических органических соединений, энергий напряжения циклов, разделения энергий невалентных взаимодействий различной природы, энтальпий образования алкильных свободных радикалов.

Ахметьянова А.И. непосредственно участвовала в постановке целей и задач диссертационной работы, подготовке публикаций, обсуждении результатов и формулировке защищаемых положений и выводов.

Диссертационная работа Ахметьяновой А.И. выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (код научной темы FZWU-2023-0002) и при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (Грант РФФИ № 18-07-00584 А).

Результаты диссертационной работы обсуждались на научных семинарах кафедры математического моделирования ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий», ФГБУН Уфимский федеральный

исследовательский центр РАН «Институт нефтехимии и катализа», ФГБУН Уфимский федеральный исследовательский центр РАН «Уфимский институт химии». Основные положения диссертации Ахметьяновой А.И. представлены на конференциях международного и всероссийского уровней.

По теме диссертации опубликовано 43 научных публикаций, из которых – 13 это научные статьи, в том числе: 2 статьи в рецензируемых научных журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссии Российской Федерации, 2 статьи в отечественном издании, которое входит в международные реферативные базы данных и системы цитирования (RSCI), 5 статей в ведущих зарубежных рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus, 4 статьи в журналах, входящих в РИНЦ; а также 5 свидетельств о регистрации электронных ресурсов, 25 работ в трудах международных и всероссийских конференций.

Считаю, что Ахметьянова Альбина Ильшатовна является сформировавшимся специалистом, способным самостоятельно решать поставленные задачи. Диссертационная работа представляет собой законченное научное исследование, которое соответствует требованиям п. 9-11, 13, 14 Постановления Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения ученых степеней», а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.

Научный руководитель
доктор физико-математических наук
(02.00.04 – Физическая химия),
доцент, заведующий кафедрой управления
информационной безопасности ФГБОУ ВО
«Уфимский университет науки и технологий»
450076, Республика Башкортостан,
г. Уфа, ул. Заки Валиди, д. 32,
тел. +79273033355
e-mail: ismagilovaas@yandex.ru
«13» июня 2023 г.

Исмагилова
Альбина Сабирьяновна

А.С.

Подпись Исмагиловой А.С. заверяю:
Ученый секретарь Ученого совета университета
к.ф.н., доцент



Н.В. Ефименко

Н.В. Ефименко