

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 19 сентября 2024 г. № 31

О присуждении Байбуловой Галие Шафкатовне, гражданину РФ, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Физико-химические особенности строения и электронные свойства некоторых со-полиариленаэфиркетон» по научной специальности 1.4.4. Физическая химия принята к защите 04 июля 2024 года (протокол № 29) 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, Байбулова Галия Шафкатовна, 19 октября 1988 года рождения. В 2010 году окончила Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы», с присуждением квалификации «Учитель физики» по специальности «Физика»; в 2013 году окончила аспирантуру по очной форме обучения Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы» по научной специальности 01.04.17 Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных

состояний вещества. В 2021 году освоила программу магистратуры Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы» по направлению подготовки 44.04.01 Педагогическое образование, направленность (профиль) «Физико-астрономическое образование» с присвоением квалификации «Магистр». Справка об обучении со сведениями о сданных кандидатских экзаменах выдана Федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы» в 2022 г.

Работает в должности младшего научного сотрудника молодежной лаборатории «Прикладная физика и технологии наносенсорики» института физики, математики, цифровых и нанотехнологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы» Министерства просвещения Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре физики и нанотехнологий института физики, математики, цифровых и нанотехнологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы» Министерства просвещения Российской Федерации.

Научный руководитель – Карамов Данфис Данисович, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, заведующий лабораторией электроники наносистем Института физики молекул и кристаллов – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук.

Согласно решению заседания кафедры физики и нанотехнологий № 4 от 28 декабря 2023 года, сменить руководство научной работой «Физико-

химические особенности строения и электронные свойства некоторых сополиариленаэфиркетонов» младшего научного сотрудника молодежной лаборатории «Прикладная физика и технологии наносенсорики» института физики, математики, цифровых и нанотехнологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы» Министерства просвещения Российской Федерации Байбуловой Галии Шафкатовны на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия, кандидату физико-математических наук, старшему научному сотруднику, заведующему лабораторией электроники наносистем Института физики молекул и кристаллов – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук Карамову Данфису Данисовичу, с 01 апреля 2024 года. Выписка из приказа № 24/ан от 01.04.2024 г. «О смене научного руководителя».

Официальные оппоненты:

1. Тамеев Алексей Раисович, доктор физико-математических наук (02.00.04 – Физическая химия), Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук, лаборатория электронных и фотонных процессов в полимерных наноматериалах, главный научный сотрудник;

2. Феськов Сергей Владимирович, доктор физико-математических наук (01.04.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества), доцент, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Волгоградский государственный университет», кафедра теоретической физики и волновых процессов, ведущий научный сотрудник

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация - федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет», г. Уфа, в своем положительном отзыве, подписанном Бадиковой Альбиной Дарисовной – доктором технических наук (05.17.07 – Химическая технология топлива и высокоэнергетических веществ), профессором, заведующим кафедрой «Физическая и органическая химия», Борисовым Иваном Михайловичем – доктором химических наук (02.00.04 – Физическая химия), профессором, профессором кафедры «Физическая и органическая химия», указала, что диссертация является законченной научно-квалификационной работой, содержащей новое решение актуальной научной задачи, связанной с интерпретацией электрофизических свойств полимерных пленок со-ПАЭК, основанной на гипотезе о формировании локальных функциональных центров в макромолекуле, образованных за счет расположения функциональных групп полимера. Диссертационная работа отвечает требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям п.п. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года, а её автор – Байбулова Галия Шафкатовна – заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.

Соискатель имеет 31 научную работу, из которых 2 статьи в рецензируемых научных журналах, рекомендованных перечнем ВАК РФ, 2 статьи в отечественных изданиях, которые входят в международные реферативные базы данных и системы цитирования (RCSI, Scopus, Web of Science), 6 статей в журналах, входящих в РИНЦ, 21 научная работа в трудах российских и международных научных конференций.

Общий объём публикаций по теме диссертации 5,9 п.л., авторский вклад – 2,4 п.л. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Э.Р. Жданов, Г.Ш. Султанбаева, А.Н. Лачинов Квантово-химические исследования электронной структуры комплексов с переносом заряда в нанополимерных пленках // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2010. – № 3/2. – С. 98-101.

2. Г.Ш. Байбулова, А.Ф. Галиев, Э.Р. Жданов, В.М. Корнилов, А.Н. Лачинов, Л.Р. Калимуллина Квантово-химические исследования надмолекулярной структуры полидифениленфталида // Вестник Омского университета. – 2014. – № 2. – С. 46-49.

3. Л.Р. Калимуллина, Е.П. Нафикова, Н.Л. Асфандиаров, Ю.В. Чижов, Г.Ш. Байбулова, Э.Р. Жданов, Р.М. Гадиев Теоретическая оценка энергии сродства к электрону методами теории функционала плотности для производных хинона // Журнал физической химии. – 2015. – Т. 89, № 3. – С. 426-432.

4. Г.Ш. Байбулова, А.Н. Лачинов, Р.М. Гадиев, Л.Р. Калимуллина, А.Ф. Галиев, А.Р. Юсупов Квантово-химическое исследование надмолекулярной структуры пленок полимеров класса полиариленфталидов. // Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2020. – Т. 84, № 5. – С. 688-690.

5. Г.Ш. Байбулова, Д.Д. Карамов, А.Ф. Галиев, А.Б. Чеботарева, В.В. Шапошникова, С.Н. Салазкин, А.Н. Лачинов Исследование физико-химических особенностей строения и электронных свойств сополиариленэфиркетонов // Известия Уфимского научного центра Российской академии наук. – 2024. – № 1. – С. 49-54.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. Ведущей организации – ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет». Отзыв положительный. Имеются замечания: 1) В работе при описании результатов квантово-химического исследования не рассмотрено влияние материала электрода на распределение электронной плотности в макромолекулах. 2) В разделе 3.2. описаны результаты квантово-химического исследования мономеров, димеров и тетрамеров. Показано, что с увеличением мономерных звеньев изменение энергетических параметров происходит не линейно. Возможно ли установление закономерности изменения параметров для описания свойств макромолекулы? 3) На рисунке 3.18 в зависимости ширины запрещенной зоны от концентрации флуореновых групп полимера со-ПАЭК наблюдается минимум ширины запрещенной зоны в диапазоне от 30 до 35%. Не раскрыт механизм формирования данного минимума. 4) В разделе 3.4. на рисунке 3.26 представлена зависимость показателя n от напряжения U в структуре Cu/ПАЭК/ITO(Ar) . Чем обусловлена нелинейная зависимость при концентрации флуореновой функциональной группы равной 25%? 5) На рисунке 3.27 показана немонотонная зависимость ширины «хвоста» зоны проводимости. Какими физико-химическими свойствами объясняется данная зависимость? 6) В работе присутствуют ошибки редакторского характера.

2. Официального оппонента, доктора физико-математических наук, главного научного сотрудника лаборатории электронных и фотонных процессов в полимерных наноматериалах ФГБУН Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук Тамеева Алексея Раисовича. Отзыв положительный.

Имеются замечания: 1) В разделе 3.3.2 в ряду сополиариленаэфиркетонов оптическая ширина запрещенной зоны в тонких пленках монотонно изменяется с ростом содержания флуореновых фрагментов (Таблица 3.16). При этом в разделе 3.4 (Таблица 3.19) подвижность и концентрация носителей заряда в тонких пленках и значение

потенциального барьера на границе со-полимер/металл и со-полимер/ITO изменяются немонотонно с ростом содержания флуореновых фрагментов. Следовало обратить внимание на это обстоятельство и обсудить. 2) В разделе 3.3.2 оценки оптической ширины запрещенной зоны выполнены двумя методами, рассматривающими прямой и непрямой электронный переход. Однако в тексте не указан, какой переход в характерен для со-полиариленэфиркетонов с флуореновыми группами. 3) В работе желательно было обсудить, какие квантово-химические закономерности наблюдаются при переходе от мономеров к олигомерам. 4) Квантово-химические расчеты были выполнены для большой группы со-полиариленэфиркетонов. Однако для экспериментальных исследований выбраны со-полиариленэфиркетоны с изопропилиденовой и флуореновой функциональными группами. Сделанный выбор следовало обосновать.

3. Официального оппонента, доктора физико-математических наук, доцента, ведущего научного сотрудника кафедры теоретической физики и волновых процессов ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет» Феськова Сергея Владимировича. Отзыв положительный.

Имеются вопросы: 1) Проведенные в диссертации исследования ограничены бинарными сополимерами, каждый из которых образован только двумя видами функциональных групп (хотя и в разных концентрациях). По моему мнению, было бы полезным обсудить перспективы использования более сложных комбинаций элементов, например, со-ПАЭК с включением 3-х или 4-х различных базовых функциональных групп. 2) В пункте 3.1 автор обосновывает энергетическую устойчивость соединений ПАФ тем, что энтальпия ΔH соответствующих реакций поликонденсации имеет отрицательное значение. Было бы полезно привести рассчитанные значения ΔH , так как вопрос об энергетической устойчивости продуктов реакции зависит не только от знака ΔH , но и от ее величины. 3) В литературном обзоре встречаются не очень корректно сформулированные предложения,

что, по-видимому, связано с неточным переводом с английского. Например, «делокализация электронов в проводящих полимерах обеспечивает их превосходные электронные свойства». 4) Название 1-й главы представляется неудачным, потому что оно ничего не говорит о содержании представленных в ней материалов. 5) В тексте присутствуют синтаксические и грамматические ошибки, а также ошибки редакторского плана. Например, аббревиатура ПДФ расшифровывается только на стр. 62, хотя это обозначение используется ранее по тексту. Некоторые обозначения приводятся на английском языке при наличии русскоязычных аналогов. На рисунке 2.1(г) неправильно изображен флуорен-содержащий гомополимер. Формула (2.10) для ряда Тейлора записана с ошибками.

4. Доктора физико-математических наук, профессора кафедры физики и нанотехнологий ФГБОУ ВО «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы» Корнилова Виктора Михайловича. Отзыв положительный. Вопросов и замечаний нет.

5. Кандидата химических наук, научного сотрудника лаборатории математической химии Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения ФГБНУ Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук Тухбатуллиной Алины Асхатовны. Отзыв положительный. Имеются замечания: 1) В разделе 3.1 описана надмолекулярная организация тонких пленок ПАФ, но нет данных по со-ПАЭК. Чем обусловлен выбор данного объекта и каким образом возможно сопоставление с исследованиями со-ПАЭК? 2) Оформление рисунков отличается по стилю. В таблицах и на рисунках автореферата дробные части десятичных дробей отделены запятыми, хотя общепринятым считается отделение дробной части точками. В таблице 3 в качестве разделителя используются как точки, так и запятые.

6. Кандидата физико-математических наук, начальника научно-технического отдела ООО «АЛКОМ» Набиуллина Ильсура Рашитовича.

Отзыв положительный. Имеются замечания: 1) В работе присутствуют пунктуационные и орфографические ошибки. 2) Чем обусловлен выбор модельного соединения (полидифениленфталид)? 3) С чем связана большая концентрация носителей заряда при 5 % по сравнению с 10 %, 15 % и 20 %?

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:

- впервые интерпретировано нерегулярное изменение электронных свойств со-полиариленэфиркетонов на основе гипотезы о формировании активных центров в макромолекуле за счет определенной комбинации изопропилиденовой и флуореновой групп;

- показано, что уменьшение ширины запрещенной зоны со-полиариленэфиркетонов происходит при увеличении содержания функциональных групп от 0 до 35 % в химическом соединении;

- установлено, что увеличение содержания флуореновых групп со-ПАЭК приводит к нерегулярному изменению подвижности, концентрации носителей заряда и потенциального барьера на границе раздела металл (полупроводник)/полимер;

- проведен теоретический анализ причин, приводящих к возникновению уникальных электрофизических свойств в тонких пленках со-ПАЭК с флуорен содержащей функциональной группой, а также продемонстрирована определяющая роль структуры и состава используемого сополимера.

Практическая значимость данной работы заключается в наработке методов и инструментов для комплексного исследования оптических

и зарядо-транспортных свойств ряда новых сополимеров полиариленэфиркетонов для их последующего использования в фотовольтаических элементах, светоизлучающих структурах, электролюминесцентных диодах и др.

Результаты диссертационной работы позволяют найти пути для выбора предпочтительного химического соединения полимеров со-ПАЭК с конкретными электрофизическими характеристиками для устройств органической электроники.

Показаны возможности тонкой настройки ключевых характеристик полимерного материала путем изменения процентного содержания в нем изопропилиденовых, флуореновых и фталидных групп.

Оценка достоверности подтверждается многократной воспроизводимостью результатов, обсуждением на международных и всероссийских научных конференциях, использованием неоднократно апробированных экспериментальных методов и соответствием с известными литературными данными, а также согласованностью с результатами других авторов.

Личный вклад соискателя состоит в проведении квантово-химических расчетов, выполнении анализа результатов и их апробации, непосредственном участии во всех стадиях научно-исследовательского процесса. В указанных публикациях автор принимал участие в постановке задачи, обсуждении полученных результатов и оформлении работ. Диссертационная работа написана автором самостоятельно.

В ходе защиты диссертации было высказано критическое замечание по поводу того, что в работе нет точного объяснения природы немонотонных зависимостей от концентрации флуореновой группы.

Соискатель Байбулова Г.Ш. ответила на задаваемые ей в ходе заседания вопросы и пояснила, что параметры электронных транспортных процессов тонких пленок со-ПАЭК связаны с расположением

функциональных групп в макромолекуле, которые формируют конкретные локализованные электронные центры. Данные сочетания функциональных групп в макромолекуле со-ПАЭК имеют случайный характер (так как полимер статистический) и могут присутствовать в независимости от соотношения функциональных групп. Этим и обусловлена немонотонная зависимость электрофизических параметров от концентрации флуореновой группы.

На заседании 19 сентября 2024 г. диссертационный совет принял решение: за решение научной задачи, связанной с предложенным алгоритмом сопоставления результатов квантово-химических расчетов модельных для со-ПАЭК соединений с электрофизическими свойствами тонких пленок исследуемых полимеров, которые позволяют оценить наиболее вероятное расположение локальных функциональных центров в макромолекуле при заданном содержании функциональных групп присудить Байбуловой Галие Шафкатовне ученую степень кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 13 человек, из них 6 докторов физико-математических наук по профилю защищаемой диссертации, участвовавших в заседании; из 17 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за – 13, против – 0.

Председатель
диссертационного совета



Mustafin Мустафин Ахат Газизьянович

Ученый секретарь
диссертационного совета

Ismagilova

Исмагилова Альбина Сабирьяновна

19 сентября 2024 г.