

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по научно-
исследовательской работе
ФГБОУ ВО «БГПУ им. М.Акмуллы»

канд.биол.наук

С. А. ГАРЕЕВА

«06» февраля 2024 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы» (ФГБОУ ВО «БГПУ им. М. Акмуллы»)

Диссертация «Физико-химические особенности строения и электронные свойства некоторых со-полиариленэфиркетонов» выполнена на кафедре физики и нанотехнологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы».

В период подготовки диссертации соискатель Байбулова Галия Шафкатовна работала в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы» в должности старшего преподавателя кафедры физики и нанотехнологий и по совместительству младшим научным сотрудником в научно-исследовательской лаборатории «Нанoeлектроника перспективных материалов». В настоящее время Байбулова Г.Ш. является младшим научным сотрудником молодежной лаборатории «Прикладная физика и технологии наносенсорики» Федерального

государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы».

В 2010 году окончила Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы», присуждена квалификация «Учитель физики» по специальности «Физика»; в 2013 году завершила аспирантуру по очной форме обучения Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего 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 о сданных кандидатских экзаменах выдана 29 ноября 2022 года Федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы».

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

По итогам обсуждения диссертационной работы «Физико-химические особенности строения и электронные свойства некоторых сополиариленафиркетонов» принято следующее заключение:

Диссертация Байбуловой Галии Шафкатовны является самостоятельной законченной научно-квалификационной работой, в которой решены задачи по исследованию физико-химических особенностей строения и электронных свойств некоторых со-полиариленэфиркетонов. Данная работа имеет существенное теоретическое и прикладное значение для физической химии, полимерной электроники и направлена на решение следующих задач:

1. Теоретические исследования электронной структуры соединений модельных для со-ПАЭК (мономеры, димеры и тетрамеры) методами квантовой химии;

2. Исследование оптических спектров со-ПАЭК при вариации изопропилиденовой и флуореновой групп;

3. Исследование вольт-амперных характеристик металл/со-ПАЭК/ТСО при вариации изопропилиденовой и флуореновой групп полимера;

4. Установление общих закономерностей в изменении электрофизических характеристик со-ПАЭК при вариации функциональных групп и их химической структурой.

Динамическое развитие электроники стимулирует спрос на новые функциональные материалы, которые являются триггером к модернизации существующих и созданию качественно новых технологий производства функциональных устройств. Полимеры все чаще используются в качестве функциональных материалов в компонентах электронной базы благодаря широким возможностям управления их свойствами путем синтеза и технологической гибкости. На сегодняшний день синтезировано колоссальное количество полимеров, отличающихся разнообразием химической структуры. Особое место в современном синтезе новых высокомолекулярных соединений отводится прогнозированию физических свойств на основе химической структуры полимера. Тем не менее, некоторые свойства материалов могут резко отличаться от прогнозируемых и установление взаимосвязи не всегда является тривиальной задачей.

К подобным материалам, в частности, относится класс несопряженных полимеров – полигетероарилены, которые обладают комплексом ценных свойств: высокой термической стабильностью, тепло- и химической стойкостью в сочетании с хорошими механическими характеристиками. Но в то же время, в тонких пленках данных полимеров были найдены условия, при которых они демонстрируют свойства резистивного переключения проводимости от диэлектрического в анизотропное проводящее состояние, что имеет потенциал для дальнейшего внедрения в прикладную сферу. Следует подчеркнуть, что высокая проводимость достигается без использования легирования и введения в полимерную матрицу каких-либо электропроводящих наполнителей. В результате уникального сочетания высокой металлической проводимости и оптической прозрачности в видимой областях спектра делает эти полимеры перспективными в качестве прозрачных электрически активных молекулярно-однородных материалов.

Термопластичные сополимеры полиариленэфиркетонов (со-ПАЭК) с кардофлуореновыми фрагментами являются многообещающим клеевым материалом для обеспечения электрического контакта между токосъемными проводниками и слоем прозрачных проводящих оксидов (ТСО) в контактной системе солнечного элемента. Несмотря на обширные исследования в области кардоароматических полиэфиров, механизмы транспорта носителей заряда в структуре металл/со-ПАЭК/ТСО не достаточно изучены. Ранее отмечалось отсутствие очевидной корреляции между изменением концентрации функциональных групп в макромолекуле и термостимулированными токовыми явлениями в тонких пленках сополимеров полиариленэфиркетонов (со-ПАЭК) с изопропилиденовыми группами и вариацией содержания флуореновых или фталидных групп. Было установлено, что в запрещенной зоне сополимеров с флуореновыми и фталидными группами существует 4 уровня ловушечных состояний с разной энергией активации, для каждого вида сополимера. При этом их положение в зависимости от концентрации функциональных групп не существенно изменяется, но приводит к переносу энергии с одних центров на

другие в спектрах испускания фотолюминесценции. При этом, вопрос влияния количественного содержания функциональных фрагментов в макромолекуле на изменение электропроводности и механизмов протекания тока в тонких пленках полимера остается дискуссионным.

Научная новизна полученных результатов заключается в следующем:

- впервые интерпретировано немонотонное изменение электронных свойств со-полиариленэфиркетонов, основанное на гипотезе о различном строении функциональных центров в макромолекуле в зависимости от содержания функциональных групп в сополимере;

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

- установлено, что изменение электрофизических свойств гетероструктуры на основе со-ПАЭК при изменении содержания флуореновых групп вызвано изменением подвижности, концентрации носителей заряда и потенциального барьера на границе раздела металл (полупроводник)/ со-ПАЭК;

- проведен теоретический анализ причин, приводящих к возникновению уникальных электрофизических свойств в тонких пленках полимерных диэлектриков, а также продемонстрирована определяющая роль структуры и состава используемого сополимера.

Достоверность полученных результатов подтверждается применением стандартных программных продуктов для расчетов методами квантовой химии, использованием неоднократно апробированных экспериментальных методов и соответствием с известными литературными данными.

Практическая значимость и ценность результатов

Предложенный алгоритм сопоставления квантово-химических расчетов электронных свойств модельных соединений со-ПАЭК с электрофизическими свойствами тонких пленок полимера позволяет оценить наиболее вероятную

структуру локальных функциональных центров в макромолекуле при заданном содержании функциональных групп.

Результаты диссертационной работы позволяют оптимизировать работу по отбору химических соединений для обеспечения наилучшего электрического контакта между токосъемными проводниками и слоем прозрачных проводящих оксидов (ТСО) в контактной системе солнечного элемента.

По теме диссертации опубликовано 31 работа, из которых 10 – научные статьи, в том числе: 2 статьи в рецензируемых научных журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией 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 состав РИНЦ, 21 работа в трудах российских и международных научных конференций.

Список основных публикаций по теме диссертации:

В рецензируемых научных журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Российской Федерации:

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

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

В отечественных изданиях, которые входят в международные реферативные базы данных и системы цитирования (RCSI, Scopus, Web of Science):

3. Теоретическая оценка энергии сродства к электрону методами теории функционала плотности для производных хинона / Л.Р. Калимуллина, Е.П.

Нафикова, Н.Л. Асфандиаров, Ю.В. Чижов, Г.Ш. Байбулова, Э.Р. Жданов, Р.М. Гадиев // Журнал физической химии. – 2015. – Т. 89, № 3. – С. 426-432.

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

В рецензируемых научных журналах, входящих в РИНЦ:

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

6. Султанбаева, Г.Ш. Электронная структура мономеров, димеров и димерных комплексов полиариленфталидов / Г.Ш. Султанбаева, Л.Р. Калимуллина, Э.Р. Жданов, З.С. Самигуллина // Нанотехнологии: наука и производство. – 2010. – № 1 (6). – С. 85-90.

7. Галиев, А.Ф. Надмолекулярная структура полидифениленфталида: квантово-химические расчеты и эксперимент/ А.Ф. Галиев, Г.Ш. Байбулова, Э.Р. Жданов, Л.Р. Калимуллина, В.М. Корнилов, А.Н. Лачинов, А.С. Накаряков // Нанотехнологии: наука и производство. – 2012. – № 4 (19). – С.55.

8. Байбулова, Г.Ш. Квантово-химическое моделирование и атомно-силовая микроскопия надмолекулярной структуры тонких пленок полидифениленфталида / Г.Ш. Байбулова, А.Ф. Галиев, Э.Р. Жданов, В.М. Корнилов, А.Н. Лачинов, Л.Р. Калимуллина // Нанотехнологии: наука и производство. – 2013. – № 4 (25). – С. 9-13.

9. Галиев, А.Ф. Морфологические особенности металл/полимерных структур на основе пленок полидифениленфталида / А.Ф. Галиев, Р.М. Гадиев, А.А. Бунаков, Г.Ш. Байбулова, А.И. Сатыев // Нанотехнологии: наука и производство. – 2013. – № 4 (25). – С.27-30.

10. Калимуллина, Л.Р. Особенности взаимодействия ариленфталидов с избыточным зарядом / Л.Р. Калимуллина, Р.Г. Рахмеев, А.Н. Лачинов, Г.Ш. Байбулова, Э.Р. Жданов // Нанотехнологии: наука и производство. – 2013. – № 4 (25). – С.31-37.

Диссертация Байбуловой Галии Шафкатовны «Физико-химические особенности строения и электронные свойства некоторых со-полиариленэфиркетон» соответствует паспорту научной специальности 1.4.4. Физическая химия, а именно пунктам 1 – «Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик», 4 – «Теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия. Компьютерное моделирование строения, свойств и спектральных характеристик молекул и их комплексов в простых и непростых жидкостях, а также ранних стадий процессов растворения и зародышеобразования» и 11 – «Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных среды и белковом окружении».

Диссертационная работа соответствует требованиям п. 9-11, 13, 14 Постановления Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения ученых степеней», предъявляемым к кандидатским диссертациям. В диссертации соискатель ссылается на собственные опубликованные работы, а также на работы других ученых, материалы без ссылки или источника заимствования отсутствуют.

Диссертационная работа «Физико-химические особенности строения и электронные свойства некоторых со-полиариленэфиркетон» Байбуловой Галии Шафкатовны рекомендуется к защите на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.

Заключение принято на расширенном заседании кафедры физики и нанотехнологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы».

Присутствовало на заседании 14 человек. Принимали участие в голосовании 14 человек, имеющих право голоса. Результаты голосования: «за» – 14 чел., «против» – 0 чел., «воздержалось» – 0 чел., протокол № 5 от «06» февраля 2024 г.

Заведующий кафедрой
физики и нанотехнологий
ФГБОУ ВО «БГПУ им.М.Акмуллы»,
к.ф.-м.н., доцент

Измаилов Рамиль Наильевич

