

## УТВЕРЖДАЮ

Проректор по инновационной  
деятельности

ФГБОУ ВО «Уфимский университет  
науки и технологий»



/ Г.К. Агеев

2024 г.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения  
высшего образования «Уфимский университет науки и технологий»  
Министерства науки и высшего образования Российской Федерации

Диссертация «Кинетика [2+1]-циклоприсоединения объемных галогенметилкетонов к фуллерену  $C_{60}$  в условиях реакции Бингеля» выполнена на кафедре физической химии и химической экологии Института химии и защиты в чрезвычайных ситуациях Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий».

В период подготовки диссертации соискатель Саттарова Алина Фанилевна обучалась в аспирантуре (очная форма обучения) по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, направленность Физическая химия. С 2019 года работала в должности младшего научного сотрудника Лаборатории органических функциональных материалов в Уфимском институте химии – обособленном структурном подразделении Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Уфимский Федеральный исследовательский центр» Российской Академии наук. С 2023 г. по настоящее время работает в должности ассистента кафедры физической химии и химической экологии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий».

В 2019 г. окончила Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Башкирский государственный университет» по направлению подготовки 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия с присвоением квалификации «Химик. Преподаватель химии». В 2023 г. окончила аспирантуру по очной форме

обучения Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки с присвоением квалификации «Исследователь. Преподаватель-исследователь». Диплом об окончании аспирантуры выдан Федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» в 2023 г.

Справка об обучении со сведениями о сданных кандидатских экзаменах выдана Федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» в 2024 г.

Научный руководитель – Мустафин Ахат Газизьянович, доктор химических наук, профессор, заведующий лабораторией органических функциональных материалов Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Уфимский институт химии» – обособленного структурного подразделения Уфимского Федерального исследовательского центра Российской академии наук.

По итогам обсуждения диссертации принято следующее заключение:

Диссертация Саттаровой Алины Фанилевны на тему «Кинетика [2+1]-циклоприсоединения объемных галогенметилкетонов к фуллерену  $C_{60}$  в условиях реакции Бингеля», представленная на соискание ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия, является самостоятельным законченным исследованием, связанным с изучением кинетических и активационных параметров процесса циклопропанирования фуллерена объемными галогенметилкетонами с различной степенью разветвленности углеводородной цепи, анализом механизма вышеупомянутого взаимодействия, с целью изучения влияния структурных особенностей функционализирующих субстратов и иных условий, таких как температура и мольное соотношение реагирующих веществ, на скорость и селективность реакции. Для решения этой задачи использована комбинация экспериментальных (ВЭЖХ-методология) и теоретических (методы математического моделирования в программе DIP Solver и методы квантовой химии в программном пакете Gaussian09) методов исследования.

**Актуальность работы.** Исследование кинетики реакций функционализации фуллерена и, в частности, реакции Бингеля представляет собой актуальное направление современной физической химии, поскольку позволяет понять механизмы химических преобразований фуллерена и разработать эффективные методы их модификации для создания новых материалов с уникальными свойствами. Фуллерены обладают выдающимися физико-химическими характеристиками, такими как высокая электронная

подвижность, прочность и способность к переносу заряда, что делает их перспективными для использования в наноэлектронике, фотонике, медицине и других областях. Реакция Бингеля, как одна из ключевых реакций функционализации фуллерена, позволяет целенаправленно изменять их свойства, что открывает широкие возможности для синтеза новых функциональных материалов. Для эффективного и направленного синтеза новых производных фуллерена необходимо определить количественные характеристики в виде констант скорости стадий механизма, соответствующих образованию целевых аддуктов.

В связи с этим, задача установления кинетических параметров [2+1]-циклоприсоединения объемных галогенметилкетонів к  $C_{60}$  не только расширяет существующие представления о механизме и кинетике функционализации фуллерена по методике Бингеля, но и открывает возможности для решения проблемы контроля за течением и оптимизацией условий этого процесса.

**Научная новизна** исследования заключается в том, что:

- проанализировано влияние на кинетику процесса [2+1]-циклоприсоединения к  $C_{60}$  таких факторов как: строение функционализирующего субстрата (природы галогена и степени его разветвленности), мольного соотношения реагирующих веществ и температуры;
- квантово-химическим методом определены и описаны геометрические параметры всех участников процесса на пути превращения фуллерена в метанофуллерен и проанализированы элементарные акты функционализации экзо- $C_{60}$ .

**Научная и практическая значимость** работы:

- результаты, полученные на основе моделирования кинетики и механизма реакции циклопропанирования  $C_{60}$  объемными галогенметилкетонами, вносят значительный вклад в понимание особенностей кинетики реакций функционализации фуллерена и могут способствовать оптимизации условий синтеза для получения целевых продуктов с высоким выходом;
- результаты и выводы исследования могут быть применены при разработке теоретических и практических курсов по кинетике сложных, многостадийных процессов.

**Степень достоверности и апробация результатов.**

Высокая достоверность результатов достигнута благодаря тщательно проведенным экспериментам, применению современных физико-химических методов и использованию корректных методов квантово-химического и математического моделирования. Общие выводы эквивалентны результатам, полученным другими исследователями.

Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на всероссийских и международных конференциях, таких как: восьмом, девятом, десятом, одиннадцатом Международном междисциплинарном молодежном симпозиуме (LFPM, Ростов-на-Дону, 2019, 2020, 2021, 2022, соответственно), VIII Международной конференции «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов» (Москва, 2019), XIII, XIV Всероссийской научной интернет-конференции «Интеграция науки и высшего образования в области био- и органической химии и биотехнологии» (Уфа, 2019, 2020, соответственно), XXIII Всероссийской конференции молодых учёных-химиков (с международным участием) (Нижний Новгород, 2020), V, VI, VII Всероссийской молодежной конференции «Достижения молодых ученых: химические науки» (Уфа, 2020, 2021, 2022, соответственно), XII International Conference on Chemistry for Young Scientists “MENDELEEV 2021” (Saint Petersburg, 2021), VI Всероссийской молодежной конференции «Проблемы и достижения химии кислород- и азотсодержащих биологически активных соединений» (Уфа, 2022), XXIII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых «Химия и химическая технология в XXI веке» (Томск, 2022).

**Специальность, которой соответствует диссертация.**

Диссертация «Кинетика [2+1]-циклоприсоединения объемных галогенметилкетонов к фуллерену C<sub>60</sub> в условиях реакции Бингеля» соответствует паспорту научной специальности 1.4.4. Физическая химия, а именно:

пункту 1. Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик;

пункту 6. Химические превращения, потоки массы, энергии и энтропии пространственных и временных структур в неравновесных системах;

пункту 7. Макрокинетика, механизмы сложных химических процессов, физико-химическая гидродинамика, растворение и кристаллизация;

пункту 8. Динамика элементарного акта химических реакций. Механизмы реакции с участием активных частиц;

пункту 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 идиокристаллических матрицах, в полостях конденсированных сред и белковом окружении;

### **Личный вклад автора.**

Автор участвовал во всех стадиях научно-исследовательского процесса: от постановки задачи до проведения экспериментальных работ, обработки данных и их интерпретации, подготовки публикаций. Все выводы основаны на данных, полученных автором.

### **Список основных публикаций по теме диссертации.**

По материалам работы опубликовано 5 научных статей, из них 2 в рецензируемых научных журналах, рекомендованных перечнем ВАК РФ при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации, 3 включены в базы данных Web of Science и Scopus, и более 20 тезисов докладов, в том числе с международным участием.

*В рецензируемых научных журналах, рекомендованных перечнем Высшей аттестационной комиссии Российской Федерации:*

1. **Саттарова А. Ф.**, Мустафин А. Г. Квантово-химическое исследование изомеризации аддукта бис-циклоприсоединения галогенметилкетонов к фуллерену по методике Бингеля // Вестник Башкирского университета. – 2020. – Т. 25. – №. 2. – С. 278-284.
2. **Саттарова А.Ф.**, Биглова Ю.Н., Корнилов Д.А., Мустафин А.Г. DFT-исследование механизма реакции Бингеля на примере получения производного фуллерена, содержащего дитерпеновый фрагмент // Бутлеровские сообщения. – 2023. – Т. 75, №. 8. – С. 9-17.

*В рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus:*

3. **Sattarova A. F.**, Biglova Y. N., Mustafin A. G. Quantum-chemical approaches in the study of fullerene and its derivatives by the example of the most typical cycloaddition reactions: A review. Int. J. Quantum Chem. – 2022. – Т. 122, №. 7. – С. e26863.
4. **Sattarova A. F.**, Biglova Y. N., Mustafin I. A., Mustafin A. G. A Quantum Chemical Study of the Electrochemical Properties of a Series of Methanofullerenes // Chemistry and Technology of Fuels and Oils. – 2023. – Т. 59, №. 5. – С. 963-966.
5. **Sattarova A.F.**, Gordeev D.N., Ubaidzoda S.N., Saxhautdinov I.M., Ovchinnikov M.Yu., Biglova Yu.N., Mustafin I.A., Akhmetov A.F. Kinetic study of the synthesis of a fullerene derivative containing a diterpene fragment // Chemistry and Technology of Fuels and Oils. – 2024. – Т. 60, №. 1. – С. 7-13.

Результаты диссертационной работы обсуждались на научных семинарах кафедры физической химии и химической экологии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий». Основные положения диссертации Саттаровой А.Ф. представлены на конференциях международного и всероссийского уровней.

Диссертационная работа Саттаровой Алины Фанилевны является самостоятельной законченной научно-исследовательской работой и отвечает критериям п.п. 9-11, 13, 14 Постановления Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения ученых степеней», предъявляемым к кандидатским диссертациям. В диссертации отсутствуют заимствованный материал без ссылок на автора и (или) источник заимствования, результаты научной работы, выполненных соискателем ученой степени в соавторстве, без ссылок на соавторов.

Диссертация Саттаровой Алины Фанилевны на тему «Кинетика [2+1]-циклоприсоединения объемных галогенметилкетонов к фуллерену  $C_{60}$  в условиях реакции Бингеля» рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.

Заключение принято на заседании кафедры физической химии и химической экологии Института химии и защиты в чрезвычайных ситуациях Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий».

Присутствовало на заседании 18 чел., из них докторов наук 5 чел.

Результаты голосования: «за» – 18 человек, «против» – 0 человек, «воздержалось» – 0 человек.

Протокол № 8 от «23» апреля 2024 г.

Заместитель заведующего кафедрой  
физической химии и химической экологии  
ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и  
технологий»,  
доктор химических наук, профессор

Зимин  
Юрий Степанович

Подпись Зиминой Ю.С. заверяю:  
Ученый секретарь Ученого совета Уфимского  
университета науки и технологий,  
кандидат филологических наук, доцент



  
Ефименко Н.В.