

ЗАКЛЮЧЕНИЕ диссертационного совета **24.1.225.01**,
созданного на базе Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
«Федеральный исследовательский центр
«Казанский научный центр Российской академии наук»
Министерства науки и высшего образования Российской Федерации
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

Аттестационное дело № _____

Решение диссертационного совета от 20 октября 2021 г., протокол № 26

о присуждении Габдулхаеву Мухаммету Нафисовичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Управление полиморфными превращениями производных каликсаренов, индуцированными парами «гостей» по специальности 1.4.4. Физическая химия принята к защите 06 июля 2021 года, протокол № 11, диссертационным советом 24.1.225.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук» (ФИЦ КазНЦ РАН) Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 420111, Республика Татарстан, г. Казань, ул. Лобачевского, д. 2/31, приказ Минобрнауки РФ № 553/нк от 23.05.2018.

Соискатель, **Габдулхаев Мухаммет Нафисович**, 20.04.1993 года рождения, в 2016 г. окончил федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет» (ФГАОУ ВО КФУ) по специальности «Химия». В период подготовки диссертации соискатель Габдулхаев Мухаммет Нафисович являлся аспирантом очной формы обучения кафедры физической химии Химического института им. А.М. Бутлерова ФГАОУ ВО КФУ по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки. В настоящий момент является младшим научным сотрудником кафедры физической химии ФГАОУ ВО КФУ Министерства науки и высшего образования и науки РФ.

Диссертация выполнена на кафедре физической химии ФГАОУ ВО КФУ Министерства науки и высшего образования РФ.

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор Горбачук Валерий Виленович, профессор кафедры физической химии Химического института им. А.М. Бутлерова ФГАОУ ВО КФУ Министерства науки и высшего образования РФ.

Официальные оппоненты:

Князев Андрей Александрович, доктор химических наук, доцент, заведующий кафедрой технологии косметических средств Казанского национального исследовательского технологического университета

Лодочникова Ольга Александровна, кандидат химических наук, старший научный сотрудник лаборатории дифракционных методов исследований Института органической и физической химии им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН,

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», в своем положительном заключении, составленном и подписанном доктором химических наук, профессором, заведующим НИЛ «Строения конденсированных систем» Лысенко Константином Александровичем и доктором химических наук, заведующим кафедрой физической химии химического факультета МГУ Горюнковым Алексеем Анатольевичем, указала, что «диссертационное исследование Габдулхаева М.Н. «Управление полиморфными превращениями производных каликсаренов, индуцированными парами «гостей», представленное к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия, является законченной целостной научно-квалификационной работой, которая содержит решение актуальной научной задачи - разработка способов воспроизводимого приготовления метастабильных полиморфов, включая управление полиморфными превращениями из метастабильной формы

в стабильную и обратно. ...Габдулхаев Мухаммет Нафисович заслуживает присуждения искомой степени по специальности 1.4.4. Физическая химия».

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации проводился из числа специалистов, компетентных в соответствующей отрасли науки, а именно в области физической химии процессов кристаллизации сложных органических молекул и определения супрамолекулярной структуры и фазовых переходов комплексных соединений, обосновывался их публикационной активностью в области физической химии и способностью дать профессиональную оценку новизны и научно-практической значимости рассматриваемого диссертационного исследования.

На автореферат диссертации поступило **3** отзыва, все положительные. Отзывы получены от:

- 1) д.х.н., ведущего научного сотрудника Федорова Ю.В. (Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, г. Москва); *без замечаний*;
- 2) к.х.н., доцента Гуськова Владимира Юрьевича (Башкирский государственный университет, г. Уфа); *отзыв содержит замечание об отсутствии обоснования деления молекул органических веществ на «гостей» и «антигостей»*;
- 3) д.х.н., главного научного сотрудника Арсланова Владимира Валентиновича (Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, г. Москва); *отзыв содержит вопрос о сопоставлении поведения различных приготовленных стабильных полиморфных модификаций каликсаренов в отношении реализации ими полезных характеристик*.

Соискатель имеет 2 статьи (обе по теме диссертации), опубликованные в зарубежных рецензируемых научных изданиях, входящих в перечень журналов, индексируемых в международной информационно-аналитической системе научного цитирования Web of Science. Общий объем опубликованных по теме диссертации работ составляет 20 стр. Работы написаны соискателем в соавторстве с другими исследователями, личный вклад диссертанта составляет 80-90% и заключается в выполнении основной части экспериментальной работы, в анализе литературных данных и обобщении полученных результатов.

Диссертационная работа не содержит недостоверных сведений об опубликованных соискателем работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации.

Опубликованные работы соискателя:

1. Gabdul Khaev, M.N. Smart control of calixarene polymorphic states / M.N. Gabdul Khaev, M.A. Ziganshin, A.V. Buzyurov, C. Schick, S.E. Solovieva, E.V. Popova, A.T. Gubaidullin, V.V. Gorbachuk // CrystEngComm. – 2020. – V. 22. – P. 7002-7015.

2. Gabdul Khaev, M.N. Nonlinear effect of two remembered guests in their mixtures on the host memory for guest inclusion and release / M.N. Gabdul Khaev, A.K. Gatiatulin, M.A. Ziganshin, V.V. Gorbachuk // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. – 2016. – V. 126. – P. 627-632.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- **разработан** способ воспроизводимого приготовления метастабильных полиморфов вещества, способного к образованию соединений включения (клатратов, сольватов);

- **обнаружена** возможность управления полиморфными превращениями производного тиакаликс[4]арена, позволяющего переключать его упаковку из стабильной в метастабильную и обратно путем последовательного насыщения парами разных «гостей» без полного растворения «хозяина», нагрева и сушки;

- **показано**, что высокоскоростная сканирующая калориметрия позволяет более эффективно различать полиморфы по величине температуры плавления, чем обычная дифференциальная сканирующая калориметрия;

- **показана** возможность разделения смеси летучих соединений с близкими температурами кипения и размерами молекул путем связывания паров смеси трет-бутилкаликс[6]ареном и последующего ступенчатого разложения образующихся смешанных клатратов.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- **предложена** термодинамическая схема образования полиморфов, позволяющая выбрать оптимальный способ их воспроизводимого приготовления

с использованием твердофазного замещения/вытеснения связанных «гостей» (растворителей) из клатратов (сольватов, соединений включения), в том числе способ приготовления метастабильных полиморфов, плавящихся в диапазоне температур ухода связанных «гостей» (растворителей) с холодной кристаллизацией в стабильную форму при дальнейшем нагреве.

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

- разработанные способы воспроизводимого приготовления метастабильных полиморфов обладают большим потенциалом для применения при скрининге полиморфов лекарственных веществ, а также для приготовления рецепторов с заданной сорбционной емкостью и селективностью связывания пареообразных веществ, например, в сенсорных системах;

- **предложен** способ разделения бинарной смеси летучих соединений с близкими температурами кипения и размерами молекул с помощью трет-бутилкаликс[6]арена.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

достоверность результатов подтверждается согласованностью экспериментальных данных, полученных с помощью разных экспериментальных методов для приготовленных полиморфов и клатратов, а также соответствием полученных результатов общим положениям термодинамики фазовых переходов.

Личный вклад соискателя заключается в выполнении основной части экспериментальной работы по диссертации; в анализе литературных данных и обобщении полученных результатов; участии в подготовке публикаций по теме диссертационного исследования; в апробации результатов.

В ходе защиты были высказаны критические замечания, касающиеся выбора объектов исследования. Соискатель Габдулхаев М.Н. ответил на задаваемые в ходе заседания вопросы и привел собственную аргументацию, а именно: производное трет-бутилтиакаликс[4]арена и трет-бутилкаликс[6]арен были выбраны в качестве объектов исследования в ходе скрининга большого числа

соединений со схожими структурными особенностями по способности к образованию метастабильных полиморфов.

На заседании 20 октября 2021 года диссертационный совет принял решение присудить Габдулхаеву Мухаммету Нафисовичу ученую степень кандидата химических наук за решение научной задачи, заключающейся в разработке способа приготовления метастабильных полиморфов с низкой первой температурой плавления, а также способа управления полиморфными взаимопревращениями метастабильной и стабильной форм, имеющей значение для развития физической химии полиморфов лекарственных веществ и рецепторов с заданной сорбционной емкостью.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 5 докторов наук по специальности 1.4.4. Физическая химия, участвовавших в заседании, из 26 человек, входящих в состав совета, проголосовали за – 18, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Заместитель председателя диссертационного совета,

доктор химических наук

Литвинов Игорь Анатольевич

Ученый секретарь диссертационного совета,

кандидат химических наук

Торопчина Асия Васильевна

20.10.2021