

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Паймурзиной Натальи Халитовны «Прогноз физико-химических свойств полициклических ароматических углеводородов нефтяных фракций по моделям «структура-свойство» и «спектр-свойства», представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.12. Нефтехимия

Диссертационная работа Паймурзиной Н.Х. актуальна не только для нефтехимии, но и для нанoeлектроники, т.к. позволяет оценить энергии молекулярных орбиталей графеноподобных наночастиц и графеновых нанолент.

Основным результатом работы, на мой взгляд, является установление эффектов, связывающих относительный интегральный автокорреляционный параметр широкого сигнала оптического спектра с потенциалами ионизации (ПИ) и сродством к электрону (СЭ) полициклических ароматических углеводородов (ПАУ). Подобные эффекты дают возможность разрабатывать принципиально новые методики оценки потолка и дна зоны проводимости наночастиц.

Обнаруженные эффекты обусловлены, по-видимому, явлениями электронной корреляции. Кроме экспериментов, автором проделана большая вычислительная работа, связанная с квантово-химическими расчётами методами DFT и RHF-6-31G**, а также созданием соответствующей базы данных. Недостатком работы является недостаточное описание применимости обнаруженных закономерностей в молекулярной электронике и нанотехнологиях.

В качестве пожелания хотелось бы отметить необходимость продолжения этой работы применительно к задачам нанотехнологии.

Считаю, что диссертационная работа Паймурзиной Натальи Халитовны соответствует требованиям, предъявляемым ВАК Российской Федерации к кандидатским диссертациям (п. 9 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г.), автор работы заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.12. Нефтехимия.

Доктор физико-математических наук
(01.04.04 – Физическая электроника),
профессор, профессор кафедры физической
электроники и нанofизики Физико-
технического института ФГБОУ ВО
«Уфимский университет науки и технологий»
Почтовый адрес организации: 450076,
Российская Федерация, г. Уфа, ул. Заки
Валиди, 32А. Тел.: +7 (917) 410-98-71 (моб).

E-mail: ruouJ@bsunet.ru

«12» января 2024 г.

Рауф Загидович Бахтизин

Подпись Бахтизина Р.З. заверяю:

Ученый секретарь Ученого совета университета
кандидат филологических наук, доцент

«12» января 2024 г.



/Н.В. Ефименко