

Заключение диссертационного совета МГУ.014.03 (МГУ.02.04)
по диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук

Решение диссертационного совета от «17» июня 2022 г. №108

О присуждении Косой Марии Петровне, гражданке РФ, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Синтез, строение и электронные свойства семейства трифторметилфуллеренов $C_{70}(CF_3)_n$, $n=2-20$ » по специальности 1.4.4. (02.00.04) – «Физическая химия» (химические науки) принята к защите диссертационным советом 13.05.2022, протокол № 104.

Соискатель Косая Мария Петровна, 1994 года рождения, в 2021 году окончила аспирантуру химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Соискатель работает младшим научным сотрудником в НИЛ термохимии кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Диссертация выполнена в лаборатории термохимии кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Научный руководитель – доктор химических наук, доцент Горюнков Алексей Анатольевич, заведующий кафедрой физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Официальные оппоненты:

- Магдесиева Татьяна Владимировна, доктор химических наук, профессор, химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, кафедра органической химии, профессор;

- Конарев Дмитрий Валентинович, доктор химических наук, профессор РАН, ФГБУ науки Институт проблем химической физики Российской академии наук (ИПХФ РАН), Отдел кинетики и катализа, главный научный сотрудник;

- Хаматгалимов Айрат Раисович

доктор химических наук, Институт органической и физической химии (ИОФХ) имени А.Е. Арбузова – обособленное структурное подразделение ФГБУ науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр РАН», лаборатория физико-химического анализа, заместитель руководителя по научной работе

дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 16 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 9 работ, из них 3 статьи, опубликованные в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.4.4. (02.00.04) – «Физическая

химия»:

1. **M.P. Kosaya**, T.S. Yankova, A.V. Rybalchenko, N.B. Tamm, I.N. Ioffe, N.S. Lukonina, N.M. Belov, A.A. Goryunkov. Electrochemically–Induced Dimerization of $p^9mp\text{-C}_{70}(\text{CF}_3)_{12}$ Trifluoromethylated Fullerene // The Journal of Physical Chemistry A – 2021. – V. 125. – № 36. – P. 7876–7883. (Импакт-фактор WoS 2020 2.781).
2. **M.P. Kosaya**, A.V. Rybalchenko, N.S. Lukonina, O.N. Mazaleva, I.N. Ioffe, V.Yu. Markov, S.I. Troyanov, L.N. Sidorov, N.B. Tamm, A.A. Goryunkov. Facile separation, spectroscopic identification, and electrochemical properties of higher trifluoromethylated derivatives of the [70]fullerene // Chemistry – An Asian Journal – 2018. – Vol. 13. – № 15. – P. 1920–1931. (Импакт-фактор WoS 2020 4.568).
3. O.O. Semivrazhskaya, A.V. Rybalchenko, **M.P. Kosaya**, N.S. Lukonina, O.N. Mazaleva, I.N. Ioffe, S.I. Troyanov, N.B. Tamm, A.A. Goryunkov. Lower trifluoromethyl[70]fullerene derivatives: novel structural data and an survey of electronic properties // Electrochimica Acta – 2017. – Vol. 255. – P. 472–481. (Импакт-фактор WoS 2021 6.901).

На диссертацию и автореферат поступило 5 дополнительных отзывов, все положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их компетентностью в области электрохимии, химии фуллеренов и их производных, а также наличием публикаций в высокорейтинговых международных журналах по темам, связанным с предметом диссертационного исследования.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата химических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований разработана методика хроматографического выделения индивидуальных высших трифторметилфуллеренов $\text{C}_{70}(\text{CF}_3)_n$, $n=12\text{--}20$, установлена взаимосвязь между их электронным строением, оптическими характеристиками и химическим поведением.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. Методом многоступенчатого ВЭЖХ разделения с использованием хроматографических колонок с модификаторами Cosmosil Buckyprep (CB) и Cosmosil Buкупrep-D (CB-D) возможно выделение в индивидуальном виде высших трифторметилфуллеренов $\text{C}_{70}(\text{CF}_3)_n$, $n=12\text{--}20$.

2. Расположение групп CF_3 на фуллереновой сфере определяет электроноакцепторные свойства трифторметилфуллеренов $\text{C}_{70}(\text{CF}_3)_n$, $n=2\text{--}20$. Первые

потенциалы восстановления и окисления, а также ширина оптического зазора линейно коррелируют со значениями энергий НВМО, ВЗМО и величинами энергетического зазора НВМО–ВЗМО, рассчитанными методом теории функционала плотности (PBE/tz2p).

3. Сохранение свободным от аддендов одного из полюсов фуллеренового каркаса в соединениях $p^7mp-C_{70}(CF_3)_{10}$ и $p^9mp-C_{70}(CF_3)_{12}$, способствует димеризации их анион-радикалов при комнатной температуре, а наличие фрагмента скошенной пентагональной пирамиды в соединениях состава $C_{70}(CF_3)_n$, $n=16-20$, обуславливает отрыв группы CF_3 в анионах данных соединений.

На заседании 17.06.2022 диссертационный совет принял решение присудить Косой М.П. ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 5 докторов наук по специальности 1.4.4 (02.00.04) – «физическая химия» (химические науки), участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета, проголосовали: «за» – 18, «против» – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Зам. председателя
диссертационного совета,
д.х.н., профессор РАН

Лысенко К.А.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
к.х.н., доцент

Шилина М.И.

17.06.2022