

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.150.01 НА БАЗЕ  
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ  
НАУКИ ИНСТИТУТА ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ И ГОРЕНИЯ  
ИМ. В. В. ВОЕВОДСКОГО СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ  
АКАДЕМИИ НАУК МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО  
ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА  
СОИСКАНИЕ УЧЁНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_  
решение диссертационного совета от 05.02.2025, № 2

О присуждении Гафаровой Альбине Разитовне, гражданке Российской Федерации, учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация *«Конформации солей глюконовой кислоты в условиях гамма-облучения и механохимической обработки по данным ЭПР и квантовой химии»* в виде рукописи по специальности 1.3.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» принята к защите 18 ноября 2024 г., протокол № 23, диссертационным советом 24.1.150.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук (ИХКГ СО РАН), Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 630090, г. Новосибирск, ул. Институтская, д. 3, приказ о создании диссертационного совета № 1511/нк-от 25.11.2016 года.

Соискатель, *Гафарова Альбина Разитовна*, 1994 года рождения, на момент защиты диссертации работает в должности младшего научного сотрудника Казанского физико-технического института им. Е.К. Завойского – обособленного структурного подразделения ФГБУН «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской Академии Наук» (КФТИ ОСП ФИЦ КазНЦ РАН).

Диссертация выполнена в лаборатории радиационной химии и радиобиологии КФТИ ОСП ФИЦ КазНЦ РАН.

*Научный руководитель – Гумаров Габдрауф Габдрашитович*, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории радиационной химии и радиобиологии Казанского физико-технического института им. Е.К. Завойского – ОСП «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской Академии Наук» (КФТИ ОСП ФИЦ КазНЦ РАН), г. Казань.

*Официальные оппоненты:*

1. ***Воронина Елена Валентиновна***, доктор физико-математических наук, заведующая кафедрой физики твердого тела (ФТТ) Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет» (ФГАОУ ВО КФУ), г. Казань;

2. ***Чумакова Наталья Анатольевна***, доктор химических наук, главный научный сотрудник лаборатории кинетики механохимических и свободно-радикальных процессов им. В.В. Воеводского Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН), г. Москва;

дали ***положительные отзывы*** на диссертацию.

*Ведущая организация*, Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук» (ФИЦ КНЦ СО РАН), г. Красноярск, в своём ***положительном заключении***, подписанном доктором физико-математических наук, старшим научным сотрудником лаборатории физики магнитных явлений Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленного структурного подразделения ФИЦ КНЦ СО РАН – ***Томилиным Феликсом Николаевичем***, доктором физико-математических наук, директором Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленного структурного

подразделения ФИЦ КНЦ СО РАН – *Балаевым Дмитрием Александровичем*, утверждённом директором ФИЦ КНЦ СО РАН, доктором сельскохозяйственных наук, чл.-корр. РАН – *Шпедт Александром Артуровичем*, указала, что данная диссертационная работа удовлетворяет требованиям п. 9 Положения «О порядке присуждения учёных степеней», утверждённом Постановлением правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (в текущей редакции), а её автор, Гафарова А.Р., заслуживает присвоения ей искомой учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

В положительном заключении ведущей организации имеются следующие замечания и вопросы.

- при описании характеристик механоактивированного глюконата кальция указывается размер образующихся частиц, однако размер исходных частиц не указан;
- автор отмечает существенную зависимость формы спектра ЭПР от дозы облучения глюконата кальция, однако для глюконата натрия такой зависимости не наблюдается, чем можно объяснить такую разницу?
- делались ли эксперименты по облучению образцов при пониженной температуре?
- варьировалась ли мощность СВЧ с целью уменьшения интенсивности отдельных сигналов за счет их насыщения и как следствие идентификации спектров отдельных радикалов?
- как описано в главе 4, образцы глюконата кальция были подвергнуты механохимической обработке с последующим облучением, проводились ли эксперименты в обратной последовательности?
- на рисунках кристаллической структуры глюконата кальция и модели механоактивированного глюконата кальция не обозначены основные атомы.

Соискатель имеет 4 научные работы (из них 4 по теме диссертации), опубликованных в отечественных и международных рецензируемых научных изданиях, входящих в список ВАК. Двенадцать работ опубликованы в материалах всероссийских и международных конференций и симпозиумов.

*Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:*

1. The influence of gamma rays radiation on optically Induced luminescence of copper-containing potassium-lithium-borate glass / P.S. Shirshnev, V. A. Spiridonov, D. I. Panov, E. V. Shirshneva-Vaschenko, **A. R. Gafarova**, R. M. Eremina, A. E. Romanov, V. E. Bougrov // Materials Physics and Mechanics. – 2019. Vol.42. P. 198-203.
2. Study of Conformation of  $\gamma$ -Irradiated Calcium Gluconate by EPR / **A. R. Gafarova**, G. G. Gumarov, M. M. Bakirov, R. B. Zaripov, V. Yu. Petukhov. // Applied Magnetic Resonance. – 2021. – Vol.52. P. 571–580.
3. Quantum- Chemical Calculations in Studying the Conformation of  $\gamma$ - Irradiated Calcium Gluconate / **A. R. Gafarova**, G. G. Gumarov, M. M. Bakirov, M. Yu. Volkov, R. B. Zaripov, V. Yu. Petukhov // Applied Magnetic Resonance. – 2021. Vol.52. P. 1739–1748.
4. Многочастотное ЭПР исследование радикалов, образующихся под действием  $\gamma$ -облучения и механоактивации в глюконате кальция / **А.Р. Гафарова**, Г.Г. Гумаров, Р.Б. Зарипов, Д.С. Рыбин, Г.Н. Коньгин // Химическая физика и мезоскопия. – 2024. Т. 26, № 3. С. 299-305

На автореферат диссертации поступило 5 отзывов. Все отзывы положительные, из них 4 содержат замечания. Отзывы поступили от:

- доктора физико-математических наук **Гафурова Марата Ревгеровича**, директора Института физики, профессора кафедры медицинской физики федерального государственного образовательного учреждения высшего образования «Казанский (приволжский) федеральный университет»;
- доктора химических наук **Деминной Татьяны Сергеевны**, старшего научного сотрудника лаборатории твердофазных химических реакций

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института синтетических полимерных материалов им. Н. С. Еникопова Российской академии наук (ИСПМ РАН);

- кандидата химических наук **Аксеновой Надежды Анатольевны**, старшего научного сотрудника лаборатории «Модифицированных систем» Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федерального исследовательского центра химической физики им Н.Н. Семенова» Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН);
- кандидата химических наук **Котовой Светланы Леонидовны**, ведущего научного сотрудника лаборатории макромолекулярного дизайна Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования Первого Московского государственного медицинского университета им И.М. Сеченова Министерства здравоохранения РФ;
- кандидата физико-математических наук **Савостиной Людмилы Ивановны**, доцента кафедры физики молекулярных систем Института физики Федерального государственного образовательного учреждения высшего образования «Казанский (приволжский) федеральный университет».

Из отзывов на автореферат два не содержат замечаний (**Демина Т.С., Аксенова Н.А.**). В остальных имеются следующие вопросы и замечания:

- неясно, почему использовалось именно гамма-облучение, предпринимались ли автором исследования с другими видами ионизирующего излучения и воздействием ультрафиолетового излучения? (**Гафуров М.Р.**);
- на стр. 8 указано, что спектры ЯМР регистрировались для растворов глюконата кальция, однако подпись к рисунку 1 утверждает, что представлены твердотельные спектры ЯМР, что из этого верно? (**Гафуров М.Р.**);

- в основных результатах и выводах утверждается, что при облучении дозой 1000 Гр не наблюдается существенной деструкции молекулы, однако в тексте работы говорится, что изменения в спектрах ИК и ЯМР незначительны и не позволяют сделать такие выводы (*Гафуров М.Р.*);
- не показана зависимость интенсивности сигнала ЭПР от времени механоактивации (*Котова С.Л.*);
- из представленной информации в автореферате неясно каким именно базисом были проведены расчеты тензоров СТВ и g-тензоров и почему был выбран именно этот базис (*Савостина Л.И.*);
- кроме того, есть ряд замечаний стилистического характера (*Гафуров М.Р.*).

В положительных отзывах оппонентов имеются следующие замечания и вопросы:

*Воронина Е. В.:*

- отсутствуют дифракционные данные для облученных образцов, структурная и дисперсная форма этих материалов непонятна, электронно-микроскопические исследования могли бы внести ясность в этот вопрос;
- в диссертации указывается на ЭПР исследование серии образцов, подвергнутых облучению гамма-квантами с дозами 400, 600, 800 и 1000 Грей, однако, приводятся и расшифровываются спектры только двух образцов, соответствующих минимальной и максимальной дозами; расшифровывались ли спектры образцов, соответствующих промежуточным дозам, является ли логичным, закономерным соотношение компонент этих спектров?
- в диссертации указывается, что основной вклад в ЭПР спектр облученного глюконата кальция вносят спектры радикалов на С3 атоме, что объясняется «большими торсионными напряжениями», однако,

значения торсионных углов не указывают на исключительное расположение С3-центрированных радикалов;

- согласно результатам, углеродцентрированные радикалы, а также радикал R в гамма-облученном глюконате кальция оказываются стабильными при комнатной температуре, при этом не происходит существенных конформационных изменений в молекуле; в механоактивированном глюконате кальция и радикал R и углеродцентрированные радикалы также образуются, однако, радикалы фрагмента С3-С5 успевают рекомбинировать, что сопровождается изменением геометрии молекулы. Почему? Пояснить логику суждений;
- сделан ряд замечаний технического и стилистического характера;
- не указаны погрешности определения химических сдвигов в ЯМР исследованиях.

***Чумакова Н.А.:***

- в работе представлены две деконволюции спектра ЭПР облученного глюконата кальция, по мнению оппонента следовало провести сравнение структурных параметров, полученных на основании двух деконволюций;
- в работе не указаны погрешности определения торсионных углов;
- нет информации о рассчитанных константах СТВ на  $\beta$ -протонах спиртовых групп;
- неясно, почему при облучении глюконата кальция не образуются радикалы на атомах углерода С4;
- подписи к рисункам 3.4 и 3.5 перепутаны и не совсем верны.

Во всех отзывах отдельно отмечается, что указанные замечания не снижают научной и практической значимости диссертационной работы. Все отзывы заканчиваются выводом, что диссертационная работа Гафаровой А.Р. **полностью соответствует** требованиям, которые ВАК предъявляет к кандидатским диссертациям, а её автор – Гафарова А.Р. – заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по

специальности 1.3.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

*Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается компетентностью оппонентов и сотрудников ведущей организации в области магниторезонансных методов, квантовой химии и структурной химии конденсированных веществ, что подтверждается наличием у них публикаций ряда научных работ в данной области исследований, в том числе соответствующих тематике диссертационного исследования соискателя и опубликованных в ведущих российских и международных журналах и изданиях.*

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

- впервые *установлено*, что при гамма-облучении глюконатов кальция и натрия образуются стабильные при комнатной температуре радикалы, локализованные на атомах C2, C3, C4, C5 в глюконате натрия и C2, C3, C5, а также радикал R в глюконате кальция;

- *определены* магниторезонансные параметры углеродцентрированных радикалов;

- *установлены* торсионные углы между p-орбиталями атомов углерода, на которых локализованы неспаренные электроны и направлениями связей C-N ближайших  $\beta$ -протонов в гамма- облученных глюконатах кальция и натрия;

- впервые *представлена* модель механоактивированного глюконата кальция.

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что в результате проделанной работы были получены данные о структуре гамма-облучённых глюконатов кальция и натрия. Установлены типы, положения, магниторезонансные параметры радикалов, образующихся при облучении данных соединений. Предложена модель молекулы механоактивированного глюконата кальция.**

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики заключается в** представленном подходе к исследованию конформации молекул в аморфной фазе, позволившем впервые получить данные о структуре механоактивированного глюконата кальция. Предложенная методика может быть использована для анализа структуры подобных соединений. Продемонстрированная в работе зависимость формы ЭПР спектра  $\gamma$ -облученного глюконата кальция от дозы облучения обуславливает потенциал использования данного соединения в качестве ЭПР дозиметров и маркеров облучения.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила, что:** *сделанные выводы и полученные научные результаты основаны на применении современных экспериментальных методов, теоретических и численных подходов; проведены тщательные экспериментальные измерения и полученные результаты согласуются с известной совокупностью экспериментальных данных.*

**Личный вклад соискателя состоит в** поиске, анализе и обобщении литературных данных по теме исследования, в постановке научных задач, решаемых в данной диссертационной работе, разработке плана исследований. Соискатель принимал непосредственное участие в планировании и проведении экспериментов, проведении расчетов, анализе и обсуждении полученных результатов исследований, формулировке выводов. Подготовка тезисов докладов и статей проводилась автором совместно с научным руководителем и соавторами работ.

Диссертация выполнена на высоком научном уровне и представляет собой законченное исследование с актуальными задачами и содержательными, фундаментальными и практически важными результатами. Материалы диссертации соответствуют требованиям специальности 1.3.17 «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» (п.1 «Атомно-молекулярная структура химических частиц и веществ», п.2 «Пространственное и электронное строение, атомно-молекулярные параметры

изолированных атомов, ионов, молекул», «структура и свойства кристаллов, аморфных тел жидкостей»). Соискатель Гафарова А.Р. успешно ответила на все задаваемые ей вопросы присутствующими на заседании, на замечания, приведенные в отзыве ведущей организации и отзывах на автореферат. Соискатель дал четкие аргументированные ответы по научным вопросам и согласился со всеми техническими замечаниями и пожеланиями.

На заседании 5 февраля 2025 г. диссертационный совет постановил: за решение научной задачи, связанной с развитием подходов к изучению строения аморфных систем методами магнитного резонанса, присудить *Гафаровой Альбине Разитовне* учёную степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 22 человек, из них 14 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании и голосовании, из 24 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение учёной степени - 21, против присуждения учёной степени - 0, недействительных бюллетеней - 1.

Председатель диссертационного совета,

д-р хим. наук, доцент



Онищук Андрей Александрович

Ученый секретарь диссертационного совета

канд. хим. наук

Поздняков Иван Павлович

07.02.2025 г.