

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Башкирский государственный университет»

**ВЫПИСКА ИЗ ПРОТОКОЛА № 269**

заседания диссертационного совета Д 212.013.10  
от «06» февраля 2020 г.

**ПРИСУТСТВОВАЛИ:** д.х.н. Мустафин А.Г., д.ф.-м.н. Спивак С.И., д.ф.-м.н. Мустафина С.А., д.ф.-м.н. Асфандиаров Н.Л., д.ф.-м.н. Балапанов М.Х., д.х.н. Борисов И.М., д.х.н. Герчиков А.Я., д.ф.-м.н. Губайдуллин И.М., д.х.н. Зимин Ю.С., д.ф.-м.н. Исмагилова А.С., д.х.н. Колесов С.В., д.ф.-м.н. Лачинов А.Н., д.ф.-м.н. Мигранов Н. Г., д.ф.-м.н. Салихов Р.Б., д.х.н. Талипов Р.Ф., д.х.н. Хайруллина В.Р., д.х.н. Шарипов Г.Л., д.ф.-м.н. Якшибаев Р.А.

**СЛУШАЛИ:** защиту диссертации Калимуллиной Луизы Раяновны на тему «Физико-химия потенциальных барьеров на границе раздела металл/полиарилефталид» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 02.00.04 - Физическая химия.

**ПОСТАНОВИЛИ:** 1. На основании результатов тайного голосования членов совета (из присутствовавших на заседании 18 человек, из них 10 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, проголосовали: «за» – 18, «против» – 0, недействительных бюллетеней – нет) присудить Калимуллиной Луизе Раяновне ученую степень кандидата физико-математических наук по научной специальности 02.00.04 – Физическая химия.

2. Принять следующее

## **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.013.10, созданного  
на базе Федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Башкирский государственный университет»  
Министерства науки и высшего образования Российской Федерации  
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 06 февраля 2020 г. № 269

О присуждении Калимуллиной Луизе Раяновне, гражданину РФ, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Физико-химия потенциальных барьеров на границе раздела металл/полиарилефталид» по научной специальности 02.00.04 – Физическая химия принята к защите 24 октября 2019 года, протокол № 263, диссертационным советом Д 212.013.10, созданным на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (450076, г. Уфа, ул. З. Валиди, 32), приказ №105/нк от 11.04.2012 г.

Соискатель Калимуллина Луиза Раяновна, 1987 года рождения. В 2009 году соискатель окончила Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М.Акмуллы» по специальности «Физика». В период с 2009 по 2012 годы обучалась в очной аспирантуре по научной специальности 01.04.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН».

В настоящее время работает старшим преподавателем кафедры прикладной физики и нанотехнологий Федерального государственного

бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М.Акмуллы» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре прикладной физики и нанотехнологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М.Акмуллы» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – Лачинов Алексей Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой прикладной физики и нанотехнологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М.Акмуллы».

Официальные оппоненты:

1. Иванов Анатолий Иванович, доктор физико-математических наук (01.04.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества), профессор, профессор кафедры теоретической физики и волновых процессов Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Волгоградский государственный университет»;

2. Михайлова Татьяна Анатольевна, кандидат физико-математических наук (02.00.04 – Физическая химия), доцент кафедры математического моделирования Стерлитамакского филиала Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет»

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук», г. Москва, в своем положительном отзыве, подписанном Аскадским Андреем Александровичем,

доктором химических наук (02.00.06 – Высокомолекулярные соединения), профессором, заведующим лабораторией полимерных материалов и доктором химических наук Букаловым Сергеем Сергеевичем (02.00.04 – Физическая химия), ведущим научным сотрудником лаборатории молекулярной спектроскопии указала, что диссертационная работа по содержанию и оформлению соответствует требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Работа с точки зрения актуальности, научной новизны, основным положениям, научной и практической значимости, а также достоверности полученных результатов соответствует критериям п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а соискатель заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

По теме диссертации опубликовано 30 работ, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 6 работ. Общий объем публикаций по теме диссертации 1,94 печатных листа. Авторский вклад в опубликованных работах составил 0,97 печатного листа. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах. Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Юсупов А.Р., Рахмеев Р.Г., Лачинов А.Н., Калимуллина Л.Р., Накаряков А.С., Бунаков А.А. Исследование транспорта носителей заряда через границу металл-полимер класса полиарилефталидов // Физика твердого тела. – 2013. – Т.55. – В.7. – С. 1392-1395.

2. Нафикова Е.П., Асфандиаров Н.Л., Калимуллина Л.Р., Елькин Ю.Н. Оценка сродства к электрону производных хинона методом функционала плотности // Известия Академии наук. Серия Химическая. – 2014. – № 3. – С. 572-576.

3. Гадиев Р.М., Лачинов А.Н., Галиев А.Ф., Калимуллина Л.Р., Набиуллин И.Р. Влияние дипольного упорядочения на электрофизические свойства границы раздела двух органических диэлектриков // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2014. – Т. 100. – В. 4. – С. 276-280.

4. Байбулова Г.Ш., Галиев А.Ф., Жданов Э.Р., Корнилов В.М., Лачинов А.Н., Калимуллина Л.Р. Квантово-химические исследования надмолекулярной структуры полидифениленфталата // Вестник Омского университета. – 2014. – № 2. – С. 46-49.

5. Калимуллина Л.Р., Нафикова Е.П., Асфандиаров Н.Л., Чижов Ю.В., Байбулова Г.Ш., Жданов Э.Р., Гадиев Р.М. Теоретическая оценка энергии сродства к электрону методами теории функционала плотности для производных хинона // Журнал физической химии. – 2015. – Т.89. – № 3. – С. 426-432.

6. Юсупов А.Р., Лачинов А.Н., Калимуллина Л.Р., Гадиев Р.М., Никитина Д.В. Влияние кислорода на электропроводящие свойства тонких пленок полимерного диэлектрика // Физика твердого тела. – 2019. – Т.61. – № 3. – С. 581-586.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. Доктора химических наук, заведующего лабораторией синтеза функциональных полимеров Уфимского института химии Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук Крайкина Владимира Александровича. Отзыв положительный. Замечаний нет.

2. Доктора физико-математических наук, исполняющего обязанности заведующего кафедрой физики конденсированного состояния и наноразмерных систем, директора Школы наук Института естественных наук и математики Уральского федерального университета им. первого Президента России Б.Н. Ельцина Бабушкина Алексея Николаевича. Отзыв положительный. Замечаний нет.

3. Доктора физико-математических наук, профессора кафедры физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский государственный авиационный технический университет» Михайлова Геннадия Петровича. Отзыв положительный. Имеются замечания: непонятен смысл коэффициента шероховатости  $R_q$  (рис.7); отсутствует уравнение регрессии с указанием коэффициента детерминации, хотя в основных выводах утверждается линейная корреляция между экспериментально определенными значениями сродства к электрону и энергиями нижних вакантных молекулярных орбиталей, вычисленными с помощью квантово-химических расчетов.

4. Доктора физико-математических наук, профессора высшей школы прикладной физики и космических технологий Института физики, нанотехнологий и телекоммуникаций Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» Сударя Николая Тобисовича. Отзыв положительный. Имеются замечания: в автореферате используется термин «работа выхода электрона из полимера», который не является общепринятым для полимерных материалов, но, используя его, соискатель в автореферате не поясняет, как эта величина рассчитывалась; к сожалению, в автореферате нет данных о глубине кислородных ловушек, хотя формула для расчета этого параметра приводится.

5. Доктора физико-математических наук, главного научного сотрудника лаборатории электронных и фотонных процессов в полимерных наноматериалах Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук Тамеева Алексея Раисовича. Отзыв положительный. Замечаний нет.

6. Доктора физико-математических наук, профессора кафедры электроники твердого тела Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский

государственный университет» Комолова Алексея Сергеевича. Отзыв положительный. Замечаний нет.

7. Кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника Отделения нейтронных исследований Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт» Кульвелис Юрия Викторовича. Отзыв положительный. Имеются замечания: на многих рисунках и таблицах отсутствуют погрешности определяемых величин; в автореферате не описан метод определения шероховатости пленок. Шероховатость порядка 0,2 – 0,3 нм, как показано на рис. 7 для пленок полидифениленфталида с низким содержанием допанта означает очень высокое качество поверхности, что необходимо подтверждать данными микроскопии.

8. Доктора физико-математических наук, профессора кафедры экспериментальной физики и радиофизики Омского государственного университета им. Ф.М. Достоевского Югая Климентия Николаевича. Отзыв положительный. Имеются замечания: утверждается, что «при взаимодействии кислорода с фрагментами полимерной молекулы не возникает химической связи, что приводит к обратимому изменению электропроводности при изменении концентрации кислорода. Благодаря этому пленки полидифениленфталида демонстрируют высокую стабильность электрофизических характеристик...» Это утверждение требует более весомых доказательств, поскольку именно возможная химическая связь может способствовать стабильности структуры; состояния пленок полиариленфталидов зависят от толщины пленок, однако механизму этой важной зависимости не уделяется достаточного внимания; экспериментальное изучение влияния кислорода на физические свойства изучаемых полимерных пленок проведено несколько небрежно, поскольку газовая среда не является чистой.

9. Доктора физико-математических наук, профессора, заведующего кафедрой физической электроники и нанофизики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего

образования «Башкирский государственный университет» Бахтизина Рауфа Загидовича. Отзыв положительный. Замечаний нет.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их высокой профессиональной квалификацией, наличием публикаций по проблематике, связанной с темой диссертации, компетенцией в вопросах, имеющих отношение к теме работы. Ведущая организация и оппоненты не имеют совместных проектов и публикаций с соискателем.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- показано влияние атмосферы на проводимость пленок полидифениленфталида и возможность возникновения в полимерном материале глубоких кислородных ловушек, снижающих подвижность носителей заряда;
- установлено, что на границе раздела металл/полимер в тонких субмикронных пленках полидифениленфталида потенциальный барьер формируется как разность энергий Ферми металла и работы выхода электрона из полимера, что дает возможность целенаправленного управления электронными параметрами контакта металл/полимер;
- предложено масштабирующее уравнение для количественной оценки величины сродства к электрону исследуемого ряда производных хинона;
- установлено, что проводимость вдоль границы раздела полимер-полимер хорошо коррелирует с результирующим параметром  $\Delta$ , определяющим величину поля поверхностной поляризации и зависящим от стереометрических и энергетических параметров полимеров;
- предложен способ прогнозирования эффективности использования полиариленов в многослойных структурах, который позволяет выделить группы наиболее перспективных для последующего экспериментального исследования соединений, энергетические параметры которых могут быть наиболее управляемыми при различных внешних воздействиях.

При изучении барьерных структур на основе тонких пленок полиариленов результативно использован комплексный подход, включающий



физико-химические экспериментальные методы исследования и математическое моделирование. Значение полученных результатов для практики состоит в том, что они позволяют прогнозировать и оценивать относительные изменения потенциальных барьеров в многослойных структурах на границе раздела металл/полимер при изменении вида металла или полимера, а также электронные свойства вдоль границ раздела полимер-полимер в зависимости от свойств полимера, что может иметь большое значение при проектировании и создании приборов молекулярной электроники.

Оценка достоверности подтверждается применением широко апробированных методик исследований, соответствием результатов расчетов экспериментальным данным и известным из литературы научным результатам, а также всесторонним обсуждением результатов работы на научных семинарах и конференциях. Личный вклад соискателя состоит в сборе и анализе литературных данных, реализации поставленных задач, анализе результатов, формулировании выводов и участии в написании и подготовке публикаций.

На заседании 06.02.2020 г. диссертационный совет принял решение присудить Калимуллиной Луизе Раяновне ученую степень кандидата физико-математических наук. При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 10 докторов физико-математических наук по профилю защищаемой диссертации, участвовавших в заседании, из 23 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за – 18, против – 0, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель  
диссертационного совета

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
6 февраля 2020 г.



А.Г. Мустафин

С.А. Мустафина