

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.190.06 НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО
УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «ПЕТРОЗАВОДСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ» ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 24.06.2016 г., протокол № 33

о присуждении **Романову Владимиру Владимировичу** гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «*Моделирование атомной структуры N-оксидов и поиск устойчивых полиморфов на основе квантовомеханических расчетов*» в виде рукописи по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Петрозаводский государственный университет» на кафедре физики твердого тела физико-технического факультета.

Диссертация принята к защите « 07 » апреля 2016 года, протокол № 30.

Соискатель Романов Владимир Владимирович, 1985 года рождения, гражданин Российской Федерации, на момент защиты работает на кафедре физики твердого тела физико-технического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Петрозаводский государственный университет» в должности инженера 2 категории. В 2011 году соискатель окончил магистратуру Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Петрозаводский государственный университет» по направлению «Физика» с присвоением дополнительной квалификации «Преподаватель высшей школы». В 2014 году окончил очную аспирантуру Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Петрозаводский государственный университет» по направлению 01.04.07 физика конденсированного состояния.

Диссертация выполнена на кафедре физики твердого тела физико-технического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Петрозаводский государственный университет».

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, доцент **Фофанов Анатолий Дмитриевич** работает в должности профессора кафедры физики твердого тела физико-технического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Петрозаводский государственный университет».

Официальные оппоненты:

1. **Асланов Леонид Александрович**, гражданин Российской Федерации, доктор химических наук, профессор, заведующий лабораторией структурной химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет»,
2. **Хрущов Михаил Михайлович**, гражданин Российской Федерации, кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт машиноведения Российской академии наук».

дали **положительные** отзывы о диссертации.

*Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт химии и технологий редких элементов и минерального сырья Кольского научного центра Российской академии наук» (ИХТРЕМС им. И.В. Тананаева КНЦ РАН), г. Апатиты, в своем **положительном** заключении, подписанном старшим научным сотрудником лаборатории материалов электронной техники ИХТРЕМС КНЦ РАН, кандидатом химических наук Стародуб Ольгой Ростиславной и научным сотрудником лаборатории материалов электронной техники ИХТРЕМС КНЦ РАН, кандидатом физико-математических наук, Яничевым Александром Александровичем и утверждённым временно исполняющим обязанности директора ИХТРЕМС КНЦ РАН, доктором химических наук Кузнецовым Сергеем Александровичем, указала, что «диссертация полностью удовлетворяет требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (утверженного*

постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842), для кандидатских диссертаций». Отзыв о диссертационной работе Романова В.В. рассмотрен и одобрен на заседании Ученого совета ИХТРЭМС им. И.В. Тананаева КНЦ РАН от 17 мая 2016 г., протокол № 8.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. Кременецкого Вячеслава Георгиевича, кандидата химических наук, старшего научного сотрудника лаборатории высокотемпературной химии и электрохимии Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья Кольского научного центра Российской академии наук»

Замечания:

- 1) Второй абзац автореферата (стр. 3) начинается с фразы, содержащей выражения “атомы в целом” и “по отдельности”. Поскольку атомы не могут состоять из атомов, то под атомами “в целом”, очевидно, подразумевается исследуемая система в целом либо структурированный фрагмент системы.
- 2) На стр. 5 в разделе научно-практической значимости работы имеется упоминание молекулярных комплексов, содержащих до нескольких десятков атомов различных элементов и “помещенных в модельный объем размером до нескольких десятков ангстрем”. В контексте данной работы последнее требование представляется излишним.
- 3) Для ориентировки читателя желательно было указать в тексте автореферата базисный набор, который был использован в расчетах.

2. Ивашевской Светланы Николаевны, кандидата физико-математических наук, научного сотрудника Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт геологии Карельского научного центра Российской академии наук».

Все отзывы, поступившие на диссертацию и автореферат, **положительные** (из них 1 отзыв на автореферат с замечаниями, указанными выше) и заканчиваются выводом, что диссертационная работа Романова В.В. полностью соответствует требованиям, которые ВАК предъявляет к кандидатским диссертациям, а её автор –

Романов В.В. – заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается компетентностью оппонентов в области структурной химии, значимым вкладом ведущей организации в области изучения структуры и свойств веществ, что подтверждается публикациями за последние пять лет оппонентов и учёных из ведущей организации в высокорейтинговых научных журналах.

Соискатель имеет 7 опубликованных работ, из них по теме диссертации опубликовано 6 научных работ общим объёмом 1 печатный лист, в том числе 2 статьи в научных журналах и изданиях, которые включены в перечень российских рецензируемых научных журналов и изданий для опубликования основных научных результатов диссертаций; 4 работы опубликованы в материалах всероссийских и международных конференций и симпозиумов.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Романов В.В., Нижник Я.П., Фофанов А.Д. Конформационный и структурный анализ трибромида бис(4-хлорхинолин-N-оксид)водорода // Журнал структурной химии. Изд-во Сибирского отделения Российской академии наук, 2015. - № 2. - С. 381 - 386.
2. Романов В.В., Нижник Я.П., Фофанов А.Д. Конформационный анализ катионов семисолей гетероароматических N-оксидов // Ученые записки Петрозаводского государственного университета. Серия: естественные и технические науки. Изд-во ПетрГУ, 2014. - № 8, том 1. - С. 104 - 107.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана методика проведения вычислительных экспериментов по конформационному анализу молекулярных комплексов с использованием программного пакета ABINIT. Особенностью методики является применение специально разработанной утилиты, реализующей построение атомной системы и варьирование её конформационных параметров по задаваемым правилам.

предложен подход к проведению компьютерного моделирования атомной структуры (данные которого опираются на результаты рентгеноструктурного анализа), при котором расчет энергии и функции распределения электронной плотности отдельных конформаций осуществляется из первых принципов (метод функционала плотности) при помощи ABINIT, а сам ABINIT, в свою очередь, используется как базовая программа для утилиты, которая позволяет варьировать значения конформационных параметров системы по задаваемым правилам и генерирует промежуточные конформации.

доказана необходимость использования расчетов из первых принципов для исследования структур наноразмерного уровня.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

показано, что в виду стерических факторов состояния катионов N-оксидов, в которых атом кислорода N-оксидной группы находился бы в состоянии sp²-гибридизации, являются энергетическими невыгодными. Подтверждена существующая гипотеза строения аддукта Zn-тетрафенилпорфина с диоксаном, заключающаяся в том, что относительно одной молекулы диоксана порфириновый цикл находится в аксиальном положении, а относительно другой - в экваториальном. Доказано, что при определенных условиях возможно существование ранее неизвестных конформеров для 4-нитрохинолин-N-оксида, которые отличаются от известных конформеров торсионным углом между хинолиновой плоскостью и нитрогруппой, и для бис(4-хлорхинолин-N-оксид)водорода, который отличается от известного конформера взаимной ориентацией хлорхинолиновых плоскостей.

Применительно к проблематике диссертации эффективно использован квантовомеханический метод расчета, основанный на теории функционала электронной плотности, в результате чего *раскрыт* характер влияния стерических факторов на гибридизацию атома кислорода N-оксидной группы в катионах бис(пиридин-N-оксид)водорода, бис(2-метилпиридин-N-оксид)водорода, бис(2,6-диметилпиридин-N-оксид)водорода, бис(4-хлорхинолин-N-оксид)водорода, в молекулах 4-хинолин-диазоний-1-оксида, 4-хлорхинолин-N-оксида, 4-метоксихинолин-N-оксида, 4-нитрохинолин-N-оксида и аддукте 4-хлорхинолин-N-оксида с йодом. *Раскрыто* влияние ближайшего окружения молекул в кристалле на

строение молекул 4-нитрохинолин-N-оксида и бис(4-хлорхинолин-N-оксид)водорода.

изучено влияние стерических факторов на гибридизацию атома кислорода N-оксидной группы в катионах бис(пиридин-N-оксид) водорода, бис(2-метилпиридин-N-оксид)водорода, бис(2,6-диметилпиридин-N-оксид) водорода, бис(4-хлорхинолин-N-оксид) водорода, в молекулах 4-хинолин-диазоний-1-оксида, 4-хлорхинолин-N-оксида, 4-метоксихинолин-N-оксида, 4-нитрохинолин-N-оксида и аддукте 4-хлорхинолин-N-оксида с йодом. *Изучено* влияние ближайшего окружения молекул в кристалле на строение молекул 4-нитрохинолин-N-оксида и бис(4-хлорхинолин-N-оксид)водорода.

Проведена модернизация алгоритма варьирования значений конформационных параметров атомной системы, позволившая задавать более гибкие правила варьирования, что дает возможность проведения экспериментов по конформационному анализу применительно к широкому классу материалов.

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

разработана методика проведения вычислительных экспериментов по конформационному анализу молекулярных комплексов с использованием программного пакета ABINIT. Особенностью методики является применение специально разработанной утилиты, реализующей построение атомной системы и варьирование её конформационных параметров по задаваемым правилам. Методика используется при проведении практических занятий по курсу "Компьютерное моделирование атомной структуры" для магистров физико-технического факультета.

определены ограничения использования расчетов на основе метода функционала плотности, которые на сегодняшний день могут быть выполнены на персональном компьютере. Расчеты могут быть выполнены для атомных систем, содержащих до нескольких десятков атомов, помещенных в модельный объем размером до нескольких десятков ангстрем.

создана система практических рекомендаций по применению разработанной методики проведения экспериментов по конформационному анализу.

представлены предложения по дальнейшему развитию методики выполненных в данной работе компьютерных экспериментов, связанные с использованием

информации о функции распределения электронной плотности, в том числе для построения теоретической дифракционной картины рассеяния рентгеновских лучей на модельной атомной конфигурации для сравнения с результатами рентгенографического эксперимента.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

идея анализа атомной структуры изучаемых объектов реализована с использованием конформационного анализа, основанного на методе функционала электронной плотности.

использовано сравнение результатов исследований с экспериментальными данными структурных исследований ряда работ по рассматриваемой тематике; результаты экспериментов и расчетов воспроизводимы и не противоречат литературным данным.

установлено хорошее соответствие авторских результатов с результатами, представленными в независимых источниках по данной тематике.

Таким образом, представленные в диссертационной работе результаты и выводы достоверны и обоснованы.

Личный вклад соискателя состоит в:

разработке методики проведения конформационного анализа; разработке алгоритма и написании утилиты, являющейся дополнением к программному пакету ABINIT; планировании и проведении экспериментов по конформационному анализу различных молекул, анализе результатов экспериментов.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается наличием последовательного плана исследований, непротиворечивостью результатов и взаимосвязанностью выводов.

Диссертационный совет Д 212.190.06 на заседании 24 июня 2016 г. пришёл к выводу о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 30 января 2002 г. № 74 (в редакции постановления Правительства Российской Федерации от 20 июня 2011 г. № 475), и принял решение присудить Романову Владимиру Владимировичу ученую степень кандидата физико-

математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них 7 докторов наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 22 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение учёной степени – 14, против присуждения учёной степени – 1, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель диссертационного совета

B6726

Гуртов Валерий Алексеевич

Ученый секретарь диссертационного совета

1

Пикулев Виталий Борисович

24 июня 2016 г.

Подпись руки	<u>Губкова В. А.</u>
	<u>Бинчуков В. В.</u>
УДОСТОВЕРЯЮ.	
Уч. секретарь ученого совета	
<u>« 24 » 06 2016 г.</u>	