

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.165.06 НА БАЗЕ
федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего
образования «Нижегородский государственный технический университет
им. Р.Е. Алексеева» Министерства образования и науки Российской Федерации
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ

КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело №

решение диссертационного совета от «6» октября 2017, № 13

О присуждении Самсонову Максиму Андреевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Экспериментальная электронная плотность в комплексах триарилсурьмы, содержащих *o*-хиноновые, *o*-иминохиноновые и карбоксилатные лиганды» по специальности 02.00.04 – Физическая химия (химические науки) принята к защите 30 июня 2017 г., протокол №6, диссертационным советом Д 212.165.06 на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева» Министерства образования и науки Российской Федерации, 603950, г. Нижний Новгород, ул. Минина, д. 24, приказ №105/нк от 11.04.2012.

Соискатель Самсонов Максим Андреевич 1988 года рождения.

В 2012 году соискатель окончил Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского».

В 2016 году соискатель окончил очную аспирантуру Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института металлоорганической химии им. Г. А. Разуваева Российской академии наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Работает в должности младшего научного сотрудника в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки «Институт металлоорганической химии им. Г. А. Разуваева Российской академии наук».

Диссертация выполнена в группе рентгенодифракционных исследований Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт металлоорганической химии им. Г. А. Разуваева Российской академии наук».

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор РАН Фукин Георгий Константинович, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт металлоорганической химии им. Г. А. Разуваева Российской академии наук», группа рентгенодифракционных исследований, руководитель группы.

Официальные оппоненты:

1. Маркин Алексей Владимирович, доктор химических наук, доцент, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», кафедра «Физическая химия», заведующий кафедрой;

2. Долгушин Федор Михайлович, кандидат химических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова», лаборатория рентгеноструктурных исследований, старший научный сотрудник

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук, г. Москва, в своем положительном заключении, подписанном Чураковым Андреем Викторовичем, к.х.н., заведующим лабораторией кристаллохимии и рентгеноструктурного анализа, и Сергиенко Владимиром Семеновичем, д.х.н., главным научным сотрудником лаборатории кристаллохимии и рентгеноструктурного анализа, указала, что диссертация представляет собой законченное научное исследование, которое вносит существенный вклад в развитие представлений о распределении электронной плотности в комплексах сурьмы. Результаты работы могут быть рекомендованы к использованию для преподавания в Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова, Казанском (Приволжском) федеральном университете, Институте элементоорганических

соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Институте органической и физической химии им. А. Е. Арбузова КазНЦ РАН, Институте неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Институте общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН и других профильных учреждениях. Работа соответствует требованиям пункта №9 «Положения о присуждения степеней» утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. №842, а Самсонов Максим Андреевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Соискатель имеет 25 опубликованных работ, в том числе 8 по теме диссертации; 4 работы, опубликованные в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в международных цитатно-аналитических базах данных Web of Science и Scopus; 4 публикации в сборниках трудов и тезисов докладов на международных и всероссийских конференциях. Общий объем опубликованных научных работ составляет 33 страницы. Авторский вклад составляет 75 %.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Фукин, Г. К. Экспериментальное и теоретическое исследование топологических и энергетических характеристик кристалла 3,6-ди-трет-бутил-2-фенил-1,3,2-бензодиоксаборола / Г. К. Фукин, **М. А. Самсонов**, Е.В. Баранов, А.В. Малеева, А. В. Пискунов, В.К. Черкасов // Изв. АН. Сер. хим. - 2013 - № 8. - С. 1907-1913.

2. Фукин, Г. К. Обратимое присоединение молекулярного кислорода к катехолатным и *o*-амидофенолятным комплексам Sb(V): энергетический подход / Г. К. Фукин, **М. А. Самсонов**, А. И. Поддельский, В.К. Черкасов // Изв. АН. Сер. хим. - 2016 - № 1. - С. 61-66.

3. Фукин, Г. К. Экспериментальное и теоретическое исследование топологических и энергетических характеристик электронной плотности в кристаллах *o*-амидофенолятных комплексов Sb(V) / Г. К. Фукин, **М. А. Самсонов**, Е.В. Баранов, А. И. Поддельский, В.К. Черкасов // Изв. АН. Сер. хим. - 2016 - № 1. - С. 54-60.

4. Fukin G. K. Experimental study of electron density distribution in crystals of antimony(V) dicarboxylate complexes / G. K. Fukin, **M. A. Samsonov**, O. S. Kalistratova, A. V. Gushchin // *Struct. Chem.* - 2016 - Т. 27. - № 1. - С. 357-365.

На диссертацию и автореферат поступило 8 отзывов от:

д.х.н., профессора, профессора кафедры органической химии химического факультета Национального исследовательского Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского **Гущина Алексея Владимировича**; д.х.н., профессора, заведующего кафедрой фотохимии и спектроскопии Национального исследовательского Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского **Зеленцова Сергея Васильевича**; д.х.н., профессора РАН, профессора кафедры органической химии химического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова **Вацадзе Сергея Зурабовича**; д.х.н., профессора кафедры неорганической химии Самарского национального исследовательского университета им. С.П. Королева **Серержкина Виктора Николаевича**; д.х.н., главного научного сотрудника лаборатории многоспиновых координационных соединений Международного томографического центра СО РАН **Романенко Галины Владиславовны**; д.х.н., профессора, главного научного сотрудника лаборатории дифракционных методов исследования Института органической и

физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН **Литвинова Игоря Анатольевича**; к.х.н., научного сотрудника лаборатории дифракционных методов исследования Института органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН **Ворониной Юлии Константиновны**; д.х.н., профессора, директора Института химической переработки биомассы дерева и техносферной безопасности Санкт-Петербургского государственного лесотехнического университета Васильева Александра Викторовича.

Все отзывы положительные и во всех содержится рекомендация по присуждению Самсонову Максиму Андреевичу ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия (химические науки).

В качестве критических замечаний отмечено: не всегда корректно использование в некоторых формулах символа Ph; взаимодействие атома Sb с карбонильным атомом O следовало бы дополнительно охарактеризовать с помощью параметров полиэдров Вороного-Дирихле; отсутствуют сведения о погрешностях для энергетических величин, полученных из квантово-химических расчетов; к чему относятся на стр. 5 значения энергии («-5.09 эВ (инертные)» и «-5.03 эВ (активные)»); не обсуждается наличие переходного состояния, в котором молекулярный кислород находился бы в триплетном состоянии; в автореферате отсутствует информация о методиках, приборах и программах, используемых при расшифровке, уточнении и анализе распределения электронной плотности; требуется больше конкретики о структурных и энергетических характеристиках фазовых переходов при изложении вывода 5; на стр. 10 приведены G-параметры для комплексов 1 и 2, разница между которыми составляет 3%, может ли столь малая разница приводить к таким серьёзным изменениям в реакционной способности соединений; отсутствуют структурные формулы для ряда комплексов.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их компетентностью и опытом работы в химической отрасли наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия, что подтверждено представленными публикациями в сфере изучения структуры веществ и их свойств.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработан подход по исследованию распределения электронной плотности и её топологии в кристаллах соединений пентавалентной сурьмы по данным прецизионных рентгеноструктурных экспериментов и квантово-химических расчетов высокого уровня,

предложено использование анализа энергии межмолекулярных взаимодействий для интерпретации особенностей фазовых переходов в комплексах трифенилсурьмы с метакриловой и винилуксусной кислотами,

доказана перспективность использования прецизионных

рентгеноструктурных исследований и квантово-химических расчетов при изучении распределения электронной плотности в кристаллах металлорганических комплексов сурьмы для поиска связи между строением и некоторыми свойствами этих соединений.

введены новые критерии, позволяющие определить инертность (активность) *o*-амидофенолятных, катехолатных триарилсурьмы комплексов по отношению к молекулярному кислороду.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказано наличие внутримолекулярных взаимодействий между атомом сурьмы и карбонильным атомом кислорода в карбоксилатных комплексах трифенилсурьмы.

Применительно к проблематике диссертации результативно использован комплекс таких физико-химических методов анализа, как прецизионные рентгеноструктурные исследования, DFT-расчеты высокого уровня,

изложены особенности распределения электронной плотности и её топологии в комплексах триарилсурьмы, содержащих *o*-хиноновые, *o*-иминохиноновые и карбоксилатные лиганды,

раскрыты области применения теории Р. Бейдера «Атомы в молекулах» при локализации связевых критических точек между атомами Sb и карбонильным атомом кислорода в карбоксилатных комплексах трифенилсурьмы,

изучено распределение электронной плотности и её топологии в катехолатных, *o*-амидофенолятных, спироэндопероксидных и карбоксилатных комплексах триарилсурьмы в рамках теории Р.Бейдера «Атомы в молекулах». В результате чего получены сведения о природе и энергии химических связей, энергии внутри- и межмолекулярных взаимодействий, а также распределении зарядов,

проведена модернизация критериев обратимого присоединения молекулярного кислорода к *o*-амидофенолятным и катехолатным комплексам триарилсурьмы. Ранее критериями служили лишь энергии высших занятых молекулярных орбиталей (ВЗМО).

Значение полученных соискателем результатов исследования для

практики подтверждается тем, что:

разработана и внедрена методика проведения прецизионных рентгеноструктурных исследований в металлоорганических комплексах сурьмы. Методика используется в группе рентгенодифракционных исследований при Институте металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН,

определено, что результаты, полученные путем анализа топологии электронной плотности, могут быть использованы практически при исследовании медицинских препаратов на основе комплексов сурьмы,

создана система практических рекомендаций по изучению топологии электронной плотности в металлоорганических комплексах сурьмы,

представлены методические рекомендации по практическому применению подходов, описанных в работе, при моделировании и последующем синтезе новых металлоорганических комплексов сурьмы.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

для экспериментальных работ полученные результаты и обоснованность выводов подтверждается большим количеством согласующихся данных, полученных с помощью современного сертифицированного оборудования, такого как рентгеновские дифрактометры «Bruker AXS SMART APEX», «Bruker AXS SMART APEX-II D8 Quest», «Oxford Xcalibur Eos»,

теория построена на достоверных, воспроизводимых данных и согласуется с ранее опубликованными литературными данными по исследованию электронной плотности в металлоорганических комплексах в рамках теории Р. Бейдера «Атомы в молекулах»,

идеи базируются на строгом определении молекулярного, кристаллического и электронного строения *o*-амидофенолятных, катехолатных, спироэндопероксидных и карбоксилатных комплексов триарилсурьмы, в выявлении взаимосвязи между их строением и фазовыми переходами, а также таким свойством этих соединений, как способность обратимо присоединять молекулярный кислород,

использованы современные методики обработки экспериментальных данных, полученных в ходе прецизионных рентгеноструктурных экспериментов,

установлено качественное соответствие полученных автором результатов с данными из независимых литературных источников,

использованы современные методы синтеза и физико-химического анализа структуры и свойств полученных комплексов сурьмы.

Личный вклад соискателя состоит в непосредственном участии в планировании и выполнении экспериментов, анализе и интерпретации, обсуждении и оформлении полученных результатов. Большая часть результатов, представленных в работе, была получена соискателем самостоятельно, в том числе постановка и проведение прецизионных рентгеноструктурных экспериментов и анализ топологии электронной плотности.

На заседании «6» октября 2017 года диссертационный совет принял решение присудить Самсонову М.А. ученую степень кандидата химических наук, так как диссертация соответствует критериям, установленным п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г., №842, является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи, имеющей значение для развития соответствующей отрасли знаний – физической химии, а именно: на основе определенной экспериментально и теоретически электронной плотности в кристаллах *o*-амидофенолятных, катехолатных, спироэндопероксидных и карбоксилатных комплексах сурьмы выявлено влияние их строения на природу фазовых переходов и способность обратимо присоединять молекулярный кислород.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 7 докторов наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, участвовавших в заседании, из 23 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 17, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель
диссертационного совета



[Signature]
Бодриков Иван Васильевич

Ученый секретарь
диссертационного совета

[Signature]
Соколова Татьяна Николаевна

«6» октября 2017 г.