

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д212.166.01,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
АВТОНОМНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО
ОБРАЗОВАНИЯ «НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
НИЖЕГОРОДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМ. Н.И. ЛОБАЧЕВСКОГО» МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО
ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ,
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 26.12.2018 № 16

О присуждении Андрееву Павлу Валерьевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Структура кристаллов некоторых комплексов Sb(V) и Bi(V) и особенности их координационных полиэдров» по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния» – принята к защите 24 октября 2018 г. (протокол заседания № 10) диссертационным советом Д212.166.01, созданным на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 603950, г. Нижний Новгород, просп. Гагарина, 23, приказ от 11.04.2012 г. №105/нк о создании диссертационного совета.

Соискатель Андреев Павел Валерьевич, 1989 года рождения, в 2012 году окончил федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», завершил освоение программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре федерального

государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского» (срок обучения 02.07.2012–29.06.2016 г.), работает в должности ассистента кафедры кристаллографии и экспериментальной физики физического факультета федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре кристаллографии и экспериментальной физики физического факультета федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук, Сомов Николай Викторович, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», кафедра кристаллографии и экспериментальной физики физического факультета, доцент.

Официальные оппоненты:

1. Громилов Сергей Александрович, доктор физико-математических наук, федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук, лаборатория кристаллохимии, главный научный сотрудник,

2. Чаусов Фёдор Фёдорович, кандидат химических наук, Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук, отдел физики и химии поверхности, старший научный сотрудник,

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» (МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва) – в своем положительном отзыве, составленном и подписанном профессором Белоконевой Еленой Леонидовной, доктором химических наук, профессором кафедры кристаллографии и кристаллохимии геологического факультета МГУ, профессором РАН Ереминым Николаем Николаевичем, доктором химических наук, заведующим кафедрой кристаллографии и кристаллохимии геологического факультета МГУ, академиком РАН Пущаровским Дмитрием Юрьевичем, доктором геолого-минералогических наук, деканом геологического факультета МГУ, и утвержденном Федяниным Андреем Анатольевичем, доктором физико-математических наук, профессором, профессором РАН, проректором — начальником Управления научной политики и организации научных исследований МГУ имени М.В. Ломоносова, отметила следующее:

«1) Диссертационная работа Андреева П.В., посвященная разработке и экспериментальной реализации метода получения точных и воспроизводимых параметров искажений полиэдров по структурным данным, а также их приложений к интерпретации свойства кристаллов, вносит вклад в структурную кристаллографию и физику твердого тела. Работа выполнена автором самостоятельно, актуальна, полученные результаты отличаются научной новизной и практической значимостью, достоверностью и обоснованностью.

2) В работе впервые проведен систематический расчет степеней подобия полиэдров для структур кристаллов комплексов $Sb(V)$ и $Bi(V)$, а также литературных, что составляет большой объем выполненных исследований (546 полиэдров) и его новизну.

3) Выполненная работа позволяет расширить метод оценки искажений координационных полиэдров на структуры других представителей органических и неорганических соединений. Результаты включены в программный комплекс PseudoSymmetry в программе Polyhedron.

4) Полученные результаты могут быть использованы в курсах лекций для кристаллографов, химиков и физиков, занимающихся твердым телом.

5) Все выводы, сделанные в работе, четко сформулированы и доказаны. Защищаемые положения в диссертации не вызывают сомнений.

6) Сделанные замечания в основном носят рекомендательный характер, а также касаются стиля и неточностей изложения, не снижают общей положительной оценки диссертации, ее научной и практической значимости.

7) Результаты работы опубликованы в 11-ти статьях ряда ведущих российских и зарубежных научных изданий, доложены на 17-ти конференциях российского и международного уровня.

8) Содержание автореферата полностью соответствует содержанию диссертационной работы. Основные материалы диссертации, аргументация защищаемых положений и выводы в полной мере отражены в автореферате».

«Диссертация Андреева П.В. представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, соответствующую всем критериям и требованиям раздела II «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., а ее автор, Андреев Павел Валерьевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния».

Соискатель имеет 80 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 33 работы, из них 11 статей в журналах, включенных в Перечень ВАК РФ, в том числе индексируемых международными библиографическими базами Web of Science и Scopus, две статьи в иных журналах и 20 публикаций в сборниках трудов и тезисов докладов на российских и международных научных конференциях. Диссертантом в этих работах выполнены исследования структуры кристаллов комплексов пятивалентных сурьмы и висмута методами рентгеноструктурного анализа, а также дано описание подходов и результаты выполненных на их основе расчетов степени совершенства координационных полиэдров.

Личный вклад соискателя в опубликованные по теме диссертации работы является определяющим.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

[1] Andreev P.V. Bis [(E)-3-(4-methoxyphenyl) prop-2-enoato] triphenylantimony (V) benzene monosolvate/ Andreev P.V., Somov N.V., Kalistratova O.S., Gushchin A.V., Chuprunov E.V. // Acta Crystallogr. Sect. E – 2013. – Vol. 69 – № 3 – m167. DOI: 10.1107/S1600536813004674

[2] Andreev P.V. Bis(but-2-enoato-κO)triphenylbismuth(V) / Andreev P.V., Somov N.V., Kalistratova O.S., Gushchin A.V., Chuprunov E.V. // Acta Crystallogr. Sect. E– 2013. – Vol. 69 – № 6 – m333. – DOI: 10.1107/S1600536813013317

[3] Андреев П.В. Синтез и структура бис(3-фенилпроп-2-еноат) трифенилвисмута / Андреев П. В., Сомов Н. В., Калистратова О.С., Гущин А.В., Чупрунов Е.В.// Кристаллография – 2015. – Vol. 60 – № 4 – P. 571–574.

[4] Калистратова О.С. Синтез и строение бис[(2E)-3-(2-фурил)проп-2-еноата] трифенилсурьмы $\text{Ph}_3\text{Sb}[\text{O}_2\text{CCH}=\text{CH}(\text{C}_4\text{H}_3\text{O})]_2$ / Калистратова О.С., Андреев П.В., Гущин А.В., Сомов Н.В., Чупрунов Е.В. // Кристаллография. – 2016. – Т. 61. – № 3. – С. 396–399.

[5] Сомов Н.В. О количественной оценке степени подобия координационных полиэдров / Сомов Н.В., Андреев П.В. // Кристаллография – 2018 – Т. 63 – № 1 – С. 38–42.

[6] Гусаковская А.А. Синтез и структура бис[3-(2-фурил)акрилата] трифенилвисмута $\text{Ph}_3\text{Bi}[\text{O}_2\text{CCH}=\text{CH}(\text{C}_4\text{H}_3\text{O})]_2$ и ди-мета-нитроциннамата трифенилвисмута $\text{Ph}_3\text{Bi}(\text{O}_2\text{CCH}=\text{CH}-\text{C}_6\text{H}_4\text{NO}_2\text{-m})_2$. /Гусаковская А.А., Калистратова О.С., Андреев П.В., Гущин А.В., Сомов Н.В., Чупрунов Е.В.// Кристаллография – 2018. – Т. 63 – № 2 – С. 203–207.

[7] Шарутин В.В. Синтез и строение ароксидов тетра(пара-толил)сурьмы $(4\text{-MeC}_6\text{H}_4)_4\text{SbOAr}$, $\text{Ar} = \text{C}_6\text{H}_3\text{Cl}_2\text{-2,6}$, $\text{C}_6\text{H}_3(\text{NO}_2)_2\text{-2,4}$, $\text{C}_6\text{H}_2(\text{NO}_2)_3\text{-2,4,6}$. / Шарутин В.В., Шарутина О.К., Андреев П.В. // Координационная химия. 2016. – Т. 42. – № 7 – С. 412–417.

[8] Шарутин В.В. Синтез и строение сольвата трииодида [(μ4-сукцинато)гексадекафенилтетрасурьмы] с бензолом

$[(\text{Ph}_4\text{Sb})_2\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_2\text{CO}_2(\text{Ph}_4\text{Sb})_2][\text{I}_3]_2 \cdot 4\text{PhH}$. / Шарутин В.В., Шарутина О.К., Губанова Ю.О., Андреев П.В., Сомов Н.В. // Координационная химия – 2017. – Т. 43. – № 7. – С. 444–448.

[9] Шарутин В.В. Синтез и строение производных трис(3-фторфенил)сурьмы: $(3\text{-FC}_6\text{H}_4)_3\text{Sb}(\text{OC}_6\text{H}_3\text{Br}_{2,4})_2$, $(3\text{-FC}_6\text{H}_4)_3\text{Sb}(\text{OC}_6\text{Cl}_{5-2,3,4,5,6})_2$ и $(3\text{-FC}_6\text{H}_4)_3\text{Sb}[\text{OC}(\text{O})\text{C}_6\text{H}_4=(\text{NO}_2-2)]_2$ / Шарутин В.В., Шарутина О.К., Ефремов А.Н., Андреев П.В. // Журнал неорганической химии – 2018. – Т. 63 – № 2 – С. 164–169.

[10] Шарутин В.В. Синтез и строение моно-, би- и триядерных органилсульфонатных производных триарилсурьмы / Шарутин В.В., Шарутина О.К., Сенчурин В.С., Карцева М.К., Андреев П.В. // Журнал неорганической химии – 2018 – Т. 63 – № 7 – С. 823–830.

[11] Шарутин В.В. Синтез и строение пентафтор- и пентахлорфеноксидов тетра- и триарилсурьмы. / Шарутин В.В., Шарутина О.К., Ефремов А.Н., Андреев П.В. // Журнал неорганической химии – 2017 – Т. 62 – № 10 – С. 1330–1336.

Сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, **достоверны**.

На автореферат диссертации поступило 4 отзыва:

1) Дудка Александр Петрович, доктор физико-математических наук, и.о. ведущего научного сотрудника Лаборатории рентгеновских методов анализа и синхротронного излучения федерального научно-исследовательского центра «Кристаллография и фотоника» РАН, в своем отзыве на автореферат диссертации отмечает актуальность тематики, практическую значимость и научную новизну проведенных в ходе диссертационной работы исследований.

Отзыв Дудки А.П. содержит замечание:

«Автор не проверил интересный метод оценки искажений полиэдров *Robinson K., Gibbs G. V., Ribbe P. H. Quadratic Elongation: A Quantitative Measure of Distortion in Coordination Polyhedra* // Science. 171. V.172 P. 567.».

2) Фукин Георгий Константинович, доктор химических наук, профессор РАН, ведущий научный сотрудник Института металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН, в своем отзыве на автореферат диссертации отмечает, что «предложенный в настоящей работе метод [расчета геометрической искаженности координационного полиэдра по степени подобия эталонам – *прим. уч. секр.*] является наиболее универсальным. Несомненно, он будет востребован кристаллографами и кристаллохимиками». Автор отзыва заключает, что «Достоверность достигнутых результатов и сделанных выводов, а также их новизна и значимость для соответствующей области знаний не вызывают сомнений». Отзыв Г.К. Фукина не содержит замечаний.

3) Симонов Сергей Владимирович, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института физики твердого тела РАН, в своем отзыве на автореферат диссертации отмечает, что «такое определение степени подобия полиэдров хорошо коррелирует с теоремой Урусова об искажении координационных полиэдров, что является дополнительным подтверждением правильности выбранного метода. Андреев П.В. удачно использовал полученные им новые структурные данные в сочетании с данными из базы структурных данных КБСД, что позволило применить статистические методы к анализу деформаций 546 координационных полиэдров на основе Sb(V) и Bi(V) и показать преимущество разработанного им метода».

Отзыв С.В. Симонова содержит замечание:

«К замечаниям по данной работе можно отнести то, что хотя в автореферате даются сведения о других известных методах описания искажения полиэдров, однако их обзор не полный, в частности автор не обсуждает очень похожий на разработанный метод, описанный в работе [*W.A. Dollase, Acta Cryst. (1974) A30, 513–517*]. Поскольку свой метод Андреев П.В. позиционирует как универсальный, было бы неплохо дополнить описание первой главы сведениями о влиянии искажений полиэдров на кристаллохимические параметры и физические свойства кристаллов. Это могло бы придать большую значимость предложенному методу оценки деформаций и точнее определить его применимость при анализе полиэдров».

4) Алейникова Ксения Борисовна, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики твердого тела и наноструктур физического факультета Воронежского государственного университета, в своем отзыве на автореферат диссертации отмечает, что «Андреевым П.В. проделана большая работа, результаты которой представляют большой научный интерес». В отзыве К.Б. Алейниковой содержится замечание: «Жаль, что в автореферате не приведены наряду со ссылками на КБСД данные о факторах расходимости, что особенно важно, когда речь идет о расчетах электронной плотности».

Все отзывы на автореферат диссертации положительные. В отзывах, содержащих замечания, отмечается, что последние не влияют на положительную в целом оценку работы и не снижают ценности защищаемой диссертации.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обоснован тематической близостью их научных исследований и диссертационного исследования соискателя, проявляющейся в изучении атомной структуры кристаллов комплексных соединений, исследовании взаимосвязей структурных особенностей кристаллов с характеристиками их физических свойств.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

экспериментально **изучены** параметры атомно-молекулярной структуры 16 монокристаллов новых комплексов Sb(V) и Bi(V) ;

разработана методика анализа степени совершенства координационного окружения на основе расчета степени подобия электронной плотности, позволившая количественно охарактеризовать геометрическое совершенство координационных полиэдров Sb(V) и Bi(V) в кристаллах их комплексов;

предложен метод расчета степени сходства функций электронных плотностей двух координационных полиэдров с одинаковыми координационными числами;

доказано снижение разности частот симметричной и асимметричной мод колебаний карбоксилатного фрагмента в кристаллах дикарбоксилатов

триарилсурьмы и триарилвисмута с ростом степени подобия координационного полиэдра комплексообразователя тетрагональной пирамиде.

Применительно к проблематике диссертации результативно использован комплекс существующих экспериментальных методов исследования монокристаллов методом рентгеноструктурного анализа, а также статистические методы обработки данных с применением критерия Стьюдента.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

изложены аргументы, свидетельствующие в пользу эффективности количественного описания особенностей атомной структуры кристаллов с применением метода расчета степени подобия координационных полиэдров.

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

приведены результаты комплексного исследования кристаллической структуры и координационного окружения комплексообразователей для 8 кристаллов новых дикарбоксилатов трифенилсурьмы и трифенилвисмута, которые могут быть использованы для создания радиационно-стойких сцинтилляционных детекторов, а также 8 комплексов сурьмы с арильными, ароксильными, трифторметансульфонатными и галогенсодержащими лигандами, которые могут быть использованы для применения в медицине;

для кристаллов комплексов дикарбоксилатов триарилсурьмы и триарилвисмута **определена** взаимосвязь геометрического совершенства координационного окружения комплексообразователя и характерных частот колебаний карбоксилатного фрагмента, регистрируемых на ИК-спектрах ;

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

модели и теория, представленные в диссертации, опираются на базовые физические принципы и подходы, учитывают основные свойства исследуемых систем и обладают внутренней непротиворечивостью;

использованы традиционные методы экспериментальной физики, хорошо себя зарекомендовавшие в исследовании атомной структуры кристаллов, в том числе кристаллов комплексных соединений;

установлено согласие результатов соискателя с данными, ранее

представленными в литературе.

Результаты диссертационной работы могут быть рекомендованы для использования в различных научно-образовательных и научно-исследовательских организациях, среди которых можно выделить Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Удмуртский Федеральный исследовательский центр УрО РАН, Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН, Санкт-Петербургский государственный университет, Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых, Крымский федеральный университет имени В.И. Вернадского, Южно-Уральский государственный университет, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева.

Личный вклад соискателя: результаты рентгеноструктурных исследований, и всех расчетов, выполненных в рассмотренной диссертационной работе, были получены соискателем лично. Постановка цели и задач диссертационного исследования, интерпретация полученных результатов и формулировка выводов осуществлена совместно с научным руководителем.

Диссертационный совет отмечает, что диссертация Андреева П.В. соответствует паспорту научной специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния, и представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, содержащую оригинальные результаты, относящиеся к решению научной задачи по исследованию атомной структуры кристаллов комплексов Sb(V) и Bi(V) и особенностей их координационных полиэдров, и вносящую вклад в развитие физики конденсированного состояния. Диссертация Андреева П.В. отвечает соответствующему требованию пункта 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842.

С учетом вышесказанного установлено, что диссертация Андреева П.В. соответствует всем критериям и требованиям Раздела II Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013, № 842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук.

На заседании 26.12.2018 г. диссертационный совет принял решение присудить Андрееву П.В. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 4 доктора наук по специальности рассматриваемой диссертации (01.04.07 – физика конденсированного состояния), участвовавших в заседании, из 23 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за 16, против 0 (нет), недействительных бюллетеней 0 (нет).

Председатель

диссертационного совета

Ученый секретарь

диссертационного совета



Чупрунов Евгений Владимирович

Марычев Михаил Олегович

Дата оформления Заключения 26.12.2018 г.