

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.166.08,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
АВТОНОМНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО
ОБРАЗОВАНИЯ «НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
НИЖЕГОРОДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ им. Н. И. ЛОБАЧЕВСКОГО» ПО ДИССЕРТАЦИИ НА
СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

Аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 2.03.2021 г., протокол заседания № 2

О присуждении Овсянникову Дмитрию Вадимовичу, гражданину РФ, ученой степени кандидата химических наук. **Диссертация** «Механизм фотохимического переноса атома водорода в системе «амин-нитросоединение»», в виде рукописи, по специальности **02.00.04** — физическая химия (химические науки) принята к защите 2.12.2020 (протокол заседания №21) диссертационным советом Д 212.166.08, созданным на базе Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского» Министерства науки и высшего образования РФ (603022, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23, приказ Министерства образования и науки РФ № 105/нк от 11.04.2012).

Соискатель Овсянников Дмитрий Вадимович, 1992 года рождения, в 2016 году окончил с отличием магистратуру химического факультета ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского». В период с 2016 по 2020 гг. освоил программу подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре очной формы обучения ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского». В настоящее время Овсянников Дмитрий Вадимович работает в Федеральном

государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского» на кафедре физической химии химического факультета в должности ассистента.

Диссертация выполнена на кафедре физической химии химическом факультете ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского».

Научный руководитель — доктор химических наук, доцент, профессор кафедры физической химии химического факультета ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского» **Зеленцов Сергей Васильевич**.

Официальные оппоненты:

Кетков Сергей Юлиевич, доктор химических наук, ведущий научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт металлоорганической химии им. Г. А. Разуваева Российской Академии наук», заведующий лабораторией строения металлоорганических и координационных соединений,

Томилин Олег Борисович, кандидат химических наук, доцент, заведующий кафедрой физической химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарёва»

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им. Р. Е. Алексеева», г. Нижний Новгород, **в своем положительном отзыве**, составленном и подписанным заведующим кафедрой «нанотехнологии и биотехнологии» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им. Р.

Е. Алексеева», доктором технических наук, профессором Воротынцевым Ильей Владимировичем, указала, что диссертационная работа Овсянникова Дмитрия Вадимовича «Механизм фотохимического переноса атома водорода в системе «амин-нитросоединение»» соответствует требованиям пунктов 9-14 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. №842 предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор заслуживает присвоения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия» (Химические науки).

Соискатель имеет **11** опубликованных работ по теме диссертации, в том числе **3** статьи в журналах и изданиях, которые включены в перечень рецензируемых научных журналов и изданий ВАК для опубликования основных научных результатов диссертации и **8** тезисов докладов на международных и всероссийских научных конференциях.

Недостовверные сведения о списке трудов опубликованных соискателем ученой степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, в диссертации Овсянникова Д. В. отсутствуют.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. **Овсянников Д.В.,** Зеленцов С. В. Роль комплексообразования между молекулами монометиламина и триплетного нитрометана в реакции переноса водорода // Химия высоких энергий. – 2019. – № 2. – Т. 53. – С. 95–99.
2. **Овсянников Д.В.,** Зеленцов С. В. Квантово-химическое исследование окислительной способности нитросоединений на примере разложения ряда простейших аминов в присутствии триплетного нитрометана // Химия высоких энергий. – 2018. – № 3. – Т. 52. – С. 199–203.
3. **Овсянников Д.В.,** Зеленцов С.В. Реакционная способность ароматических и алифатических нитросоединений в триплетном

состоянии по отношению к аминам // Журнал Физической химии. – 2020. – №8. – Т. 94. – С. 1202-1205.

Тезисы конференций:

4. **Овсянников Д.В.** Сравнение реакционной способности ароматических и алифатических нитросоединений по отношению к аминам / Д.В. Овсянников, Д.А. Фомичев // Всероссийская конференция по квантовой и математической химии. – 2017. – Уфа. С. 47.
5. **Овсянников Д.В.** Теоретическое изучение механизмов фотоокисления аминов триплетным нитрометаном / Д.В. Овсянников, Д.А. Фомичев // VIII всероссийская молодежная школа-конференция «квантово-химические расчеты: структура и реакционная способность органических и неорганических молекул». – 2017. – Иваново. С. 168-169.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. **Фатеева Александра Владимировича**, к.х.н., с.н.с. лаборатории каталитических исследований Томского государственного университета. В качестве замечаний отмечено следующее:
 1. Практическая значимость работы сформулирована недостаточно ясно.
 2. Достаточно спорным является предположение автора о том, что связь N — O длиной 2.23 Å является водородной связью.
2. **Храпковского Григория Менделеевича**, д.х.н., проф., профессора кафедры ИСУИР, Казанский национальный исследовательский технологический университет. В качестве замечаний отмечено следующее:
 1. Приведенные в диссертации данные о волновых числах ИК-спектров для применяемых методов CCSD и OMP2 даже с учетом поправочных коэффициентов плохо передают значения ниже 1000 см⁻¹. С этих позиций обоснование метода не вполне понятно.
 2. При сравнении механизмов химических реакций применяются лишь барьеры элементарных реакций, что может привести к ошибочным выводам.

3. В диссертации во многом отсутствуют ссылки на работы, посвященные теоретическому изучению механизма термического распада изучаемых нитросоединений.

3. **Хурсана Сергея Леонидовича**, д.х.н., проф., заведующего кафедрой химической физики, зам.директора УФИХ УФИЦ РАН. В качестве замечаний отмечено следующее:

1. Неудачная фраза в пункте научной новизны «... методами, основывающимися на волновых функциях».
2. В автореферате приведена таблица, в которой сумма значений спиновой плотности для триплетного состояния меньше двух.
3. Неудачный вывод о том, что связь N — O является водородной.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их высоким профессионализмом и компетентностью в соответствующих отраслях науки, наличием у оппонентов и сотрудников ведущей организации современных публикаций в рецензируемых журналах по близкой к защищаемой тематике.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана научная идея о роли комплексообразования в реакции переноса атома водорода в системе «амин-нитросоединение», обогащающая научную концепцию о фотовосстановлении нитросоединений;

предложена гипотеза об одностадийном механизме переноса атома водорода от аминов к нитросоединениям в триплетном состоянии;

доказано наличие закономерности между структурой переходного состояния реакции переноса атома водорода и величиной заместителя в реакции между аминами и триплетными нитросоединениями;

введены реакционные схемы фотовосстановления, исключаящие перенос заряда в системе «амин-нитросоединение».

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказана необходимость учета комплексообразования в системе «амин-нитросоединение» при переносе атома водорода в возбужденном состоянии;

применительно к проблематике диссертации **использован** комплекс существующих базовых методов исследования, принятых в квантовой химии;

изложена методология изучения аналогичных систем с применением современных квантово-химических методов;

раскрыты противоречия, возникающие при использовании метода функционала плотности для исследования систем с дополнительным межмолекулярным связыванием;

изучены механизмы элементарных реакций переноса атома водорода;

проведена модификация существующих реакционных схем фотовосстановления нитросоединений.

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

разработаны рекомендации для экологически безопасной утилизации нитросоединений, являющихся антропогенными загрязнителями окружающей среды;

определены пути увеличения выхода реакции фотовосстановления нитросоединений;

созданы способы синтеза нитрозосоединений;

представлены методические рекомендации по экспериментальному исследованию аналогичных систем с применением фемтосекундной спектроскопии.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

для экспериментальных работ результаты получены с использованием сертифицированных программных пакетов и продемонстрирована воспроизводимость результатов;

теория, применяемая в рамках диссертации, построена на хорошо известных и надежных квантово-химических методах;

идея базируется на обобщении результатов моделирования реакции с различными заместителями при функциональных группах аминов и нитросоединений;

использованы методы теории функционала плотности и теории возмущений второго порядка, реализованные в рамках сертифицированных программных пакетов, проведена верификация полученных данных;

установлено, что предложенная схема лучше описывает фотохимическое восстановление нитросоединений по сравнению с существующими схемами.

Личный вклад соискателя состоит в непосредственном участии на всех этапах процесса: при постановке задач, планировании и выполнении экспериментов, обработке и интерпретации полученных экспериментальных данных, формулировке выводов из полученных результатов; автор принимал личное участие в апробации результатов на конференциях различного уровня и подготовке публикаций по итогам выполненной работы.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи (проблемы) и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается обоснованием и целенаправленным планом исследований, формулировкой цели работы и выводов.

Диссертационная работа представляет собой завершенную научно-исследовательскую работу, в которой на основании выполненных автором исследований разработаны положения, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение, заключающееся в создании новой реакционной схемы фотовосстановления нитросоединений с одностадийным переносом атома водорода.

На заседании 2 марта 2021 года диссертационный совет принял решение присудить Овсянникову Д. В. ученую степень кандидата химических наук, так как диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям, установленным пунктами 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденным Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. №842.

При проведении открытого голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 6 докторов наук по специальности 02.00.04 — физическая химия, участвовавших в заседании, из 22 человека, входящих в состав совета, дополнительно введены в разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 18, против 0, воздержавшихся 0.

Председатель диссертационного совета

доктор химических наук, профессор

Ученый секретарь

диссертационного совета

кандидат химических наук



Князев Александр

Владимирович

Буланов Евгений

Николаевич

2 марта 2021