

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.379.04, СОЗДАННОГО НА
БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО АВТОНОМНОГО
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ АКАДЕМИКА С.П. КОРОЛЕВА» МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 29 июня 2023 г. № 6

О присуждении Савченкову Антону Владимировичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени доктора химических наук.

Диссертация «Новые методы кристаллохимического анализа в рамках стереоатомной модели строения кристаллов» по научной специальности 1.4.1. Неорганическая химия принята к защите 21 марта 2023 года (протокол заседания № 2) диссертационным советом 24.2.379.04, созданным на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» Министерства науки и высшего образования РФ, 443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, д. 34, утвержден приказом Министерства науки и высшего образования РФ № 857/нк 24 сентября 2019 года.

Соискатель Савченков Антон Владимирович, 22 апреля 1988 года рождения. Диссертацию на соискание ученой степени кандидата химических наук «Синтез и строение новых кротонат-, бутират- и валератсодержащих комплексов уранила» защитил в 2014 году в диссертационном совете Д 212.166.08, созданном на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского» по специальности 02.00.01 – Неорганическая химия. С 1 января 2021 года зачислен в докторантуру федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» по специальности 02.00.01 Неорганическая химия, работает в должности доцента кафедры неорганической химии федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева».

Диссертация выполнена на кафедре неорганической химии федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования

«Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева».

Научный консультант – доктор химических наук, профессор, Сережкин Виктор Николаевич, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева», кафедра неорганической химии, профессор.

Официальные оппоненты:

Еремин Николай Николаевич, доктор химических наук, член-корреспондент РАН, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова», заведующий кафедрой кристаллографии и кристаллохимии;

Кузьмичева Галина Михайловна, доктор химических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «МИРЭА - Российский технологический университет», профессор кафедры цифровых и аддитивных технологий;

Сулейманов Евгений Владимирович, доктор химических наук, профессор, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», главный научный сотрудник научно-исследовательского института химии

– 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 отзыве, подписанном Илюхиным Андреем Борисовичем, доктором химических наук, ведущим научным сотрудником Лаборатории кристаллохимии и рентгеноструктурного анализа, Якушевым Ильей Аркадьевичем, кандидатом химических наук, старшим научным сотрудником, заведующим лабораторией металлокомплексного катализа, указала, что диссертационная работа Савченкова Антона Владимирович «Новые методы кристаллохимического анализа в рамках стереоатомной модели строения кристаллов» соответствует паспорту специальности 1.4.1. Неорганическая химия. По объему выполненных исследований, новизне, актуальности и практической значимости полученных результатов диссертационная работа Савченкова Антона Владимировича полностью соответствует требованиям Высшей аттестационной комиссии (пп. 9–14), установленным в «Положении о присуждении ученых степеней» (утверждено Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 № 842 в действующей редакции) и предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора химических наук, а соискатель заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.1. Неорганическая химия.

Соискатель имеет 72 опубликованные работы, в том числе по теме диссертации опубликовано 39 работ, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 27 работ. Публикации в полной мере раскрывают проблемное содержание исследования, содержат основные концептуальные выводы диссертации, посвящены разработке новых методов кристаллохимического анализа в рамках стереоатомной модели строения кристаллов.

Общий объем публикаций соискателя составляет 6.7 п/л (авторский текст).

В научных статьях не выявлен заимствованный материал без ссылки на автора и (или) источник заимствования. Материалы и результаты научных работ других исследователей использованы со ссылками на автора и (или) источник заимствования. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах. Изложены действительные данные об авторском вкладе и объеме научных изданий. Общий объем научных изданий по теме диссертации составляет 14.9 п/л, а авторский вклад соискателя – 3.8 п/л.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Serezhkin V.N., Yu L., Savchenkov A.V. ROY: using the method of molecular Voronoi–Dirichlet polyhedra to examine the fine features of conformational polymorphism / (ROY: использование метода молекулярных полиэдров Вороного–Дирихле для изучения тонких особенностей конформационного полиморфизма) // Cryst. Growth Des. 2022. V. 22, № 11. P. 6717–6725. 0.56/0.19 п/л.

2. Savchenkov A.V., Uhanov A.S., Grigoriev M.S., Fedoseev A.M., Pushkin D.V., Serezhkina L.B., Serezhkin V.N. Halogen bonding in uranyl and neptunyl trichloroacetates with alkali metals and improved crystal chemical formulae for coordination compounds / (Галогенное связывание в трихлорацетатах уранила и нептунила с щелочными металлами и уточненные кристаллохимические формулы координационных соединений) // Dalton Transactions. 2021. № 50. P. 4210–4218. 0.56/0.08 п/л.

3. Serezhkin V.N., Rogaleva E.F., Savchenkov A.V., Pushkin D.V., Serezhkina L.B. Aspects of the topology of actinide atom substructures in crystal structures and the concept of antiliquid / (Аспекты топологии атомных подрешеток актинидов в кристаллических структурах и концепция антижидкости) // Acta Crystallogr., Sect. A: Found. Adv. 2019. V. 75, № 2. P. 370–378. 0.56/0.11 п/л.

4. Savchenkov A.V., Vologzhanina A.V., Pushkin D.V., Serezhkina L.B., Serezhkin V.N. Highly conjugated systems with pedal motion in uranyl crotonate compounds with 1,2-bis(4-pyridyl)ethylene as a neutral ligand or a counter cation / (Высокосопряженные системы с педальным движением в кротонатах уранила с 1,2-бис(4-пиридил)этиленом в качестве нейтрального лиганда или противокатиона) // Inorg. Chim. Acta. 2019. V. 498. P. 119089. 0.63/0.13 п/л.

5. Savchenkov A.V., Serezhkin V.N. A method for visualization of the variation of noncovalent interactions in crystal structures of conformational polymorphs / (Метод визуализации изменения нековалентных взаимодействий в кристаллических структурах конформационных полиморфов) // Acta Crystallogr., Sect. B: Struct. Sci., Cryst. Eng. Mater. 2018. V. 74, № 2. P. 137–147. 0.69/0.35 п/л.

6. Savchenkov A.V., Vologzhanina A.V., Pushkin D.V., Serezhkina L.B. Unusual heteronuclear uranyl clusters with aliphatic monocarboxylate ligands and coordination modes of crotonate, butyrate, and valerate ions / (Необычные гетероядерные уранильные кластеры с алифатическими монокарбоксилатными лигандами и способы координации кротонат-, бутират- и валерат-ионов) // Eur. J. Inorg. Chem. 2018. V. 2018, № 18. P. 1869–1876. 0.50/0.13 п/л.

7. Savchenkov A.V., Vologzhanina A.V., Dmitrienko A.O., Zubavichus Y.V., Pushkin D.V., Serezhkina L.B., Serezhkin V.N. Crystal structures of uranyl complexes with isobutyrate and isovalerate anions / (Кристаллические структуры комплексов уранила с изобутиратными и изовалератными анионами) // Dalton Trans. 2018. V. 47, № 6. P. 1849–1856. 0.50/0.07 п/л.

8. Serezhkin V.N., Grigoriev M.S., Abdulmyanov A.R., Fedoseev A.M., Savchenkov A.V., Stefanovich S.Yu., Serezhkina L.B. Syntheses, crystal structures, and nonlinear optical activity of $\text{Cs}_2\text{Ba}[\text{AnO}_2(\text{C}_2\text{H}_5\text{COO})_3]_4$ ($\text{An} = \text{U}, \text{Np}, \text{Pu}$) and unprecedented octanuclear complex units in $\text{KR}_2(\text{H}_2\text{O})_8[\text{UO}_2(\text{C}_2\text{H}_5\text{COO})_3]_5$ ($R = \text{Sr}, \text{Ba}$) / (Синтез, кристаллические структуры и нелинейно-оптическая активность $\text{Cs}_2\text{Ba}[\text{AnO}_2(\text{C}_2\text{H}_5\text{COO})_3]_4$ ($\text{An} = \text{U}, \text{Np}, \text{Pu}$) и беспрецедентные восьмиядерные комплексные частицы в соединении $\text{KR}_2(\text{H}_2\text{O})_8[\text{UO}_2(\text{C}_2\text{H}_5\text{COO})_3]_5$ ($R = \text{Sr}, \text{Ba}$)) // Inorg. Chem. 2017. V. 56, № 12. P. 7151–7160. 0.63/0,09 п/л.

9. Savchenkov A.V., Grigoriev M.S., Udivankin P.A., Pushkin D.V., Serezhkina L.B. Maleate ions as ligands in crystal structures of coordination compounds, including two uranyl complexes / (Малеат-ионы как лиганды в кристаллических структурах координационных соединений, в том числе двух комплексов уранила) // Polyhedron. 2017. V. 127. P. 331–336. 0.38/0.08 п/л.

10. Savchenkov A.V., Klepov V.V., Vologzhanina A.V., Serezhkina L.B., Pushkin D.V., Serezhkin V.N. Trinuclear $\{\text{Sr}[\text{UO}_2\text{L}_3]_2(\text{H}_2\text{O})_4\}$ and pentanuclear $\{\text{Sr}[\text{UO}_2\text{L}_3]_4\}_2^-$ uranyl monocarboxylate complexes (L -acetate or n -butyrate ion) / (Трехъядерные $\{\text{Sr}[\text{UO}_2\text{L}_3]_2(\text{H}_2\text{O})_4\}$ и пятиядерные $\{\text{Sr}[\text{UO}_2\text{L}_3]_4\}_2^-$ комплексы уранила с монокарбоксилатными лигандами (L – ацетат или n -бутират-ион)) // CrystEngComm. 2015. V. 17, № 4. P. 740–746. 0.44/0.07 п/л.

На диссертацию и автореферат поступили следующие отзывы.

Ведущей организации – федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук. В отзыве содержатся следующие замечания. 1) Поскольку

автор работы вводит использование k - Φ критерия для установления конформационного полиморфизма, в том числе с приведением краткого принципа действия этого критерия, и на его основе делает многочисленные выводы, в работу мог бы быть введен раздел оценки погрешности этого значения. 2) На стр. 33 приводится значение размера атома тория с радиусом сферического домена R_{sd} с довольно точным значением $1.413(17) \text{ \AA}$, но не приводится диапазон разброса этого параметра. 3) В таблице 1 на стр. 48, а также в других таблицах, используется термин «сайт-симметрия», хотя более подходящим в данном случае является русскоязычный термин «точечная симметрия». 4) На стр. 76 и далее по тексту работы регулярно встречается смешанное обозначение кода структуры не с помощью рефкода CCDC (Кембриджского банка структурных данных), но и с помощью номера депонирования CCDC. 5) В графиках, например, на рис. 39, стр. 129, в качестве десятичного разделителя дробных значений использованы запятые, хотя в основном тексте применяются точки.

Официального оппонента доктора химических наук, члена-корреспондента РАН Еремина Николая Николаевича. В отзыве содержатся следующие замечания. 1) С точки зрения оппонента сравнение результатов полученных методом пересекающихся сфер и методом валентности связи украсило бы диссертационную работу. 2) Некоторое недоумение вызвало у оппонента присутствие англоязычных подписей в ряде рисунков (3–5, а также 10), представленных автором. 3) Название параграфа 1.3 «Кристаллохимические особенности f-элементов и их соединений» не полностью отражает содержание, поскольку основная часть материала посвящена теории наиболее плотного заполнения пространства, причем разговор идет не только про f-элементы. Также в названии параграфа 1.4 следовало бы конкретизировать, что именно «кристаллохимически систематизируется» по Сережкину. 4) Возможно, стоило бы дать более развернутое описание методов синтеза соединений и изучения их функциональных характеристик с помощью ИК и УФ-спектроскопии, дифференциальным термическим и термогравиметрическим анализом, рентгенофазовым и рентгеноструктурным анализом. 5) Некоторые вопросы вызывают уравнения линейной регрессии (8–11) и рис. 15 зависимости Q от D_U^{R-U} для 19-ти карбоксилатов уранила, обладающими весьма низкими значениями достоверности аппроксимации. Точность коэффициентов уравнения регрессии в этом случае является весьма избыточной. Более того, не совсем ясно, почему было выбрано именно линейная зависимость совершенно неочевидная из рисунка. 6) Каким образом можно однозначно установить название координационного полиэдра? Например, где проходит граница, отличающая октаэдр ($KЧ = 6$) от тригональной призмы ($KЧ = 6$)? Также не совсем ясно, являются ли экзотические названия полиэдров «хула-хуп», «сфенокорона» авторскими терминами или они использованы в литературе и ранее. 7) Можно предложить автору в дальнейшем отойти от качественного описания этого

эффекта «... маловероятно, что в первой координационной сфере рассматриваемого атома окажется кристаллографически идентичный атом» и задействовать аппарат математической комбинаторики для точной количественной оценки всех возможных конфигураций.

Официального оппонента доктора химических наук, профессора Кузьмичевой Галины Михайловны. В отзыве содержатся следующие замечания. 1) «Состав соединения описывается количественно и объективно по определению». Это несколько упрощенный взгляд на состав, который может быть объемный и поверхностный, локальный ближайшего окружения конкретного атома, причем не всегда объективен. 2) «Полиморфизм – это способность химических веществ существовать в виде модификаций с различными кристаллическими структурами». Известны гомеоморфные переходы соединений, полиморфы которых имеют одинаковую кристаллическую структуру. 3) В таблицах 1, 10, 11. «Некоторые характеристики структуры карбоксилатов уранила» нет параметров ячейки, на основании которых можно было бы подумать об изоструктурности (кристаллохимической или топологической). 4) Известно, что лантаноиды делятся на две группы («легкие» и «тяжелые») и (или) на четыре группы – тетрады, вследствие чего могут меняться и меняются кристаллохимические и физико-химические свойства соединений с их участием. Причем, на гадолинии наблюдается перелом. Может ли такая же ситуация проявляться на актиноидах? Согласно выводам, «.....с Am начинается резкое сжатие и локализация 5f-оболочки, вследствие чего вклад 5f-электронов в образование химических связей начинает снижаться». У Am, как и у Gd устойчивая f^7 оболочка. 5) Хотелось бы узнать, почему некоторые соединения были изучены с использованием синхротронного излучения? Что получилось дополнительно определить на синхротроне в отличие от лабораторных дифрактометров? 6) Поражает точность расчета величины G_3 - шесть знаков после запятой. Имеет ли эта точность математическое обоснование? Экспериментальные рентгеноструктурные данные (параметры ячейки, координаты атомов, межатомные расстояния) в подавляющем большинстве случаев не рассчитываются с такой точностью. 7) Уточнить, что такое «макроскопический» и «микроскопический» уровень (стр. 124), если мы в кристаллических структурах оперируем ангстремами? 8) В работе используются очень много параметров, часть из которых есть в приведенных сокращениях, а часть отсутствует. Поэтому приходится при появлении новой характеристики искать ее объяснение по всему предыдущему тексту или догадываться, что это могло бы быть (например, p в разделе 3.10). В подобном случае лучше использовать интерактивную запись.

Официального оппонента доктора химических наук, профессора Сулейманова Евгения Владимировича. В отзыве содержатся следующие замечания. 1) На стр. 43 и далее на основании состава комплексов в кристалле автор делает утверждения о

составе комплексов в маточном растворе и направлении смещения равновесия. Строго говоря, это может рассматриваться только как предположение. Во-первых, необходимо иметь экспериментальные данные (например, спектральные) о составе комплексов в растворе. Во-вторых, следует провести моделирование (например, термодинамическое) состава раствора, чтобы определить наиболее вероятное соотношение комплексов в растворе. 2) На стр. 54 есть утверждение «НЛО активность также достаточно закономерно понижается при увеличении числа атомов углерода». Что подразумевается под словом «закономерно»? Если это «16-6-4-2», то закономерность, вероятно, есть. Однако, что лежит в её основе? 3) По этому же пункту хотелось бы отметить, что вряд ли показанное на рис. 15 (стр. 57) расположение точек можно считать свидетельством зависимости между Q и D_U . 4) На мой взгляд, для полноты рассмотрения затронутой в данном разделе проблемы автору стоило сопоставлять представления в терминах развиваемой им СМСК с первичными данными. Имеются в виду координаты атомов в структуре, понижение симметрии, отражаемое реализацией «менее симметричной» пространственной группы. Кроме этого, автор сосредоточился на анализе катионной подрешётки, хотя есть примеры структур, в которых катионы и большая часть анионов расположены в centrosимметричных узлах, а отклонение есть только у малой части анионов. При этом данного отклонения вполне достаточно, чтобы кристалл генерировал вторую гармонику и его структуру считали нецентросимметричной. Например, такое реализуется в структуре соединения $CsNbMoO_6$. 5) На стр. 114 автор утверждает «... не исключено, что степень участия $5f$ -электронов в образовании связей может зависеть и от КЧ атомов $An(VI)$. К сожалению, проверка такой зависимости невозможна по нескольким причинам. Так, до сих пор не имеется ни одного охарактеризованного изоструктурного ряда соединений, содержащих атомы шестивалентных U , Np , Pu и Am с КЧ 7.». Вынужден не согласиться. Уже давно имеются данные Мёссбауэровской спектроскопии соединений нептуния, которые показывают взаимосвязь между участием f -электронов атома нептуния и его КЧ. 6) К сожалению, разделы диссертации не сопровождаются выводами, в диссертации отсутствует раздел «Заключение». Это существенно затрудняет формирование обобщенного представления о достижениях работы, и, в частности, о том, как другие исследователи могли бы использовать приёмы анализа, развиваемые в диссертации. Итоговый раздел «Выводы» не решает этой проблемы. 7) Диссертант в работе сосредоточился на изложении результатов, полученных развиваемым им методом. Поскольку существуют и другие методы кристаллохимического анализа, хотелось бы видеть в работе постоянное и объективное сопоставление данных разных методов, чтобы в полной мере оценить эффективность предлагаемого диссертантом. 8) По тексту диссертации встречаются явно дискуссионные утверждения, которые отмечены в тексте отзыва.

На автореферат поступили следующие отзывы.

1. Доктора химических наук, профессора, профессора кафедры физической и неорганической химии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Сибирский федеральный университет» Головнева Николая Николаевича. Отзыв содержит одно замечание. На с. 9–10 равновесие в растворе в случае лабильных систем не определяет состав продуктов кристаллизации. Кристаллизация определенных соединений преимущественно зависит от кинетических факторов, например, скорости образования зародышей.

2. Доктора химических наук, профессора, главного научного сотрудника лаборатории синтеза функциональных материалов и переработки минерального сырья федерального государственного бюджетного учреждения науки Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук Данилова Вячеслава Петровича. Отзыв не содержит замечаний.

3. Доктора технических наук, профессора кафедры технической физики Северского технологического института – филиала федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» Жиганова Александра Николаевича. Отзыв содержит два замечания. 1. По какой причине экспериментальные данные по нелинейно-оптическим свойствам на рис. 2 аппроксимируются именно линейной зависимостью, хотя с первого взгляда кажется, что зависимость может быть иной? 2. Насколько надежно определяется наличие невалентных контактов с низкими парциальными вкладами, приведенных на рис. 12, 13? Ведь если подобными контактами можно пренебречь, то выводы автора по этим данным становятся необоснованными.

4. Доктора химических наук, профессора, заведующего кафедрой аналитической и медицинской химии федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.М. Лобачевского» Князева Александра Владимировича. Отзыв не содержит замечаний.

5. Доктора химических наук, профессора, профессора кафедры неорганической химии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» Морозова Игоря Викторовича. Отзыв содержит одно замечание. В автореферате никак не представлена информация о синтезе 42 координационных соединений урана и трансурановых элементов, выполненном автором (хотя и имеется отсылка к облачному хранилищу, где можно найти оригинальные статьи). Между тем, эта информация в виде лаконичного

обобщения была бы очень полезна с учетом того, что автор работает с такими экзотическими соединениями.

Все отзывы носят положительный характер, в них содержится высокая оценка результатов диссертационного исследования, отмечается высокая теоретическая и научно-практическая значимость работы, ее актуальность, новизна, наличие апробации. Во всех отзывах отмечено, что диссертация представляет собой самостоятельную научно-квалификационную работу, которая отвечает требованиям Положения о присуждении ученых степеней, и сделано заключение о возможности присуждения Савченкову А.В. ученой степени доктора химических наук по научной специальности 1.4.1. Неорганическая химия.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их компетентностью, широко известными достижениями в научных исследованиях со схожей тематикой, наличием у оппонентов и сотрудников ведущей организации современных публикаций в рецензируемых журналах.

Выбор Еремина Н.Н. в качестве официального оппонента по диссертации обосновывается тем, что он является специалистом в области компьютерного моделирования структур и свойств минералов и неорганических соединений.

Выбор Кузьмичевой Г.М. в качестве официального оппонента по диссертации обосновывается тем, что она является специалистом в области неорганической химии, рентгенодифракционных исследований.

Выбор Сулейманова Е.В. в качестве официального оппонента по диссертации обосновывается тем, что он является специалистом в области неорганической химии, кристаллохимии неорганических соединений.

Выбор ведущей организации обосновывается достижениями ее специалистов в области неорганической кристаллохимии.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана концепция антижидкости – кристаллического вещества, в гомоатомных подрешетках которого отсутствует ближний (локальный) порядок во взаимном расположении атомов, хотя дальний порядок (трансляционная симметрия) сохраняется,

предложено использования вектора D_A и его аналога D_U^{R-U} для оценки нелинейно-оптических свойств карбоксилатуранилатов,

доказано, что конформационный полиморфизм обусловлен различием спектров рангов граней, отвечающих внутримолекулярным невалентным контактам в структуре химически идентичных молекул,

введены новые методы и понятия для анализа невалентных взаимодействий в кристаллических структурах, такие как понятие характеристических взаимодействий, (РГ, d) распределение, методика расчета усредненных парциальных вкладов

единичных контактов, упрощенный k -Ф критерий, метод визуализации изменения невалентных взаимодействий.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказан факт существования 42 новых U-, Np- или Pu-содержащих координационных соединений, получены данные о структуре и некоторых свойствах их кристаллов,

применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов) использованы данные рентгеноструктурного, кристаллохимического, дифференциально-термического и термогравиметрического анализа, ИК спектроскопии,

изложены аргументы, свидетельствующие о существовании взаимосвязи между гетероядерными комплексами разного состава и строения, содержащими гидратированные ионы двухвалентных металлов R^{2+} и трикарбоксилатные комплексы $[UO_2L_3]^-$,

раскрыты существенные проявления стереоатомной модели строения кристаллов, позволяющие получать информацию из базовых кристаллоструктурных данных, недоступную в рамках других моделей, например, для выявления наличия $5f$ -взаимодействий между атомами металлов в актинидных подрешетках структур кристаллов,

изучены системы межатомных взаимодействий во всех известных соединениях с наибольшим количеством структурно изученных полиморфных модификаций, что позволило установить отличительные признаки каждой из модификаций,

проведена модернизация записи типов координации лигандов и кристаллохимических формул так, чтобы она включала список донорных атомов лигандов, определяющих их общую дентатность.

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

разработаны и внедрены новые методы, инструменты и понятия для анализа невалентных взаимодействий в кристаллических структурах как в учебный процесс, так и в научно-исследовательскую деятельность,

определены геометрические параметры донорно-акцепторного галогенносвязанного синтона, который можно использовать в кристаллохимическом дизайне,

создан набор инструментов для проведения кристаллохимического анализа соединений, позволяющий получать объективные и количественные характеристики невалентных взаимодействий либо их удобное и четкое визуальное представление,

представлены результаты расчета невалентных взаимодействий в структурах большого количества кристаллов разных классов химических соединений, которые можно использовать для установления взаимосвязей с экспериментальными данными в последующих исследованиях.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

для экспериментальных работ результаты получены на современном высокоточном оборудовании и являются воспроизводимыми,

теория построена на достоверных, проверяемых данных и согласуется с ранее опубликованными в литературе результатами научных исследований по теме диссертации,

идея базируется на использовании характеристик полиэдров Вороного–Дирихле в рамках стереоатомной модели строения кристаллических веществ для получения точных количественных характеристик кристаллических структур и межатомных взаимодействий в них,

использованы расчетные методы кристаллохимического анализа, обеспечивающие получение новых оригинальных результатов и выводов,

установлена хорошая корреляция между теоретическими расчетными данными и экспериментальными результатами,

использованы современные экспериментальные методы исследования полученных соединений, такие как рентгеноструктурный, дифференциально-термический и термогравиметрический анализ, ИК спектроскопия.

Личный вклад соискателя состоит в определении целей и задач исследования, а также участии в разработке методик синтеза и получении монокристаллов новых координационных соединений, интерпретации результатов использованных физико-химических методов исследования, изучении кристаллохимических особенностей как впервые синтезированных соединений, так и содержащихся в банках кристаллографических данных, поиске взаимосвязей между составом, строением и свойствами химических соединений различных классов, разработке новых методов, инструментов и понятий кристаллохимического анализа, участии в подготовке публикаций и выступлении с устными и стендовыми докладами на всероссийских и международных конференциях.

Результаты исследования могут быть включены как фундаментальные характеристики в специализированные справочники, базы данных и могут использоваться в учебном процессе, в частности, в лекционных курсах «Неорганическая химия» (разделы «Химия элементов», «Химия комплексных соединений»), «Кристаллохимия», «Основы колебательной спектроскопии» и ряда спецдисциплин. Результаты диссертационной работы представляют интерес для научных сотрудников МГУ им. М.В. Ломоносова, Радиевого института им. В.Г. Хлопина, ННГУ им. Н.И. Лобачевского, ИФХЭ РАН, ИХС РАН, ИОНХ РАН, ИНЭОС РАН и других организаций, изучающих строение и свойства кристаллических соединений. Полученные результаты рентгеноструктурного анализа 42 соединений включены в международный Кембриджский банк структурных данных и могут быть использованы для анализа взаимосвязи между

составом, строением и свойствами соединений учеными мирового научного сообщества. Разработанные методы, инструменты и понятия для исследования невалентных взаимодействий в кристаллических структурах могут использоваться для проведения кристаллохимического анализа любых классов химических соединений.

Диссертация Савченкова Антона Владимировича соответствует специальности 1.4.1. Неорганическая химия (химические науки) и отвечает требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук (пп. 9–11, 13, 14 Положения о присуждении ученых степеней).

В ходе защиты было высказано следующее критическое замечание:

– член диссертационного совета, доктор химических наук, профессор Онучак Л.А. указала, что она бы предложила изменить систему обозначений по Сержкину. Например, если записано O_2 , то незнающий человек может подумать, что это кислород O_2 , а лучше записать $2O$ – так будет понятнее.

Соискатель Савченков А.В. ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы и привел собственную аргументацию, что на самом деле рассматривались разные варианты системы обозначений, и если, например, цифры использовать не в подстрочных индексах, то тогда, например, в случае Si_2O будет не понятно к какому атому относится цифра. Поэтому, в итоге было принято решение остановиться на представленной номенклатуре.

На заседании 29 июня 2023 года диссертационный совет принял решение за разработку новых методов кристаллохимического анализа в рамках стереоатомной модели строения кристаллов, что можно квалифицировать как решение крупной научной проблемы, имеющей важное значение для развития неорганической химии, присудить Савченкову А.В. ученую степень доктора химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 13 человек¹, из них 7 докторов наук по научной специальности 1.4.1. Неорганическая химия, участвовавших в заседании, из 19 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 13, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель диссертационного
совета 24.2.379.04

Пушкин Денис Валериевич

Исполняющий обязанности
ученого секретаря диссертационного
совета 24.2.379.04

Курбатова Светлана Викторовна

29.06.2023.

¹ Савченков Антон Владимирович в кворуме не учитывался.