

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.411.02,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО
ОБРАЗОВАНИЯ «ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 15.06.2023 г. № 12

О присуждении **Крылову Анатолию Анатольевичу**, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Влияние процессов окисления-восстановления на структуру и геометрию плёнок полианилина, политолуидина и полинафтиламина» по специальности 1.4.4. Физическая химия принята к защите 12 апреля 2023 г. протокол № 7 диссертационным советом 24.2.411.02, созданным на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» Министерства науки и высшего образования РФ; адрес: 170100, г. Тверь, ул. Желябова, 33; приказ № 105/нк от 11 апреля 2012 г.

Соискатель – Крылов Анатолий Анатольевич, 2 декабря 1993 года рождения, в 2016 году окончил федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет» с присвоением квалификации магистр по направлению подготовки 04.04.01 Химия; в 2020 году окончил аспирантуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки.

Работает ассистентом кафедры химии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный медицинский университет» Министерства Здравоохранения Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре неорганической и аналитической химии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» Министерства науки и высшего образования РФ.

Научный руководитель – доктор химических наук, доцент Алексеев Владимир Георгиевич, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет», профессор кафедры неорганической и аналитической химии.

Официальные оппоненты:

Парфенюк Владимир Иванович, доктор химических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук», главный научный сотрудник лаборатории «Новые материалы на основе макроциклических соединений»

Телегина Людмила Николаевна, кандидат химических наук, федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук», старший научный сотрудник лаборатории механизмов реакций, дали **положительные отзывы** на диссертацию.

Ведущая организация - федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Трудового Красного Знамени «Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук», г. Москва, в своем **положительном отзыве**, подписанном доктором химических наук, профессором Карпачевой Галиной Петровной, главным научным сотрудником лаборатории химии полисопряженных систем и утвержденном чл.-корр. РАН, доктором химических наук Максимовым Антоном Львовичем, директором ИНХС РАН, указала, что диссертационная работа Крылова А.А. по своей актуальности, научной новизне, практической значимости, а также по объему выполненных исследований и личному вкладу соискателя отвечает требованиям к кандидатским диссертациям согласно пп.9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842, а ее автор заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Соискатель имеет 22 опубликованные работы, по теме диссертации опубликовано 9 работ, в том числе 9 - в журналах из Перечня рецензируемых научных изданий, включая 2 статьи в журналах, индексируемых в международных базах цитирований Scopus и WoS. Получен один патент.

Наиболее значимые **научные работы** по теме диссертации:

1. Рясенский С.С., Крылов А.А., Феофанова М.А., Баранова Н.В. Влияние pH на актуаторные свойства полианилиновой плёнки // Высокомолекулярные соединения. Серия Б. 2015. Т. 57. №. 4. С. 295–300.

2. Крылов А.А., Алексеев В.Г. Влияние допирующих анионов и pH среды на электромеханические свойства плёнок поли-о-толуидина и поли- α -нафтиламина // Вестник Тверского гос. университета. Серия: Химия. 2020. № 2. С. 24–31.

3. Крылов А.А., Иванова А.И., Алексеев В.Г., Феофанова М.А., Баранова Н.В. Изменение структуры поверхности плёнок полупроводниковых полимеров в процессе обратимого окисления-восстановления // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2021. Вып. 13. С. 228–234.

4. Крылов А.А., Алексеев В.Г., Феофанова М.А. Компьютерное моделирование структуры молекулы дифенилциклогексадиимина // Вестник Тверского гос. университета. Серия: Химия. 2022. № 4. С. 56–61.

Публикации в достаточной степени отражают содержание, новизну, практическую и теоретическую значимость диссертационного исследования.

На диссертацию и автореферат поступило 4 отзыва, все **отзывы положительные**:

1. Миргорода Юрия Александровича, д.х.н., ведущего научного сотрудника Регионального центра нанотехнологий ФГБОУ ВО «Юго-Западный государственный университет». В отзыве содержатся следующие замечания: подписи таблиц 1 и 2 «Расстояние и углы в моделях протонированных олигомеров» желательнее отредактировать как «Расстояние и углы валентных связей в моделях протонированных олигомеров»; в подписях рисунков 11, 13, 14 имеются разрывы слов, видимо, при вставке копированием.

2. Грибковой Оксаны Леонидовны, к.х.н., ведущего научного сотрудника лаборатории «Электронные и фотонные процессы в полимерных наноматериалах» ФГБУН «Институт физической химии и электрохимии имени А.Н. Фрумкина Российской академии наук». В отзыве содержится ряд замечаний: в автореферате не приведены экспериментальные результаты физико-химических исследований синтезированных плёнок ПАНИ и его структурных аналогов; не указывается используемый электрод сравнения; непонятно, на основе каких экспериментальных данных (стр.15) автор делает вывод о том, что карбоновые кислоты обеспечивают большую степень допирования ПАНИ по сравнению с HCl.

3. Мустафина Ахата Газизьяновича, д.х.н., заведующего лабораторией органических функциональных материалов Уфимского Института химии – обособленного структурного подразделения ФГБНУ «Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук». Замечаний не содержит.

4. Дмитриева Ивана Юрьевича, к.ф.-м.н., старшего технолога Группы развития технологии Отдела солнечной энергетики ООО «Научно-технический центр тонкопленочных технологий в энергетике». В отзыве содержится замечание: непонятно, котировались и анализировались ли проницаемости лака, толщины слоев, расстояния и взаимного расположения электродов в электрохимической ячейке при анализе электромеханического эффекта.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что официальные оппоненты и сотрудники ведущей организации являются специалистами высокой профессиональной квалификации в области физической химии. Официальный оппонент В.И. Парфенюк является признанным специалистом в области электрохимии, имеет ряд публикаций в высокорейтинговых журналах по электросинтезу электропроводящих полимеров. Официальный оппонент Л.Н. Телегина

является специалистом в области методов математического моделирования, молекулярного моделирования, имеет ряд публикаций в высокорейтинговых журналах по данной тематике.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований **установлено**, что:

- окислительно-восстановительный механический эффект обусловлен изменением валентных углов в макромолекулах исследованных полимеров;
- величина эффекта зависит от химической природы кислоты-допанта, использованной в процессе синтеза плёнки полимера;
- взаимодействие анионов кислоты-допанта с макромолекулами ПАНИ и его структурных аналогов зависит от способности анионов образовывать прочные водородные связи.

Обосновано применение методик квантовохимического расчёта моделей олигомеров ПАНИ и его структурных аналогов методом DFT, обеспечивающее корректное воспроизведение валентных углов, длин связей и двугранных углов между плоскостями ароматических циклов.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что полученные в работе результаты существенно дополняют имеющиеся данные по свойствам ПАНИ и его структурных аналогов, влиянию условий синтеза на свойства плёнок исследованных полимеров и возможности их практического применения. Разработана методика для расчета конформационных свойств полимеров.

Значение полученных соискателем **результатов исследования для практики** обусловлено тем, что выявленные закономерности могут быть использованы для разработки действующих моделей электрохимических актуаторов, химических сенсоров для определения окислительно-восстановительного потенциала многокомпонентных растворов.

Оценка достоверности результатов работы выявила: полученные результаты подтверждаются сопоставлением данных, полученных в работе с помощью различных современных экспериментальных и теоретических методов исследования.

Личный вклад соискателя заключается в проведении экспериментов по синтезу плёнок исследуемых полупроводниковых полимеров, их исследовании с помощью различных экспериментальных физико-химических методов и методом DFT. Автор внёс основной вклад в анализ и обобщение результатов экспериментов, формулирование выводов и публикацию результатов.

В ходе защиты диссертации были высказаны критические замечания о том, что в ходе экспериментов не проводилось измерения толщины плёнок и, таким образом, не обеспечивалось постоянство их толщины.

Соискатель Крылов А.А. ответил, что постоянство толщины плёнок обеспечивалось одинаковым числом циклов окисления-восстановления в ходе электросинтеза плёнок методом циклической вольтамперометрии.

Диссертация соответствует критериям «Положения о порядке

присуждения ученых степеней» №842 от 24.09.2013 г. в текущей редакции. На заседании 15 июня 2023 года диссертационный совет 24.2.411.02 принял решение за установление на молекулярном уровне механизма окислительно-восстановительного механического эффекта в плёнках ПАНИ и его структурных аналогов, а также разработку моделей электрохимических актуаторов **присудить** Крылову А.А. ученую степень кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 11 человек (из них 6 докторов наук по специальности 1.4.4 физическая химия (химические науки)), участвовавших в заседании, из 15 человек, входящих в состав совета, проголосовал: «за» – 11, «против» – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель
диссертационного совета

Орлов
Юрий Димитриевич

Учёный секретарь
диссертационного совета

Барабанова
Екатерина Владимировна

15.06.2023 г.