

УТВЕРЖДАЮ

И.о. заместителя декана
Физического факультета СПбГУ
(должность)


(подпись)

А.В. Титов
(инициалы, фамилия)

« 11 » 08 20 24

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»

По итогам рассмотрения и обсуждения
диссертации Костина Михаила Александровича
(ф.и.о. соискателя ученой степени)

представленной на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
Ученая степень

по теме «ЯМР и ИК спектральная диагностика водородных связей с участием
группы P=O»
(тема диссертации)

по научной специальности 1.3.6. Оптика
шифр и наименование научной специальности (научных специальностей)

и выполненной в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет», кафедра оптики, спектроскопии и физики плазмы, год представления 2024,
наименование организации и год представления

а также представленных соискателем научных публикаций, в которых излагаются основные научные результаты диссертации, приняты следующие решения, замечания и рекомендации:

Актуальность исследования по теме диссертации обусловлена высоким интересом к изучению водородных связей из-за возможности их применения на практике для создания новых материалов, разработки лекарственных средств, прогнозирования биологической активности соединений, изучения новых подходов в синтезе органических соединений и т.д. Оценка главных характеристик водородных связей, геометрии и прочности, представляет актуальную задачу, поскольку эти характеристики определяют потенциал применения водородных связей. Цель исследований, представленных в диссертационной работе, состояла в установлении корреляции между ИК и ЯМР спектральными характеристиками фосфиноксидов и прочностью водородной связи в их комплексах с различными донорами протонов с использованием теоретических методов, квантовая химия, и экспериментальных методов, ИК и ЯМР спектроскопии растворов.

Научная новизна работы состоит в том, что автор предлагает использовать спектральные характеристики фосфиноксидов для диагностики прочности водородных связей в комплексах методами ИК и ЯМР спектроскопии. Применение фосфиноксидов в качестве высокочувствительных спектральных зондов для оценки свойств протонодонорных молекул представляет новый этап развития исследований, связанных с спектральной диагностикой водородных связей.

Научная и практическая значимость работы состоит в том, что в качестве главного результата исследований представлен набор корреляций, который предлагается использовать для оценки прочности водородных связей в комплексах фосфиноксидов с различными донорами протонов. Такие корреляции представляют особый интерес в тех случаях, когда прямое измерение прочности водородных связей другими методами затруднено. Представленные корреляции получены для широкого диапазона прочностей водородной связей в комплексах и, предположительно, будут сохраняться для комплексов с другими донорами протонов в схожих условиях.

Обоснованность и достоверность полученных результатов обеспечена использованием современной приборной базы. Детали и условия экспериментов, проведенных с использованием методов ИК и ЯМР спектроскопии, хорошо зарекомендовали себя для исследования прочности, геометрии и спектральных характеристик комплексов с межмолекулярными водородными связями, что подтверждается значительным количеством публикаций. Главные результаты диссертационной работы подтверждаются также дополнительными исследованиями, в которых использовались другие фосфиноксиды или растворитель.

Личное участие автора в получении результатов заключается в самостоятельном изучении необходимой литературы по теме диссертации, выборе объектов исследования, проведении квантово-химических расчетов, участии в приготовлении образцов и регистрации спектров ИК и ЯМР для этих образцов, анализе полученных результатов, подборе корреляций, подготовке научных публикаций. Все основные научные результаты получены автором лично или в результате совместной работы с другими исследователями, что явно указано в соответствующих главах диссертационной работы.

Полнота изложения материалов диссертации в публикациях и апробация работы. По материалам диссертации опубликованы 2 статьи в ведущих международных рецензируемых журналах, входящих в базы данных РИНЦ, Web of Science и Scopus. Из трех положений, выносимых на защиту, два положения нашли отражение в публикациях, одно положение готовится к публикации. Результаты работы были доложены на четырех всероссийских и международных конференциях.

Диссертационное исследование Костина Михаила Александровича «ЯМР и ИК спектральная диагностика водородных связей с участием группы P=O» соответствует паспорту по научной специальности 1.3.6. Оптика и рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Нарушения со стороны Костина Михаила Александровича

ФИО соискателя

п. 11 Приказа СПбГУ от «19» ноября 2021 г. №11181/1

не выявлены

и Приказа СПбГУ от 03.07.2023 № 9287/1

не выявлены.

не выявлены, выявлены

Все основные выносимые на защиту научные материалы диссертации опубликованы в предложенных соискателем статьях.

Коллектив сотрудников Кафедры оптики, спектроскопии и физики плазмы Физического факультета СПбГУ рекомендует

наименование подразделения

диссертацию Костина Михаила Александровича

ф.и.о. соискателя

по теме «ЯМР и ИК спектральная диагностика водородных связей с участием группы P=O»

тема диссертации

к защите на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

ученая степень

по научной специальности 1.3.6. Оптика

шифр и наименование научной специальности (научных специальностей)

При проведении голосования коллектива сотрудников подразделения (протокол заседания № 44/12/9-02-3 от 07.06.2024) в количестве 15 человек, участвовавших в заседании из 24 человек штатного состава:

Проголосовали «за»: 14,

«против»: 0,

«воздержались»: 0.

Профессор, заведующий кафедрой
оптики, спектроскопии и физики

плазмы

(должность)

Физический факультет СПбГУ

(наименование структурного подразделения)

доктор физ.-мат. наук

(ученая степень)

(ученое звание)



(подпись)

/Н.А. Тимофеев/07.06.2024

Расшифровка подписи, дата

