



Prof. Pavel V. Avramov
Department of Chemistry,
College of Natural Science,
Kyungpook National University,
80 Daehak-ro, Buk-gu, Daegu, 41566, Republic of Korea
TEL: 82(53)950- 6342
e-mail: paul.veniaminovich@knu.ac.kr

05 мая 2022 г.

ОТЗЫВ НАУЧНОГО КОНСУЛЬТАНТА

на диссертационную работу Томилина Феликса Николаевича «Влияние структуры на фотофизические и магнитные свойства функциональных материалов», представленную на соискание учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 Физика конденсированного состояния и 1.3.12. Физика магнитных явлений

Диссертационная работа Ф.Н. Томилина посвящена исследованию влияния атомной структуры на физические и химические свойства перспективных материалов в области фотоники, спинтроники, нанотехнологий, биоинженерии и медицинских приложений. В частности, в качестве объектов исследований были выбраны широкие классы объектов, в частности – флуоресцеиновые красители, ионные формы эозина и эритрозина, цепи молекул сополифлуорена, фуллерены C_{60} и C_{82} и их производные – фуллеренолы, эндоэдральные комплексы фуллеренов, фумеролов, различные феромоны чешуекрылых и жёсткокрылых насекомых, Ca^{2+} -регулируемый фотопроtein обелин и его комплекс с молекулой целентерамида, аптамер RE-31, арабиногалактан, а так-же ряд МАХ- и слоистых наноматериалов на основе графена и $g-C_3N_4$.

В ходе работы был получен ряд оригинальных и важных результатов в области физики конденсированного состояния и магнитных явлений, имеющих большую теоретическую и практическую значимость, в частности было показано, что во время синтеза фуллеренола происходит нарушение целостности углеродного каркаса фуллерена C_{82} с образованием различных функциональных групп на поверхности: карбокси-, гидрокси- и кислородных мостиков. ИК-спектры синтезируемых фумеролов в области 1700 см^{-1} формируются колебаниями $-COOH$ и $C=O$ групп для возможных валентных изомеров с общей формулой $Gd@C_{82}O_xH_y$. Исследование реакционных свойств показало, что эндоэдральные комплексы фуллерена C_{82} с общей формулой $Gd@C_{82}O_x(OH)_y$ с $x=0$ и 3 и $y=24$, обладают хорошими антиоксидантными свойствами за счёт высокого сродства к электрону, что важно для биомедицинских применений. Была получена линейная регрессия для энергий переходов по D, MI, MII, Q, Z и C-формам ионных форм флуоресцеина, эозина и эритрозина на основе расчетов оптических спектров поглощения и эмиссии. Было показано, что доминирующей флуоресцентной формой в широком интервале pH остаётся дианионная форма с испусканием в области 513 нм. Было показано, что наличие различных алкильных

заместителей в структуре сополифлуоренов не влияет на электронное строение и оптические спектры поглощения. Наименьшее значение энергетической щели достигается при присоединении флуорена к карбазолу в положении 2,7. Было показано, что для феромонов, не содержащих кратные связи, максимум поглощения лежит в диапазоне 136-144 нм, для непредельных углеводов и непредельных кислородсодержащих феромонов – в диапазоне 157-204 нм, для кислородсодержащих феромонов с сопряжёнными двойными связями – в диапазоне 226-230 нм. Теоретическое исследование реакций феромонов в возбуждённом состоянии с водой и кислородом показало, что барьер реакции либо отсутствует, либо снижается в несколько раз. Показано, что экспериментально наблюдаемая длина волны излучения 500 нм фотопротеина обелина соответствует «комплексу с переносом протона» между кислородом целентерамида и гистидином His22. Фотовозбуждение в верхние электронно-возбуждённые состояния на 260–300 нм также вызывает флуоресценцию в ближней УФ-области. На основе моделирования конъюгатов аптамера и арабиногалактана с магнитными наночастицами была выявлена природа взаимодействия между аптамерами и природными полисахаридами. Продemonстрировано закономерное изменение спиновых моментов в системах $(\text{Cr}_{4-x}\text{Fe}_x)_{0,5}\text{SiC}$ – Fe_2SiC в диапазоне $S=6,5\div 9$. В гетероструктурах типа Металл/биграфен и Металл/ $\text{g-C}_x\text{N}_x$ были определены высоко- и низкоспиновые состояния в зависимости от величины пор в плоском материале. Было показано, что низкоспиновое состояние (3,10, 2,00, 4,96 и 3,74 μB) является энергетически выгодным для Me/g-CN_1 а высокоспиновое состояние (4,58, 3,33, 4,80, 3,71 μB) благоприятно для гибридных структур Me/g-CN_2 соответственно.

На основе теоретических результатов, полученных в работе, был разработан новый метод для определения атомной структуры наноразмерных некристаллических объектов по данным малоуглового рассеяния синхротронного излучения и теоретического моделирования. На примере аптамера RE-31 была произведена апробация метода и получена структура молекулы в согласии с экспериментальными данными.

Результаты проведённых теоретических расчётов находятся в согласии с имеющимися экспериментальными данными, что подтверждает адекватность применяемых методов и подходов. Основные положения и выводы диссертационного исследования в полной мере изложены в 31 научных статьях в изданиях из Перечня ВАК, которые проиндексированы в наукометрических системах Web of Science и Scopus, а также в двух монографиях, одной главе в монографии и 41 тезисов докладов.

Представленные в диссертационной работе результаты по моделированию структур и расчёту свойств были получены Ф.Н. Томилиным лично. В своей научно-исследовательской работе он проявил себя целеустремленным и грамотным специалистом, способным к самостоятельной постановке и решению задач, освоению новых теоретических методов, обработке и глубокому анализу результатов.

На основании вышесказанного считаю, что работа «Влияние структуры на фотофизические и магнитные свойства функциональных материалов» полностью

соответствует требованиям ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а её автор Ф.Н. Томилин заслуживает присуждения учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния и 1.3.12. – Физика магнитных явлений.

Научный консультант:

профессор Факультета химии

Колледж естественных наук,

Национальный Университет Кьёнпук (г. Тэгу, Республика Корея)

доктор физико-математических наук

Аврамов Павел Вениаминович

05 мая 2022 г.

(подпись)

Подпись профессора П.В. Аврамова удостоверяю:

Профессор Cheol Ho Choi,

Руководитель лаборатории Квантовой химии,

Факультет химии, Колледж естественных наук,

Национальный Университет Кьёнпук (г. Тэгу, Республика Корея)

Cheol Ho Choi

05 мая 2022 г.

(подпись)