

Заключение диссертационного совета МГУ.02.02
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

Решение диссертационного совета от «15» ноября 2018 г. № 17

О присуждении Медведеву Михаилу Геннадьевичу, гражданину РФ, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Достоверность результатов квантовохимических расчётов методами теории функционала плотности» по специальности 02.00.04 – физическая химия принята к защите диссертационным советом 5 октября 2018, протокол № 16.

Соискатель Медведев Михаил Геннадьевич 1995 года рождения, в 2016 году окончил Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», с 2016 по настоящее время проходит обучение в очной аспирантуре Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук».

Соискатель работает инженером-исследователем в лаборатории рентгеноструктурных исследований ФГБУН «Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН».

Диссертация выполнена в лаборатории рентгеноструктурных исследований ФГБУН «Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН».

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор РАН Лысенко Константин Александрович, работает главным научным сотрудником лаборатории рентгеноструктурных исследований ФГБУН «Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН».

Официальные оппоненты:

Оганов Артём Ромаевич, доктор физико-математических наук, профессор, АНОО ВО «Сколковский Институт Науки и Технологий» (Сколтех), лаборатория дизайна материалов, заведующий лабораторией;

Тарасов Юрий Игоревич, доктор физико-математических наук, ФГБОУ ВО «Российский технологический университет МИРЭА», Институт тонких химических технологий, кафедра физики и технической механики, заведующий кафедрой;

Нечаев Михаил Сергеевич, доктор химических наук, ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», химический факультет, кафедра органической химии, ведущий научный сотрудник дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 31 опубликованную работу, в том числе по теме диссертации 9 работ, из них 6 статей, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 02.00.04 – физическая химия:

1. Medvedev M.G., Bushmarinov I.S., Lyssenko K.A. Z-effect reversal in carboxylic acid associates // Chemical Communications. – 2016. – Vol. 52, № 39. – P. 6593–6596. – IF: 6.3
2. Medvedev M.G., Bushmarinov I.S., Sun J., Perdew J.P., Lyssenko K.A. Density functional theory is straying from the path toward the exact functional // Science. – 2017. – Vol. 355, № 6320. – P. 49–52. – IF: 37.2
Medvedev M.G., Bushmarinov I.S., Sun J., Perdew J.P., Lyssenko K.A. Response to Comment on “Density functional theory is straying from the path toward the exact functional” // Science. – 2017. – Vol. 356, № 6337. – P. 496–496. – IF: 37.2
3. Medvedev M.G., Zeifman A.A., Novikov F.N., Bushmarinov I.S., Stroganov O.V., Titov I.Y., Chilov G.G., Svitanko I.V. Quantifying Possible Routes for SpnF-Catalyzed Formal Diels–Alder Cycloaddition // Journal of the American Chemical Society. – 2017. – Vol. 139, № 11. – P. 3942–3945. – IF: 14.4
4. Medvedev M.G., Novikov F.N., Bushmarinov I.S., Zeifman A.A., Polkovnichenko M.S., Stroganov O.V., Chilov G.G., Lyssenko K.A., Svitanko I.V. Charge redistribution in the SpnF-catalyzed Diels–Alder reaction // Mendelev Communications. – 2017. – Vol. 27, № 5. – P. 500–502. – IF: 2.1
5. Cruchter T., Medvedev M.G., Shen X., Mietke T., Harms K., Marsch M., Meggers E. Asymmetric Nucleophilic Catalysis with an Octahedral Chiral-at-Metal Iridium(III) Complex // ACS Catalysis. – 2017. – Vol. 7, № 8. – P. 5151–5162. – IF: 11.4
6. Marjewski A.A., Medvedev M.G., Gerasimov I.S., Panova M.V., Perdew J.P., Lyssenko K.A., Dmitrienko A.O. Interplay between test sets and statistical procedures in ranking DFT methods: The case of electron density studies //

На диссертацию и автореферат поступило 3 дополнительных отзыва, все отзывы положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их компетентностью в области физической химии и наличием публикаций по результатам изучения электронной структуры химических соединений и моделированию химических реакций.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований решена задача оценки надежности методов теории функционала плотности, а также показана важность учета конформационной подвижности переходных состояний химических реакций. Полученные результаты могут быть использованы для повышения надежности проводимых квантовохимических расчетов методами теории функционала плотности. Результаты моделирования катализируемой ферментом SpnF реакции с явным учётом растворителя и учётом конформационной подвижности субстрата необходимы для создания искусственных [4+2]-циклаз.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора:

1. Способность к воспроизведению термохимических характеристик веществ и реакций методом теории функционала плотности не обязательно является признаком его близости к точному функционалу, а может быть следствием его переобученности.
2. Функционалы PBE0, B3PW91, B98, TPSS, SCAN и OLYP не являются существенно переобученными. При этом большинство из Миннесотовских функционалов являются существенно переобученными.
3. Анализ графа связности в рамках теории «Атомы-в-Молекулах» переходных состояний может быть использован для разделения переходных состояний, соответствующих бис-перициклическому механизму и механизму Дильса-Альдера.

4. Катализируемая ферментом SpnF реакция в отсутствии фермента на ~85% протекает по бис-перициклическому механизму.
5. Статистический анализ влияния некомпенсированных ошибок квантовохимического моделирования на рассчитываемую величину позволяет определять вероятность получения в результате расчёта ошибочных значений и выявлять возможность экспериментальных ошибок при рассогласовании теории и эксперимента.

На заседании 15 ноября 2018 г. диссертационный совет принял решение присудить Медведеву Михаилу Геннадьевичу ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 4 доктора наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, участвовавших в заседании, из 19 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за - 15, против - 0, недействительных бюллетеней - 1.

15.11.2018г.

Председатель диссертационного совета,
д.х.н., профессор

Немухин А.В.

Ученый секретарь диссертационного совета,
к.х.н.

Матушкина Н.Н.