

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.114.01 НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УЧРЕЖДЕНИЯ «ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КРИСТАЛЛОГРАФИЯ И ФОТОНИКА»
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК» ПО ДИССЕРТАЦИИ ТАЛИСА АЛЕКСАНДРА
ЛЕОНИДОВИЧА НА СОИСКАНИЕ УЧЁНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА ФИЗИКО-
МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 23 марта 2021 г., протокол № 2

О присуждении **Талису Александру Леонидовичу**, гражданину Российской Федерации, учёной степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Структурные представления некристаллографических симметричных конструкций в металлах, тетракоординированных соединениях и спиральных биополимерах» по специальности 01.04.18 – «кристаллография, физика кристаллов» принята к защите 17.12.2020 г., протокол № 20, Диссертационным советом Д 002.114.01 на базе Федерального государственного учреждения «Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук» (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН), Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Минобрнауки России), 119333, г. Москва, Ленинский проспект, дом 59. Диссертационный совет Д 002.114.01 создан приказом Федеральной службы по надзору в сфере образования и науки № 105/нк от 11.04.2012 г.

Соискатель Талис Александр Леонидович, 1957 г.р., в 1989 г. защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук «К теории цветной (сверхфедоровской) симметрии пространственно – модулированных молекулярных кристаллов» по специальности 01.04.18 – «кристаллография, физика кристаллов» в диссертационном совете при Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова. В настоящее время работает в лаборатории физической химии полимеров Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова Российской академии наук (ИНЭОС РАН) в должности ведущего научного сотрудника.

Диссертационная работа выполнена в лаборатории физической химии полимеров Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова Российской академии наук (ИНЭОС РАН), Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Официальные оппоненты:

Дмитриенко Владимир Евгеньевич, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник отдела теоретических исследований Института кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН;

Долбилин Николай Петрович, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки Математического института им. В.А. Стеклова Российской академии наук;

Белоконева Елена Леонидовна, доктор химических наук, профессор, профессор кафедры кристаллографии и кристаллохимии геологического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»;

— дали **положительные отзывы** на диссертацию.

Ведущая организация **Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского» (г. Нижний Новгород)** в своём положительном заключении, подписанном Е.В. Чупруновым, д.ф.-м.н., профессором, заведующим кафедрой кристаллографии и экспериментальной физики физического факультета, М.О. Марычевым, к.ф.-м.н., доцентом кафедры кристаллографии и экспериментальной физики физического факультета, и утверждённом проректором по научной работе ННГУ – д.ф.-м.н. М.В. Иванченко, указала, что диссертационная работа «Структурные представления некристаллографических симметричных конструкций в металлах, тетракоординированных соединениях и спиральных биополимерах» является законченным исследованием, вносящим весомый вклад в симметричные основы кристаллографии. В работе рассматривается построение симметричных основ обобщенной кристаллографии тетраэдрических и тетракоординированных структур (плотноупакованных металлов, упорядоченных алмазоподобных структур, газогидратов и спиральных биополимеров). Показано, что конфигурации конечной проективной геометрии (включающие не более 10 точек), 4-мерный политоп $\{3,3,5\}$ и 8-мерная решетка векторов E_8 , в итоге, определяют кластеры, из которых собираются все эти структуры. Актуальность темы определяется тем, что отображение симметрии упорядоченных (не только кристаллических) тетраэдрических и тетракоординированных структур способствует адекватной интерпретации структурно-обусловленных экспериментальных данных и позволяет *априори* определять фазовые переходы, симметрично – возможные для данной

структуры. Применение развиваемого соискателем подхода наиболее актуально для выявления закономерностей строения ряда спиральных биополимеров. Полученные результаты отличаются научной новизной и практической ценностью, достоверностью и обоснованностью. Работа Талиса А.Л. прошла многократную апробацию: 7 глав в монографиях, 56 статей в журналах из перечня ВАК РФ; 30 статей в сборниках, 12 кратких сообщений и 47 докладов на российских и международных научных конференциях. Диссертационная работа представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, соответствующую всем критериям и требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям, установленным согласно разделу II «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор, Талис Александр Леонидович, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.18 – кристаллография, физика кристаллов.

Основные результаты по теме диссертации отражены в 7 главах в монографиях, 56 статьях в отечественных и международных журналах, входящих в утвержденный ВАК перечень ведущих рецензируемых научных изданий, 30 статьях в сборниках, 12 кратких сообщениях и тезисах к 47 докладам на российских и международных научных конференциях. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. **Талис А. Л.** Обобщенная кристаллография алмазоподобных структур. I. Конечные проективные плоскости и определяемые ими особые кластеры алмазоподобных структур // Кристаллография. 2002. Т. 47. №. 4. С.583–593.

2. **Талис А. Л.** Симметрия тетракоординированных и тетраэдрических структур в рамках алгебраической геометрии // В кн.: А.В. Шубников, В.А. Копчик. Симметрия в науке и искусстве. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований. 2004. С.419-488.

3. Samoylovich M. I., **Talis A. L.** Symmetry of helicoidal biopolymers in the frameworks of algebraic geometry: α -helix and DNA structures // Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances. 2014. V. 70, Part 2. P. 186-198.

4. **Talis A. L.**, Kraposhin V. S., Kondrat'ev S. Y., Nikolaichik V. I., Svyatysheva E. V., Everstov A. A. Non-crystallographic symmetry of liquid metal, flat crystallographic faults and polymorph transformation of the M_7C_3 carbide // Acta Crystallographica Section A: Foundations

and Advances. 2017. V. 73, Part 3. P. 209–217.

5. **Талис А. Л., Рабинович А. Л.** Симметрия структур, аппроксимируемых цепями правильных тетраэдров // Кристаллография. 2019. Т.64. № 3. С.341-350.

На диссертацию и автореферат поступило 16 **положительных отзывов**.

В.Е. Антонов, д.ф.-м.н., главный научный сотрудник лаборатории физики высоких давлений Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики твердого тела Российской академии наук, прислал отзыв **без замечаний**.

А.И. Зайцев, д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры общей химии Химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», прислал отзыв **без замечаний**.

И.В. Яминский, д.ф.-м.н., профессор, профессор лаборатории сканирующей зондовой микроскопии Физического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», прислал отзыв **без замечаний**.

В.Я. Гринберг, д.х.н., ведущий научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, прислал отзыв **без замечаний**.

А.М. Банару, к.х.н., старший преподаватель кафедры физической химии Химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», прислал отзыв **без замечаний**.

И.Л. Яковлева, д.т.н., главный научный сотрудник лаборатории физического металловедения Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, прислала отзыв **без замечаний**.

А.С. Лилеев, д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры физического материаловедения Института новых материалов и нанотехнологий Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», прислал отзыв **без замечаний**.

А.И. Рудской, д.т.н., профессор, академик РАН, ректор Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого», и **С.Ю.**

Кондратьев, д.т.н., профессор, профессор Высшей школы физики и технологий материалов Института машиностроения, материалов и транспорта Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого», прислали отзыв **без замечаний.**

Л.И. Квеглис, д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры материаловедения и технологий обработки материалов Политехнического института Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Сибирский федеральный университет», прислала отзыв **без замечаний.**

А.В. Шутов, к.ф.-м.н., доцент кафедры вычислительная техника и системы управления Института информационных технологий и радиоэлектроники Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых» прислал отзыв **без замечаний.**

Ю.В. Панфилов, д.т.н., профессор, заведующий кафедрой «Электронные технологии в машиностроении» факультета «Машиностроительные технологии» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)», отметил в качестве замечания отсутствие в автореферате описания структуры тетрагонального аморфного углерода $ta-C$, обладающего наиболее близкими к алмазу свойствами.

М.Ю. Семенов, д.т.н., профессор кафедры материаловедения факультета «Машиностроительные технологии» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)», отметил в качестве замечания, что в автореферате не представлены межзеренные границы и пленки в качестве линейных объединений порождающих кластеров и отсутствует описание их симметрии.

Н.Н. Еремин, д.х.н., член-корреспондент РАН, заведующий кафедрой кристаллографии и кристаллохимии Геологического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», отметил в качестве замечаний следующие:

- 1) Замечание по оформлению. В печатной версии автореферата две 15-е, две 16-е,

две 37-е и две 38-ые страницы. На одной из версий 16-ой страницы отсутствуют рисунки 3в-г-д. Это несколько затрудняет ознакомление с текстом работы. Допустим, что один четырех страничный лист при печати оказался с браком. В этом случае, очевидно, стоило бы просто заменить бракованный лист на правильный, содержащий полную версию рисунка, а не брошюровать обе версии.

2) Автор утверждает (стр.23, подпись к рис.9), что “ионы марганца” находятся в разных зарядовых состояниях. Этого не может быть по определению в простом веществе β -Mn!!! Как хорошо известно, в простом веществе заряды атомов равны между собой и являются нулевыми! Таким образом, термин ионы в этом случае абсолютно не корректен, равно как и утверждение о разных зарядах атомов марганца, находящихся в различных кристаллографических позициях. Немногочисленные публикации о возможности существования разнозаряженных состояний одного элемента в простом веществе (например, γ -В, <https://www.nature.com/articles/nature07736>) являются дискуссионными; большинством исследователей эта точка зрения не разделяется. В этой связи, автору работы стоило бы либо аргументированно обосновать этот тезис, либо использовать другую терминологию.

3) Определенные вопросы вызывает модель фазового превращения газогидрат I-III лед (“обычный гексагональный” в, вероятно, не совсем удачной авторской номенклатуре). С точки зрения рецензента, оперируя только трансформацией топологических конструкций без привлечения системы размерных характеристик атомов (ионов) невозможно получить корректные модели образования, разложения и диффузии конкретной химической постройки. Более того, используя различные многочисленные системы радиусов атомов и ионов в кристаллах (атомные, ионные, в-д-в, кристаллические, промолекулярные и т.д.) можно получить различные (иногда существенно различные) результаты.

Е.В. Шалаева, д.х.н., старший научный сотрудник, ведущий научный сотрудник лаборатории квантовой химии и спектроскопии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук, отметила в качестве вопросов и замечаний:

1. Автор подчеркивает, что рассматривает генерирование и симметричные свойства только структур, которые могут быть аппроксимированы цепями правильных тетраэдров, соединенных по граням, и использует для этого n-мерные политопы, которые допускают разбиение пространства на тетраэдры. А есть ли n-мерные конструкции и какие, которые позволят снять эти ограничения, и сгенерировать другие типы трехмерных структур?

2. При изложении результатов главы 3, к сожалению, не приведены примеры конкретных фазовых превращений в плотноупакованных тетраэдрических интерметаллидных фазах, которые были смоделированы с использованием ПКТ кластеров и их спиральных объединений.

3. В главе 5 излагаются результаты по генерированию алмазоподобных структур, в том числе кристаллических с линейными дефектами. Приведен пример модели краевой дислокации в алмазной решетке. Из текста не совсем ясно, можно ли сгенерировать, используя предлагаемый автором подход, все системы скольжения, наблюдаемые экспериментально для решетки алмаза?

А.В. Андреева, д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник лаборатории теоретической физики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов Российской академии наук, отметила следующие замечания: В работе отсутствуют выводы по экстремумам энергии, определяемым симметрией. Как симметрия «идеальных прототипов» отражается на энергетической устойчивости структур с некристаллографической симметрией в Е3 пространстве, и каковы оценки пределов идеальности. Поскольку симметрия дает возможность выбора, то было бы интересно сравнить топологическую устойчивость (например, по минимальным поверхностям) исследуемых структурных конфигураций.

Ю.Л. Войтеховский, д.г.-м.н. профессор, профессор кафедры минералогии, кристаллографии и петрографии Геологоразведочного факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский горный университет», указал еще две области возможного применения теории и задал два вопроса:

1. По-видимому, формирование кристаллического зародыша до момента, когда его рост подчинится локальной теореме, можно представить как последовательное добавление атомарных тетраэдров. Если в этом процессе есть закономерность, не работает ли здесь система порождающих кластеров (табл. 2, с.21)?

2. Минералогия и петрография нуждаются в фундаментальной теории, охватившей бы все разнообразие структур сложных минеральных агрегатов и кристаллических горных пород. Подобно металлам и сплавам, в них минеральные индивиды срastaются по 4 в точке, причем большей частью вне законов кристаллографии. Дуальным переходом они превращаются в разбиение Е на тетраэдры с раскрашенными вершинами, имея в виду

полимерный состав агрегатов и горных пород. Не представляется ли поиск минимальной системы прототипов и структурных единиц (типа тетраблока) разумной стратегией решения указанной проблемы?

3. Досадным представляется лишь отсутствие рис.9 (а-в), несколько затрудняющее понимание структуры кубического кристалла β -Mn.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что оппоненты являются ведущими специалистами в области структурной и математической кристаллографии и кристаллохимии, а ведущая организации является лидером в области изучения симметрии и псевдосимметрии кристаллов.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований отобрана совокупность некристаллографических конструкций (конечных проективных геометрий, n -мерных, $3 < n \leq 8$ многогранников и решеток, конструкций комбинаторного дизайна), потенциально способных отобразить некристаллографические симметрии тетраэдрических и тетракоординированных структур. **Установлена** 7-вершинная структурная единица (тетраблок), универсальная для сборки упорядоченных тетраэдрических и тетракоординированных структур, допускающих аппроксимацию цепями правильных тетраэдров, и **дано** теоретико-групповое описание симметрии тетраблока. **Сформулированы** симметричные основы обобщенной кристаллографии тетраэдрических и тетракоординированных структур: конфигурации конечной проективной геометрии, включающие не более 10 точек, определяют порождающие кластеры, из которых собираются все эти структуры. **Построена** система триангулированных, m -вершинных, $4 \leq m \leq 10$, порождающих кластеров тетраэдрических структур, из которых собираются плотноупакованные тетраэдрические (металлические) структуры. Фазовые переходы между такими структурами **предложено** определять взаимными трансформациями порождающих кластеров - перебросками диагоналей в ромбах из двух соседних треугольных граней. **Построена** система порождающих кластеров тетракоординированных (алмазоподобных и углеводородно-подобных) структур. Априори **определены** линейные объединения порождающих кластеров, реализующихся в: металлах и сплавах, алмазоподобных структурах. **Разработан** аппарат для отображения некристаллографической симметрии алмазоподобных структур (дислокаций, межзеренных границ, алмазоподобных пленок), допускающих разбиения на линейные объединения порождающих кластеров. Априори **определены** симметрично-возможные трансформации полиэдров-полостей тетракоординированных структур газогидратов. **Показано**, что

объединение тетраблоков одинаковой хиральности, однотипно объединяемых по торцевым граням, приводит к трем типам высокосимметричных спиралей, соответствующих экспериментально наблюдаемым спиральным структурам. **Обнаружено**, что параметры одной из тетраблоковых спиралей (отношение шага к радиусу, шаговый угол и т.п.) с точностью до нескольких процентов отвечают параметрам полипептидной цепи белков (α -спирали). **Установлено**, что развиваемый подход может быть основой для выделения класса линейных (био)полимеров, аппроксиманты которых вкладываются в 4-мерные (плотнупакованные или алмазоподобные) многогранники или в 8-мерную решетку E_8 .

Значение полученных соискателем результатов исследований для практики подтверждается тем, что применение развитого в работе подхода для исследуемой тетраэдрической или тетракоординированной структуры, позволяет определить идеальную (математическую) структуру – прототип. Выявленный прототип способствует адекватной интерпретации структурно-обусловленных экспериментальных данных и позволяет априори определять фазовые переходы, симметрично – возможные для данной структуры. В частности, определение соискателем прототипа α -спирали, в итоге, может привести к прорыву в биологии и выходу медицины на более высокий уровень.

Оценка достоверности результатов исследования выявила: достоверность результатов, полученных соискателем, обеспечивается фундаментальностью использованных в работе математических конструкций (комбинаторной и алгебраической геометрии) и надежностью использованных им общепризнанных экспериментальных и расчетных данных для рассматриваемых тетраэдрических и тетракоординированных структур. Достоверность полученных результатов также подтверждается совпадением (с точностью до нескольких процентов) априори полученных соискателем результатов с общепризнанными литературными данными для таких структур. По материалам диссертации опубликовано 7 глав в монографиях, **56 статей** в рецензируемых российских и международных научных журналах; **30 статей** в сборниках, **12 кратких сообщений** в журналах, а также представлено свыше **40 докладов** на национальных и международных конференциях.

Личный вклад соискателя состоит в постановке цели и задач исследования, выборе подходов к их решению, интерпретации и обсуждении полученных результатов, подведении итогов отдельных этапов работы, обобщении полученных результатов и формулировке выводов, определении направлений дальнейших исследований, что отражено в представленных в диссертации публикациях автора.

Диссертация решает основной вопрос поставленной научной проблемы - построения симметричных основ обобщенной кристаллографии тетраэдрических и тетракоординированных структур, и соответствует критерию внутреннего единства. Объединяющим фактором и единым базисом являются исследования методом построения структурных реализаций конструкций алгебраической геометрии, представляющие интерес как с точки зрения физики конденсированных сред и биополимеров, так и практических применений в материаловедении, для целенаправленного поиска новых материалов с необычными свойствами.

Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, полностью соответствующую критериям, установленным Положением о присуждении учёных степеней, утверждённым постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842.

На заседании 23 марта 2021 года диссертационный совет принял решение присудить Талису Александру Леонидовичу учёную степень доктора физико-математических наук по специальности 01.04.18 – «кристаллография, физика кристаллов».

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 5 докторов наук по специальности 01.04.18 – «кристаллография, физика кристаллов», участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 17, против – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Председатель диссертационного совета,
член-корреспондент РАН

М.В. Ковальчук

Учёный секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук

К.В. Фролов

« 23 » марта 2021 г.

Учёный секретарь ФНИЦ
«Кристаллография и фотоника» РАН
к.ф.-м.н.



Л.А. Дадинова