

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Корабельникова Дмитрия Васильевича **«Исследование структуры, межатомных взаимодействий и физико-химических свойств оксианионных кристаллов методом компьютерного моделирования»**, представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Диссертационная работа Корабельникова Дмитрия Васильевича посвящена квантово-химическим расчетам атомной и электронной структуры, упругих, колебательных и термодинамических характеристик большого ряда оксианионных соединений, которые благодаря уникальным свойствам, широко используются в различных промышленных отраслях. Свойства этих соединений существенно зависят от типа и концентрации составляющих элементов, а также от наличия воды и органических лигандов. Однако, микроскопический механизм влияния этих факторов не был установлен для многих соединений этого ряда. Этой задаче, а именно, установлению взаимосвязи состава, кристаллической структуры, электронного строения, упругих, колебательных и тепловых свойств этих кристаллических соединений посвящена эта диссертационная работа.

Актуальность исследования обусловлена тем, что установление таких закономерностей является одной из важных задач физической химии и материаловедения, позволяющей проводить поиск новых материалов с уникальными свойствами.

Достоверность результатов работы гарантируется физической ясностью обоснования задач и адекватностью используемых подходов и методов, внутренней непротиворечивостью и доказательностью обсуждения результатов, воспроизводимостью полученных данных и их согласием с известными из литературных источников экспериментальными данными и представлениями.

Научная значимость докторской диссертационной работы Д.В. Корабельникова в области физической химии, прежде всего, связана с развитием и углублением систематических фундаментальных знаний о свойствах оксианионных кристаллических соединений и их взаимосвязи с атомной и электронной структурой.

Практическая значимость исследований, выполненных в диссертационной работе, обусловлена тем, что полученные результаты объясняют микроскопический механизм структуры и свойств рассматриваемых соединений при различных внешних условиях (температура, деформация), что необходимо для разработки новых материалов.

Основными важными и новыми научными результатами, и выводами данной работы, которые вносят существенный вклад в развитие фундаментальных и прикладных представлений об электронных и динамических свойствах оксианионных кристаллов, являются следующие:

1. Установлены закономерности изменения электронных, упругих, колебательных и тепловых свойств в зависимости от типа (размера и

электроотрицательности) катиона и наличия воды, размерности и внешнего давления.

2. На основе полученных данных предсказаны направления и способы поиска соединений с заданными свойствами. Показано, как в исследуемом классе соединений можно регулировать величину запрещенной щели, сжимаемость, теплоемкость и теплопроводность.

3. Развита методические подходы к установлению взаимосвязи структура – свойство. Предложен подход, совмещающий *ab initio* и полуэмпирические методы для описания уравнения состояния и влияния давления на структуру с учетом температуры.

По содержанию автореферата имеются некоторые замечания:

1. Моделирование соединений с водородными связями представляет большую сложность для стандартных *ab initio* методов. В частности, для моделирования колебательных спектров желательно использовать методы типа V3LYP, MP2. Из текста автореферата непонятно каким методом и с использованием каких функционалов проводились расчеты.

2. При расчете двумерных оксианионных кристаллов каким образом выбиралась плоскость и верхний поверхностный слой? Проводилось ли сравнение стабильности различных плоскостей?

3. Стр. 14, 22, 26, 27, 29. При сравнении с экспериментальными данными необходимо привести ссылки.

Отмеченные вопросы и замечания не носят принципиального характера и не снижают значения ценности и высокой положительной оценки диссертационной работы, квалификации, роли и вклада ее автора.


Диссертационная работа Д.В. Корабельникова выполнена на высоком современном научном уровне, является законченным и самостоятельным исследованием, в котором с использованием теоретических методов решена важная и актуальная научная задача установления основных закономерностей и механизмов влияния состава и структуры на свойства оксианионных кристаллов. Диссертация представляет собой законченную научно-исследовательскую работу на актуальную тему, содержит новые оригинальные результаты, имеющие высокую теоретическую и практическую значимость.

Основное содержание диссертационной работы представлено в 24 научных статьях в ведущих рецензируемых журналах по перечню ВАК и ряде международных и российских конференций. Тема и содержание работы соответствуют паспорту специальности 1.4.4 – физическая химия. Достоверность и новизна полученных результатов хорошо обоснованы, личный вклад автора ясно определен.

Считаю, что диссертационная работа «Исследование структуры, межатомных взаимодействий и физико-химических свойств оксианионных кристаллов методом компьютерного моделирования» соответствует требованиям п.п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней» утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (в действующей редакции), предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени доктора наук, а ее автор, Корабельников Дмитрий Васильевич, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Согласна на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.

Доктор физико-математических наук (02.00.21 - химия твердого тела),
главный научный сотрудник
лаборатории квантовой химии и спектроскопии
имени профессора А.Л. Ивановского
Федерального государственного бюджетного
учреждения науки «Институт химии твердого тела
Уральского отделения Российской академии наук»


Медведева Надежда Ивановна
« 05 » марта 2024 г.

Адрес организации: 620990, Екатеринбург, ГСП, ул.
Первомайская, 91, Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки Институт химии твердого тела УрО РАН,
www.ihim.uran.ru,
E-mail: medvedeva@ihim.uran.ru, тел. +7 (343) 362-3554.

Подпись Медведевой Н.И. заверяю
Ученый секретарь ФГБУН
Институт химии твердого тела УрО РАН
Кандидат химических наук



О.А. Липина
Дата: 06.03.2024 г.