

ОТЗЫВ

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

На современном этапе развития физической химии и материаловедения важную роль играют методы компьютерного квантово-химического моделирования новых веществ. Это позволяет, не проводя дорогостоящих технологических изысканий конструировать новые материалы с наперед заданными свойствами. Наряду с этим большое значение отводится теоретическому изучению уже известных материалов с целью улучшения их свойств, более глубокому пониманию электронной структуры и способов управления физико-химическими свойствами.

Работа Д.В. Корабельникова посвящена теоретическому исследованию класса оксианионных кристаллов, которые широко используются на практике, при этом основное внимание сосредоточено на установлении связи между структурой вещества, электронными свойствами и решеточными эффектами (упругие, колебательные и тепловые свойства). Также рассматриваются вопросы, связанные с поверхностными свойствами и влиянием внешних давлений. Это все определяет **актуальность** настоящих исследований.

Научная новизна обусловлена тем, что автор впервые исследовал зависимость химической связи и фоновых свойств от наличия гидроксильной группы конкретных кристаллов типа $\text{LiNO}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ и $\text{NaClO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$. Для подобных соединений он провел классификацию химических связей и установил критерии ковалентности в зависимости от электроотрицательности атомов, заселенности, длины и энергии связи. Также им установлены закономерности структурных изменений в зависимости от размера катионов вдоль линий связей, а ширины запрещенной зоны от электронной плотности и электроотрицательности. Для оксианионных соединений такие комплексные исследования на основе первопринципных расчетов проведены впервые.

Конечной целью всех исследований является предсказание связи атомной и электронной структуры оксианионнидов с физико-химическими свойствами веществ. Эти исследования могут служить фундаментом для дальнейшего развития представлений о роли химической связи в формировании кристаллической структуры и свойств. Причем все это делается на основе общего подхода, основанного на использовании метода функционала плотности с применением его к системам с обменными корреляциями, и все это направлено на развитие методов расчета. Такой подход обеспечивает **практическую значимость** проведенных исследований.

Достоверность же полученных результатов определяется использованием современного подхода в расчетах, разумно сочетающих аналитические и численные методы. При этом применение общего подхода к различным кристаллическим системам, где полученные результаты сравниваются с ранее полученными и устоявшимися результатами других авторов, определяет **надежность** полученных данных.

Из результатов, полученных автором, следует отметить цикл работ, посвященных установлению влияния кристаллической структуры и химической связи на решеточные свойства кристаллов, включая тепловые и упругие свойства. Также отмечу, не только в силу личных научных интересов, исследования, связанные с поверхностными свойствами и установлению причин, ответственных за формирование их стабильности. Эти результаты представляют дополнительную практическую ценность.

Не менее важными и интересными представляются расчеты энергетической структуры кристаллов и выявление роли электрического состояния катионов на распределение электронной плотности и ширину запрещенной зоны.

В научных кругах Д.В. Корабельников известен как теоретик и исследователь очень высокого уровня. Не понаслышке знаем научные результаты, полученные как Д.В. Корабельниковым, так и его коллегами.

В целом работа Д.В. Корабельникова представляет собой законченное научное исследование. Основные результаты работы, достаточно полно опубликованы в центральных научных журналах и были доложены на международных и всероссийских конференциях. Считаю, что работа соответствует всем требованиям, предъявляемым ВАК Министерства образования и науки РФ к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, установленным пп. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842 (в действующей редакции). Ее автор Дмитрий Васильевич Корабельников, заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4 - «Физическая химия».

доктор физико-математических наук
(01.04.07 – физика конденсированного состояния),
профессор,
заведующий кафедрой общей физики

Патрин Геннадий Семенович

ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет»
Адрес: 660041, Красноярск, проспект Свободный, 79.
Тел.: +7(391) 206-21-13,
E-mail: patrin@iph.krasn.ru

4 марта 2024 года

