

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации 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.

Диссертационная работа Корабельникова Д.В. посвящена системному теоретическому исследованию структуры, межатомных взаимодействий и физико-химических свойств оксианионных кристаллов, имеющих широкое и разнообразное практическое применение. Современные методы квантовой химии и теории твердого тела, а также вычислительные мощности позволяют адекватно проводить моделирование структуры и свойств различных соединений, что относится и к настоящей работе. Макроскопическое поведение материалов, в конечном счете, определяется их микроскопическими характеристиками, такими как кристаллическая структура и межатомные взаимодействия. Таким образом, весьма важной и актуальной представляется задача установления взаимосвязи атомной и электронной структуры с физико-химическими свойствами, что является фундаментальной проблемой физической химии оксианионных кристаллов. Решение этой задачи позволяет установить и объяснить закономерности изменения свойств оксианионных кристаллов в контексте особенностей их структуры и химической связи. Систематические работы, посвященные теоретическому и экспериментальному исследованию структуры, межатомных взаимодействий и физико-химических свойств оксианионных кристаллов, практически не встречаются и носят разрозненный характер. Имеющиеся результаты компьютерного моделирования для оксианионных кристаллов имеют фрагментарный характер и их систематический анализ не проводился. Отсутствует системное исследование изменений атомной структуры, электронной плотности, межатомных взаимодействий и свойств оксианионных кристаллов в зависимости от их размерности, типа и химического состава катиона и аниона, наличия молекул воды и лигандов, а также внешнего давления. Таким образом, не вызывает сомнений **актуальность и новизна** диссертационной работы Корабельникова Д.В.

Корабельниковым Д.В. установлены взаимосвязи микроскопических характеристик и широкого набора макроскопических свойств (электронных, упругих, колебательных, тепловых) различных типов кристаллических соединений с молекулярными оксианионами, что позволило автору провести интерпретацию природы этих свойств на микроскопическом (атомном и субатомном) уровне, выявить закономерности их изменения в изоанионных и изокатионных рядах, а также выработать стратегию управления свойствами.

Научная ценность диссертационной работы Корабельникова Д.В. заключается в том, что автором развит микроскопический подход к исследованию свойств кристаллов и закономерностей для них на основе

комбинации расчетных методов теории функционала плотности и кристаллохимических представлений. Работа вносит вклад в развитие углубленных систематических знаний в области физической химии оксианионных кристаллов. Результаты исследования расширяют существующие представления о роли атомной структуры, электронной плотности и межатомных взаимодействий в формировании различных свойств кристаллов с молекулярными оксианионами. Предложенный подход для полуэмпирического расчета уравнения состояния и влияния давления на структуру при заданных температурах позволяет изучить свойства при заданных внешних условиях на основе корреляций «структура-свойство».

Практическая значимость работы состоит в том, что на основе расчетов предсказаны практически важные свойства (электронные, упругие, колебательные, тепловые) оксианионных кристаллов. Установленные закономерности изменения свойств оксианионных кристаллов позволяют выделить круг потенциальных объектов, для которых можно ожидать те или иные интересующие свойства, что может помочь в поиске новых функциональных материалов. Даны рекомендации по стратегии управления свойствами и поиска кристаллов с заданными свойствами. Предсказана перспективная сфера применения оксианионных кристаллогидратов в качестве материалов с отрицательной линейной сжимаемостью, которые могут использоваться в датчиках давления и несжимаемых композитах. Разработанный полуэмпирический расчетный подход применим для предсказания уравнения состояния и влияния давления на структуру кристаллов при заданных температурах.

Достоверность полученных результатов и выводов обеспечивается применением апробированных и хорошо зарекомендовавших себя методов квантовой химии и теории твердого тела, реализованных в программном комплексе CRYSTAL. Данный пакет хорошо апробирован и зарекомендовал себя в расчетах свойств широкого круга объектов. Полученные результаты находятся в хорошем качественном и количественном согласии с имеющимися экспериментальными данными и не противоречат фундаментальным представлениям физикохимии. Основные результаты работы опубликованы в журналах международных баз Scopus и Web of Science, в том числе в профильных международных журналах с импакт-фактором больше двух (*J. Phys. Chem. A*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, *RSC Advances*, *J. Phys. Chem. Solids*).

По автореферату можно сделать следующие **замечания**:

1. В дополнение к методам Малликена и AIM Бейдера для анализа межатомных взаимодействий полезно было бы рассмотреть методы ELF и СОНР (R. Dronskowski, P.E. Blochl. *J. Phys. Chem.* (1993) V.97, P. 8617).
2. Замечание по терминологии: некорректно применять термин «окисел» к пероксиду натрия, который окислом не является.

Вышеперечисленные замечания не влияют на общее хорошее впечатление от работы и её высокую оценку. Диссертационная работа Корабельникова Д.В. вносит существенный вклад в развитие современных систематических представлений о физической химии оксианионных кристаллов. Основные научные результаты диссертации изложены в 24 публикациях в рецензируемых изданиях, входящих в перечень ВАК РФ (все индексируются Scopus и Web of Science), из которых 8 статей опубликовано в международных изданиях первого и второго квартиля. Имеется опубликованная глава зарубежной монографии, индексируемая Scopus.

Диссертация соответствует всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней» ВАК РФ (в действующей редакции), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, в том числе п.9, а ее автор Корабельников Дмитрий Васильевич заслуживает присуждения ему степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

заведующий кафедрой физической и неорганической химии
института химии и химико-фармацевтических технологий
Алтайского государственного университета,
доктор физико-математических наук,
профессор

С.А. Безносюк

ФГБОУ ВО «Алтайский государственный университет (АлтГУ)»
Почтовый адрес: 656049, г. Барнаул, пр. Ленина, д. 61
Телефон: 8(3852) 368-636
E-mail: bsa1953@mail.ru



**ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ
НАЧ ОТДЕЛА ПО РСОР
УИ МОСКЕРОВА ЕВ**

05.03.24

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