

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.

Кристаллы с молекулярными оксианионами, рассматриваемые в настоящей работе, находят широкое и разнообразное практическое применение, поэтому важным представляется изучение их физико-химических свойств. Изучение свойств соединений на основе понимания особенностей их структуры и межатомных взаимодействий, корреляций «структура-свойство» – фундаментальная проблема физической химии и материаловедения. В диссертационной работе развит микроскопический подход и проведено системное исследование атомной структуры, межатомных взаимодействий и физико-химических свойств оксианионных кристаллов, необходимое для выявления закономерностей и разработки стратегии управления свойствами на микроскопическом уровне. Компьютерное квантово-химическое моделирование в настоящее время позволяет проводить исследование на атомном уровне и адекватно прогнозировать структуру и физико-химические свойства различных материалов. При этом теория функционала плотности (DFT) обеспечивает компромисс между точностью моделирования и имеющимися вычислительными ресурсами, что особенно важно для исследования сложных кристаллов.

На основе расчетов Корабельниковым Д.В. предсказаны практически важные свойства 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. Для некоторых кристаллов обнаружена отрицательная линейная сжимаемость и установлены её микроскопические механизмы. 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, что позволяет изучить свойства при заданных внешних условиях на основе корреляций «структура-свойство».

Таким образом, работа представляется актуальной и значимой. Новизна и значимость основных результатов подтверждается публикациями в ведущих рецензируемых научных журналах, в том числе в международных журналах первого и второго квартиля. Достоверность результатов расчетов подтверждается их качественным и количественным согласием с имеющимися экспериментальными данными.

Замечания по автореферату:

1. На стр. 39-41 не указано при каких внешних давлениях справедливы выводы по влиянию барического воздействия на оксианионные кристаллы.
2. В тексте автореферата не всегда указано какая рассматривалась теплоемкость оксианионных кристаллов – молярная или удельная.

Указанные замечания носят дискуссионный характер и не снижают общей высокой оценки диссертационной работы.

Считаю, что диссертационная работа «Исследование структуры, межатомных взаимодействий и физико-химических свойств оксианионных кристаллов методом компьютерного моделирования» является завершенной научно-квалификационной

работой. Работа полностью соответствует требованиям «Положения о присуждении ученых степеней» утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (в действующей редакции), предъявляемым к докторским диссертациям, а её автор Корабельников Дмитрий Васильевич заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

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

Заведующий кафедрой
естественнонаучных дисциплин
им. профессора В.М. Финкеля
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего
образования «Сибирский государственный
индустриальный университет»
д.ф.-м.н. (01.04.07), профессор,
Заслуженный деятель науки РФ,
Лауреат премии Правительства РФ
в области науки и техники,
Лауреат премии РАН им. И.П. Бардина

29.01.2024

Громов Виктор Евгеньевич

д.т.н. (специальность 01.04.07), доцент,
профессор кафедры естественнонаучных
дисциплин
им. профессора В.М. Финкеля

29.01.2024

Невский Сергей Андреевич

Подпись В.Е. Громова и С.А. Невского
удостоверяю
Начальник ОК ФГБОУ ВО «СибГИУ»



Миронова Татьяна Анатольевна

Адрес: 654006, г. Новокузнецк, ул. Кирова 42, СибГИУ, каф. естественнонаучных дисциплин им. проф. В.М. Финкеля. Телефон (3843) 46-22-77, факс (3843) 46-57-92, E-mail: gromov@physics.sibsiu.ru, snevskiy@bk.ru