

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.315.09,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«КЕМЕРОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ,
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело N _____
решение диссертационного совета от 5 апреля 2024 года N 13

О присуждении Корабельникову Дмитрию Васильевичу, гражданину Российской Федерации ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Исследование структуры, межатомных взаимодействий и физико-химических свойств оксианионных кристаллов методом компьютерного моделирования» по специальности 1.4.4. Физическая химия принята к защите 29 ноября 2023 года (протокол заседания № 9) диссертационным советом 24.2.315.09, созданным на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский государственный университет» Министерства науки и высшего образования РФ, 650000, г. Кемерово, ул. Красная, 6, действующим на основании приказа Министерства науки и высшего образования РФ № 818/нк от 20 апреля 2023 года.

Соискатель Корабельников Дмитрий Васильевич, «9» апреля 1984 года рождения, в 2006 году окончил Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Кемеровский государственный университет», получив диплом с отличием по специальности «Физика», номер диплома ВСА 0469261. Диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук «Природа электронных состояний, фотоэлектронные и оптические свойства оксианионных кристаллов» защитил в 2009 году (специальность 02.00.04 – Физическая химия, номер диплома ДКН 104889) в диссертационном совете Д 212.088.03, созданном на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский государственный университет». Соискатель работает доцентом кафедры теоретической физики Института фундаментальных наук Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский государственный университет» Министерства науки и высшего образования РФ.

Диссертация выполнена на кафедре теоретической физики Института фундаментальных наук Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский государственный университет» Министерства науки и высшего образования РФ.

Научный консультант - доктор физико-математических наук, профессор, почетный работник высшего профессионального образования РФ Журавлев Юрий Николаевич, первый проректор, заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики Института фундаментальных наук Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский государственный университет».

Официальные оппоненты:

Козлова Светлана Геннадьевна, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, доцент, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт неорганической химии имени А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук», главный научный сотрудник, заведующий лабораторией физической химии конденсированных сред;

Кулькова Светлана Евгеньевна, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук», главный научный сотрудник лаборатории физики нелинейных сред;

Сидельников Анатолий Анатольевич, доктор химических наук, старший научный сотрудник, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения Российской академии наук», старший научный сотрудник лаборатории химии твердого тела

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», г. Челябинск в своем положительном отзыве, подписанном заведующим научно-исследовательской лабораторией Многомасштабного моделирования многокомпонентных функциональных материалов, ведущим научным сотрудником, профессором кафедры теоретической и прикладной химии Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», доктором химических наук, доцентом Барташевич Екатериной Владимировной, и утвержденным первым проректором – проректором по научной работе Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», доктором технических наук Коржовым Антоном Вениаминовичем, указала, что:

автор диссертации, Корабельников Дмитрий Васильевич, достоин присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия за вклад в установление взаимосвязи между микроскопическими характеристиками атомного и субатомного уровня и макроскопическими свойствами (электронными, упругими, колебательными, тепловыми) кристаллических соединений с молекулярными оксианионами. Диссертационная работа «Исследование структуры, межатомных взаимодействий и физико-химических свойств оксианионных кристаллов методом компьютерного моделирования», представленная на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия, является завершенной научно-квалификационной работой и удовлетворяет всем критериям, предъявляемым к работам на соискание ученой степени доктора физико-математических наук в соответствии с п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней» (утверждено постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013), предъявляемым ВАК РФ к докторским диссертациям.

Соискатель Корабельников Д.В. имеет 63 опубликованные научные работы, в том числе по теме диссертации опубликовано 39 научных работ, из них в рецензируемых периодических научных изданиях опубликовано 24 работ. Из 24 опубликованных статей в рецензируемых периодических научных изданиях 20 в журналах К1, 4 в журналах К2, в том числе по физической химии – 14. Опубликовано 1 глава в зарубежной монографии. Суммарный объем публикаций по теме диссертации составляет 22,47 п.л., в том числе вклад Корабельникова Д.В. составляет 12,14 п.л. Сведения об опубликованных по теме диссертации научных работах указаны соискателем достоверно.

Наиболее значительные публикации Корабельникова Д.В. по теме диссертации:

1. Zhuravlev, Yu.N. Electronic structure, chemical bonding, photoelectronic and optical properties of metal perchlorates / Yu.N. Zhuravlev, **D.V. Korabel'nikov**, A.S. Poplavnoi. //

- In Perchlorates: production, uses and health effects / Ed. by L.E. Matthews. - New York: Nova Sci. Publ. Inc., 2011. Ch. 10. P. 277-294. (глава зарубежной монографии в Scopus)
2. Журавлёв, Ю.Н. Природа электронных состояний и фотоэлектронные спектры оксианионных кристаллов / Ю.Н. Журавлёв, **Д.В. Корабельников** // Журнал структурной химии. – 2009. – Т. 50, № 6. – С. 1070-1077. (K2)
 3. Журавлёв, Ю.Н. Электронная структура и оптические спектры оксианионных кристаллов / Ю.Н. Журавлёв, **Д.В. Корабельников** // Известия вузов. Физика. – 2009. - № 9. – С. 70-74. (K1)
 4. Журавлёв, Ю.Н. Электронная структура поверхности оксианионных кристаллов / Ю.Н. Журавлёв, **Д.В. Корабельников** // Известия вузов. Физика. – 2009. - № 8. – С. 97-99. (K1)
 5. **Корабельников, Д.В.** Структура и электронные свойства поверхности оксианионных кристаллов / Д.В. Корабельников, Ю.Н. Журавлев // Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед. - 2013. – № 11. – С. 55-59. (K1)
 6. **Корабельников, Д.В.** Теоретическое исследование термодинамических свойств нитратов лития, натрия, калия / Д.В. Корабельников, Ю.Н. Журавлев // ФТТ. - 2013. – Т. 55, № 8. – С. 1651-1658. (K1)
 7. **Корабельников, Д.В.** Структура и электронные свойства систем $\text{Na}_2\text{O}_2/\text{NaClO}_4(001)$, $\text{K}_2\text{O}/\text{KClO}_3(001)$ / Д.В. Корабельников, Ю.Н. Журавлев // Журн. структ. химии. - 2015. – Т. 56, № 2. – С. 219-224. (K2)
 8. **Korabel'nikov, D. V.** Structure and electronic properties of MNO_3 (M: Li, Na, K, NH_4) under pressure: DFT-D study / D.V. Korabel'nikov, Yu.N. Zhuravlev // J. Phys. Chem. Solids. – 2015. – V. 87. – P. 38-47. (K1)
 9. **Корабельников, Д.В.** Структура и электронные свойства нитрата и перхлората 3,3-диамино-4,4-азо-1,2,4-триазола / Д.В. Корабельников, Ю.Н. Журавлев // Журн. структ. химии. - 2016. – Т. 57, № 3. – С. 475-483. (K2)
 10. **Korabel'nikov, D. V.** Positive and negative linear compressibility and electronic properties of energetic and porous hybrid crystals with nitrate anions / D. V. Korabel'nikov, Yu. N. Zhuravlev // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2016. – V. 18. – P. 33126–33133. (K1)
 11. **Корабельников, Д.В.** *Ab initio* исследование упругих свойств хлоратов и перхлоратов / Д.В. Корабельников, Ю.Н. Журавлев // ФТТ. - 2016. – Т. 58, № 6. – С. 1129-1134. (K1)
 12. **Корабельников, Д.В.** Первопринципное исследование упругих свойств нитратов / Д.В. Корабельников, Ю.Н. Журавлев // Известия вузов. Физика. – 2016. - Т.59, № 12. – С. 126-132. (K1)
 13. Журавлев, Ю.Н. Колебательные свойства нитратов щелочно-земельных металлов и их кристаллогидратов из первых принципов / Ю.Н. Журавлев, **Д.В. Корабельников** // Оптика и спектр. - 2017. – Т. 122, № 6. – С. 972-979. (K1)
 14. **Korabel'nikov, D.V.** Compressibility anisotropy and electronic properties of oxyanionic hydrates / D.V. Korabel'nikov, Yu.N. Zhuravlev // J. Phys. Chem. A – 2017. – V. 121. – P. 6481-6490. (K1)
 15. **Корабельников, Д.В.** Влияние давления на структуру и электронные свойства LiClO_4 , NaClO_4 , KClO_4 , NH_4ClO_4 / Д.В. Корабельников, Ю.Н. Журавлев // Физика твердого тела. - 2017. – Т. 59, № 2. – С. 248-254. (K1)
 16. Журавлев, Ю.Н. Структура и электронные свойства нитратов магния и кальция и их кристаллогидратов из первых принципов / Ю.Н. Журавлев, **Д.В. Корабельников** // Журн. структ. химии. - 2017. – Т. 58, № 4. – С. 699-708. (K2)
 17. Журавлёв, Ю.Н. Упругие и фотоупругие свойства $\text{M}(\text{NO}_3)_2$, MO (M=Mg, Ca, Sr, Ba) / Ю. Н. Журавлёв, **Д. В. Корабельников** // Известия вузов. Физика. – 2017. - Т.60, № 1. – С. 127-133. (K1)
 18. **Корабельников, Д.В.** Колебательные и тепловые свойства оксианионных кристаллов / Д.В. Корабельников // Физика твердого тела. - 2018. – Т. 60, № 3. – С. 565-573. (K1)

19. **Корабельников, Д.В.** Структура и колебательные свойства гидратов оксианионных кристаллов из первых принципов / Д.В. Корабельников, Ю.Н. Журавлев // Физика твердого тела. - 2018. – Т. 60, № 10. – С. 2014-2021. (K1)
20. **Korabel'nikov, D.V.** Structural, elastic, electronic and vibrational properties of a series of sulfates from first principles calculations / D.V. Korabel'nikov, Yu.N. Zhuravlev // J. Phys. Chem. Solids. – 2018. – V. 119. – P. 114-121. (K1)
21. **Korabel'nikov, D. V.** The nature of the chemical bond in oxyanionic crystals based on QTAIM topological analysis of electron densities / D. V. Korabel'nikov, Yu. N. Zhuravlev // RSC Advances. – 2019. – V. 9. – P.12020-12033. (K1)
22. **Korabel'nikov, D. V.** Semi-empirical and ab initio calculations for crystals under pressure at fixed temperatures: the case of guanidinium perchlorate / D. V. Korabel'nikov, Yu. N. Zhuravlev // RSC Advances. – 2020. – V. 10. – P. 42204-42211. (K1)
23. Zhuravlev, Yu.N. Research of cation dependences of structural and elastic properties of metal carbonates series by density functional theory calculations / Yu.N. Zhuravlev, **D.V. Korabel'nikov** // Mater. Today Commun. – 2021. – V. 28. – P. 102509. (K1)
24. Zhuravlev, Yu.N. First-principle studies of the pressure effect on metal carbonates elastic properties / Yu.N. Zhuravlev, **D.V. Korabel'nikov** // Solid State Commun. – 2022. – V. 346. – P. 114706. (K1)
25. Журавлев, Ю.Н. Теоретическое исследование влияния давления на структуру и электронные свойства карбонатов металлов / Ю.Н. Журавлев, **Д.В. Корабельников** // Известия РАН. Серия Физическая. - 2022. – Т. 86, № 10. – С. 1486-1499. (K1)

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

- Безносюка Сергея Александровича, доктора физико-математических наук, профессора, заведующего кафедрой физической и неорганической химии института химии и химико-фармацевтических технологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Алтайский государственный университет». Замечания:

1. В дополнение к методам Малликена и AIM Бейдера для анализа межатомных взаимодействий полезно было бы рассмотреть методы ELF и CONP (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.

- Цирельсона Владимира Григорьевича, доктора физико-математических наук, Заслуженного деятеля науки РФ, профессора, заведующего кафедрой квантовой химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева». Замечания:

1. Дисперсионное взаимодействие в расчетах учитывалось согласно схеме Гримме DFT-D. Какая именно поправка Гримме была введена?

2. На рис. 7 не указано, с каким интервалом построены карты электронной плотности.

3. В автореферате отсутствует анализ точности полученных результатов.

- Медведевой Надежды Ивановны, доктора физико-математических наук, главного научного сотрудника лаборатории квантовой химии и спектроскопии имени профессора А.Л. Ивановского Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук». 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 B3LYP, 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.

- Громова Виктора Евгеньевича, доктора физико-математических наук, Заслуженного деятеля науки РФ, Лауреата премии Правительства РФ в области науки и техники, Лауреата премии РАН им. И.П. Бардина, профессора, заведующего кафедрой естественнонаучных дисциплин им. профессора В.М. Финкеля Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Сибирский государственный индустриальный университет» и Невского Сергея Андреевича, доктора технических наук, доцента, профессора кафедры естественнонаучных дисциплин им. профессора В.М. Финкеля Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Сибирский государственный индустриальный университет». Замечания:

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.

- Патрина Геннадия Семеновича, доктора физико-математических наук, профессора, заведующего кафедрой общей физики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Сибирский федеральный университет». Без замечаний.

Все отзывы положительные и содержат вывод, что диссертационная работа соответствует всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней» ВАК РФ (в действующей редакции), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, а ее автор Корабельников Дмитрий Васильевич заслуживает присуждения ему степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что **Козлова Светлана Геннадьевна** является признанным специалистом в области квантово-химического моделирования структуры, межатомных взаимодействий и физико-химических свойств разнообразных соединений, включая кислородсодержащие, в частности, оксианионные; **Кулькова Светлана Евгеньевна** является известным специалистом в области первопринципных расчетов структуры и свойств кристаллов и их поверхностей, включая кислородсодержащие; **Сидельников Анатолий Анатольевич** является специалистом, широко известным своими экспериментальными работами в области физической химии твердого тела, в том числе, по механохимическим процессам, структуре, оптическим и упругим свойствам кислородсодержащих кристаллов; **Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)»** (г. Челябинск) известно обширными исследованиями и публикациями в области физической химии, в том числе по компьютерному квантово-химическому моделированию структуры, межатомных взаимодействий и физико-химических свойств ионно-молекулярных кристаллических материалов.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработаны новые научные идеи, обогащающие концепцию «структура-свойство» с помощью микроскопического подхода к исследованию физико-химических свойств оксианионных кристаллов на основе расчетных методов теории функционала плотности; стратегия управления свойствами на микроуровне и поиска оксианионных кристаллов с заданными свойствами,

предложены оригинальный полуэмпирический подход для расчета уравнения состояния и влияния давления на структуру кристаллов при заданных температурах; микроскопические механизмы формирования отрицательной линейной сжимаемости оксианионных кристаллов; оригинальная гипотеза о возможности существования между катионами серебра оксианионных кристаллов частично ковалентных связей,

доказано наличие закономерностей изменения структуры, межатомных взаимодействий и свойств в изоанионных и изокатионных рядах в зависимости от типа, размера и электроотрицательности катиона и центрального атома аниона, гидратации, размерности (поверхность, объем), внешнего давления; существование эффекта взаимодействия нанослоя пероксида или оксида металла с поверхностью оксианионного кристалла, который приводит к увеличению длины и ослаблению его внутрианионных связей.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказаны положения о роле деформации водородных связей и вращений комплексных ионов, вносящие вклад в расширение существующих представлений о механизмах отрицательной линейной сжимаемости кристаллов с молекулярными оксианионами, а также о роли параметров кристаллической структуры, особенностей распределения электронной плотности и межатомных взаимодействий в формировании физико-химических свойств, расширяющие интерпретацию свойств оксианионных кристаллов на микроскопическом уровне,

применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов) использован комплекс моделей и компьютерных программ для моделирования структуры и широкого набора физико-химических свойств различных оксианионных кристаллов, в том числе в условиях внешнего давления,

изложены элементы теории, показывающие взаимосвязи между микроскопическими характеристиками (радиус атома вдоль линии связи, электроотрицательность, электронная плотность) и электронными спектрами, упругими, колебательными, тепловыми свойствами в изоанионных и изокатионных рядах кристаллов с молекулярными оксианионами; доказательства роли внутрианионных колебаний в формировании температурной зависимости молярной теплоёмкости оксианионных кристаллов,

раскрыты причины отрицательной линейной сжимаемости, включающие сжимаемость водородных связей, деформацию мотивов с водородными связями; закономерности изменения природы связывающих межатомных взаимодействий в оксианионных кристаллах; причины ограниченной применимости модели Джоуля-Коппа для прогнозирования теплоёмкости оксианионных кристаллов

изучены взаимосвязь кристаллической и электронной структуры с физико-химическими свойствами оксианионных кристаллов; влияние гидратации, размерности и внешнего давления на физико-химические (оптические, тепловые, механические, химические) свойства оксианионных кристаллов,

проведена модернизация методики *ab initio* моделирования влияния давления на параметры кристаллической решетки, основанная на полуэмпирическом подходе, совмещающим стандартные *ab initio* расчеты энергии для статической решетки и значения экспериментального равновесного объема ячейки при заданной температуре, позволяющие получить уравнение состояния.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

определены практически важные физико-химические свойства оксианионных кристаллов и закономерности их изменения, позволяющие выделить круг потенциально важных функциональных материалов; перспективы применения оксианионных кристаллогидратов в качестве материалов с отрицательной линейной сжимаемостью, которые могут использоваться в датчиках давления и несжимаемых композитах,

создана система рекомендаций по стратегии управления свойствами на микроскопическом уровне и поиска кристаллов с заданными свойствами, в том числе уникальными,

представлены методические рекомендации по применению расчетных моделей и количественные закономерности, которые могут быть использованы для прогнозирования свойств; определение уравнения состояния и влияния давления на параметры кристаллической структуры при заданных температурах; результаты, которые могут быть использованы при обучении студентов и аспирантов физических и химических направлений, а также служить в качестве справочного материала.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

результаты теоретических расчетов основаны на применении апробированных и хорошо зарекомендовавших себя методов квантовой химии твёрдого тела, а используемая теория функционала электронной плотности эффективно воспроизводит структуру и свойства кристаллов, согласуются с опубликованными экспериментальными результатами по теме диссертации

(например, построена на известных, проверяемых данных, фактах, в том числе для предельных случаев, согласуется с опубликованными экспериментальными данными по теме диссертации или по смежным отраслям)

идеи базируются на фундаментальных представлениях квантовой химии, а также на анализе и обобщении мирового опыта теоретического исследования оксианионных кристаллов,

(например, на анализе практики, обобщении передового опыта)

использованы современные апробированные компьютерные программы, а также сравнение с имеющимися расчетными данными других авторов, полученными альтернативными методами,

(сравнение авторских данных и данных, полученных ранее по рассматриваемой тематике)

установлено, что полученные результаты компьютерного моделирования находятся в качественном и количественном согласии с имеющимися экспериментальными и расчетными данными других авторов, не противоречат фундаментальным представлениям физической химии и могут быть интерпретированы на микроскопическом уровне; сформулированные выводы являются взаимно согласованными и не содержат внутренних противоречий.

(качественное и/или количественное совпадение авторских результатов с результатами, представленными в независимых источниках по данной тематике, в тех случаях, когда такое сравнение является обоснованным)

Научные исследования соискателя поддержаны АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы (2009-2010 годы)» № 2.1.1/1230; ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России (2011-2013 годы)» № 16.740.11.0591 (руководитель); ГЗ Минобрнауки РФ (2014-2016 годы) № 3.1235.2014К/ПЧ; ГЗ Минобрнауки РФ (2017-2019 годы) № 15.3487.2017/ПЧ; РНФ (2022-2023 годы), № 22-22-

20026 (руководитель), что также свидетельствует в пользу высокого уровня достоверности полученных результатов.

Соискатель Корабельников Д.В. является научным руководителем Алейниковой М.В., успешно защитившей кандидатскую диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 физическая химия

Личный вклад соискателя состоит в выполнении расчетов характеристик кристаллической структуры, электронной плотности, межатомных взаимодействий и физико-химических свойств оксианионных кристаллов, а также участия в апробации результатов исследования, подготовке основных публикаций к изданию. В работах, опубликованных в соавторстве, **соискателем** получены результаты, сформулированные в новизне, положениях, выносимых на защиту, а также основных результатах и выводах работы раздела «Заключение».

По своему содержанию диссертация отвечает паспорту специальности 1.4.4. Физическая химия в части развития модельных представлений о структуре и химической связи в оксианионных кристаллах и возникающих на их основе физико-химических свойствах рассматриваемых соединений: п. 1 **«Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик»**, п. 2 **«Экспериментальное определение термодинамических свойств веществ, расчет термодинамических функций простых и сложных систем, в том числе на основе методов статистической термодинамики, изучение термодинамических аспектов фазовых превращений и фазовых переходов»**, п. 3 **«Определение термодинамических характеристик процессов на поверхности, установление закономерностей адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях»**, п. 5 **«Изучение физико-химических свойств изолированных молекул и молекулярных соединений при воздействии на них внешних электромагнитных полей, потока заряженных частиц, а также экстремально высоких/низких температурах и давлениях»**, п. 10 **«Создание и разработка методов компьютерного моделирования строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений квантовой механики, различных топологических и статистических методов, включая методы машинного обучения, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойства»**, п. 11 **«Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных сред и белковом окружении»**.

В ходе защиты диссертации были высказаны следующие критические замечания:

1. Не рассмотрены полиморфные модификации оксианионных кристаллов.
2. При сравнении с экспериментальными данными не рассматриваются результаты, получаемые методом динамического ЯМР, непосредственно дающие активационные барьеры реориентации для групп, содержащих магнитные ядра, в частности для нитрата натрия и перхлората аммония.
3. В дополнение к методам Малликена и AIM Бейдера для анализа межатомных взаимодействий полезно было бы рассмотреть методы ELF и CONR.

Соискатель Корабельников Д.В. ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы и привел собственную аргументацию.

1. В диссертации приведены результаты только для наиболее стабильных при комнатной температуре фаз оксианионных кристаллов. Изучение полиморфизма можно отнести к перспективам дальнейшей разработки темы.
2. Данное сравнение безусловно полезно, что будет предметом дальнейших исследований.
3. Согласно литературным данным результаты, получаемые методом СОНР, существенно зависят от выбора базиса и поэтому не являются абсолютным индикатором связи.

На заседании 05 апреля 2024 года диссертационный совет принял решение присудить Корабельникову Д.В. ученую степень доктора физико-математических наук за решение научной проблемы, имеющей важное значение для развития физической химии оксианионных кристаллов, а именно, за установление взаимосвязи микроскопических характеристик кристаллической и электронной структуры с макроскопическими свойствами (электронными, упругими, колебательными, тепловыми) оксианионных кристаллов. Работа вносит существенный вклад в развитие углубленных систематических знаний в области физической химии оксианионных кристаллов.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 11 человек, из них 11 докторов наук по специальности 1.4.4 – физическая химия, участвовавших в заседании, из 13 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 10, против 0, недействительных бюллетеней – 1.

Председатель диссертационного совета
д.ф.-м.н., профессор

Каленский Александр Васильевич

Ученый секретарь
диссертационного совета
д.ф.-м.н., доцент

Звеков Александр Андреевич

5 апреля 2024 года

