

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.

Диссертация Д.В. Корабельникова представляет собой систематическое исследование модификации атомной структуры, электронной плотности, межатомных взаимодействий, электронных, упругих, колебательных и тепловых свойств оксианионных кристаллов в зависимости от типа и химического состава катионов и анионов, размерности, молекул воды, органических лигандов и внешнего давления на основе квантово-механического моделирования. Научная новизна работы в том, что впервые теоретически установлены взаимосвязи микроскопических характеристик строения и электронных, упругих, колебательных и тепловых свойств круга кристаллов с молекулярными оксианионами. Проведена интерпретация природы указанных свойств на микроскопическом уровне и установлены закономерности их изменения в изоанионных и изокатионных рядах. Выработаны рекомендации по стратегии структурного управления этими свойствами.

Установленные закономерности изменения свойств оксианионных кристаллов важны для предсказания физико-химических свойств новых соединений такого рода. Это определяет перспективу их дальнейшего использования. Проведенные исследования свойств ряда оксианионных кристаллов со сложными катионами открывают перспективу для изучения других оксианонных соединений этого класса, в которых можно ожидать как наличие отрицательной линейной сжимаемости, так и малой ширины запрещенной зоны, характерной для полупроводников.

Поставленная многоцелевая задача диссертантом решена успешно. Полученные результаты являются новыми и представляют практический интерес. Актуальность, новизна, практическая значимость и достоверность полученных результатов, а также личный вклад автора сомнений не вызывают. Результаты работы доложены на российских и международных конференциях и опубликованы в научных журналах, входящих в список, рекомендованный ВАК РФ.

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.

Эта критика не изменяет моего общего положительного мнения о работе.

Судя по автореферату, диссертация Корабельникова Д.В. «Исследование структуры, межатомных взаимодействий и физико-химических свойств оксианионных кристаллов методом компьютерного моделирования» по тематике, объектной базе, содержанию и полученным результатам отвечает всем требованиям пп. 9 – 14 «Положения о порядке присуждения учёных степеней» (утв. Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 в действующей редакции), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук, а её автор – Дмитрий Васильевич Корабельников заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Доктор физико-математических наук

(специальность 01.04.17 - химическая физика,

горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества),

профессор, заведующий кафедрой квантовой химии

ФГБОУВО «Российский химико-технологический

университет им. Д.И. Менделеева»

Цирельсон Владимир Григорьевич

8.02.2024 г.

Адрес:

ФГБОУВО РХТУ им. Д.И. Менделеева,

кафедра квантовой химии,

125047 Москва, Миусская площадь, 9.

Тел.: +7-499-978-9584

E-mail: tsirelson.v.g@muctr.ru

Подпись проф. В.Г. Цирельсона удостоверяю.

Ученый секретарь РХТУ им. Д.И. Менделеева



Н.А. Макаров