

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертацию Александра Петровича Шевченко «Теория и методы компьютерного геометрико-топологического анализа и прогнозирования строения и физических свойств координационных соединений», представленную на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Исследование, представленное А.П. Шевченко, относится к одной из наиболее интересных и прорывных областей современной химии – вернее сказать, это междисциплинарная работа на стыке математики, информационных технологий, физики и химии, где последняя наука является основным «бенефициаром». Речь идет о поиске подходов и методов, позволяющих предсказывать кристаллическую структуру новых веществ в зависимости от природы «строительных блоков», из которых они синтезируются. Над этой проблемой уже многие годы трудятся многие сильнейшие коллективы мира, поскольку ее решение напрямую предопределяет тренды развития химического материаловедения. Очевидно, что здесь не может быть найден некий универсальный алгоритм, но, вместе с тем, есть два фактора, которые дают надежду на появление эффективных решений. С одной стороны, это бурное развитие технологий искусственного интеллекта (ИИ), в частности, машинного обучения (machine learning, ML), которые позволяют находить неочевидные корреляции типа «структура-свойство», имеющие прогностическую ценность. С другой стороны, к настоящему времени уже накоплен огромный объем рентгеноструктурных данных, то есть экспериментально полученных сведений о реально существующих кристаллических структурах (в различных базах данных содержится уже более 2 млн записей), без которого применение ML было бы невозможным.

Автор работы сосредоточил свои усилия на разработке моделей, которые позволили бы прогнозировать строение и физико-химические свойства металл-органических координационных полимеров (МОКП). Это очень интересный и важный класс соединений, интенсивно изучаемый на протяжении последних десятилетий, в том числе благодаря широчайшему спектру возможных областей применения. Они включают в себя катализ, создание сенсоров, материалов для высокоселективного разделения сложных смесей (в том числе промышленно важных – например, бензол/циклогексан, изомеры ксилола) и многое другое. Поиск новых стабильных трехмерных МОКП с высокими значениями объема пор, а также «хорошей» (с точки зрения сорбции) топологией полостей (пор, каналов) –

это очень важная задача координационной химии как с фундаментальной точки зрения, так и в контексте возможного применения МОКП на практике (на данный момент число сортов промышленно производимых МОКП невелико). Все вышесказанное позволяет утверждать, что работа, вне всякого сомнения, отличается **очень высокой актуальностью, теоретической и практической значимостью.**

Научная новизна работы состоит в том, что автор, будучи одним из разработчиков программного обеспечения ToposPro и сервиса TopCryst, впервые использовал одновременно и объединил топологический и геометрический подходы при моделировании структур МОКП. Он предложил алгоритм прогнозирования некоторых свойств МОКП, основываясь на методе определения так называемых «координационных фигур» строительных блоков. Создана и обучена модель, позволяющая оценивать степени окисления атомов в кристаллической структуре МОКП.

Личный вклад соискателя представляется очевидным – как отмечено выше, именно он и является одним из ключевых разработчиков ToposPro.

Текст диссертации построен по классической схеме. В литературном обзоре автор описывает основные геометрические и топологические модели строения кристаллов, описывает дескрипторы, используемые в моделировании, подходы, применяемые в анализе структурных данных с помощью ИИ. Вторая глава посвящена основному детищу автора – ToposPro (дано расширенное и очень подробное описание). Следующая глава посвящена корреляциям типа «структура-свойство» в МОКП, включая прогнозированию свободного объема в структурах, оценке степеней окисления и др. Наконец, четвертая, наименьшая по объему глава, посвящена геометрическому и топологическому анализу кристаллических структур с иной природой связывания атомов.

Диссертация написана прекрасным литературным языком, что сегодня встречается не столь часто. Результаты работы опубликованы в виде двух глав в монографиях, а также 37 публикаций в российских и зарубежных научных журналах. Можно отметить очень высокие показатели цитирования некоторых работ (так, например, статья №21 из списка, в которой описан программный пакет ToposPro, процитирована более 2600 раз). Помимо этого, в рамках работы зарегистрировано 18 программ для ЭВМ и баз данных; результаты работы представлялись на важных международных и всероссийских научных мероприятиях.

Ознакомление с текстом не выявило сколь-либо значимых недостатков и не позволяет сделать замечания, которые носили бы принципиальный характер. Представленные ниже комментарии носят скорее дискуссионный характер и не умаляют ценность работы:

- 1) Автор использует формулировку «специфические связи» (напр. на стр. 42 и 43). О каких именно связях идет речь?
- 2) Стр. 69: «*многие синтезированные МОКП (из около 25000)*» - если учитывать одно-, двух- и трехмерные полимеры, то их число существенно выше. Идет ли речь только о трехмерных МОКП?
- 3) В химии полимеров известен метод Аскадского, основанный на аддитивных вкладах атомных групп в свойства материала. Он используется для прогнозирования свойств органических полимеров. Применим ли, по мнению автора, данный метод для координационных соединений?
- 4) В какой степени анализ статистики CSD отражает вероятности реализации событий при синтезе МОКП? Очевидно, что многие структуры являются результатом направленного дизайна, в т.ч. ретикулярного синтеза – в химии МОКП это очень популярный подход, по меньшей мере, с появления классического обзора Yahgi et al. (Nature 2003, 423, 705). При этом очевидно, что экспериментально не сканируется всё возможное пространство условий синтеза, статистика будет отражать только лишь «популярность» определенного направления синтеза. Как полагает автор, можно ли учесть этот фактор?

Выводы (глава «заключение», со стр. 207) полностью отражают суть работы.

Автореферат соответствует содержанию диссертации. Замечаний, которые бы относились к нему, не имеется.

Можно констатировать, что исследование, проведенное А.П. Шевченко, представляет собой научно-квалификационную работу, выполненную на очень высоком уровне. Это редкий в наше время случай, когда можно совершенно смело и безо всяких оговорок утверждать, что здесь полностью соблюден принцип «докторская диссертация = новое научное направление». Вне всякого сомнения, диссертация А.П. Шевченко на тему «Теория и методы компьютерного геометрико-топологического анализа и прогнозирования строения и физических свойств координационных соединений», представленная на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия, **полностью соответствует** требованиям, предъявляемым к докторским

диссертациям согласно Положению о присуждении ученых степеней (утверждено постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013, в действующей редакции). Александр Петрович Шевченко однозначно **заслуживает** присуждения ему искомой ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Официальный оппонент

Заместитель директора по научной работе Федерального исследовательского центра «Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского Сибирского отделения Российской академии наук» (ИрИХ СО РАН), доктор химических наук по специальности 02.00.01 – неорганическая химия, профессор РАН

Адонин Сергей Александрович

3 марта 2025 г.

Адрес: 664033 Иркутск, ул. Фаворского, 1, ИрИХ СО РАН

Телефон: +7 (3952) 45-31-87

E-mail: sergey.a.adonin@gmail.com

