

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

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

Создание новых методов моделирования строения и свойств химических веществ, а также автоматизация анализа огромного массива накопленной химической и структурной информации в электронных базах данных с использованием современных методов машинной обработки для извлечения из массива информации новых полезных знаний о взаимосвязи химического состава, кристаллического строения и функциональных свойств являются фундаментальными и весьма *актуальными задачами*, стоящими перед физической и неорганической химией, физикой твердого тела и кристаллохимией. В этой связи представленная диссертационная работа актуальна и обладает несомненной *научной новизной*, которая заключается в объединении топологического и геометрического подхода при анализе и моделировании кристаллических структур, развитии теории их топологических представлений, разработке разнообразных прогностических моделей кристаллохимического анализа с использованием алгоритмов машинного обучения.

Полученные автором результаты носят фундаментальный характер, а *практическая значимость* рецензируемой диссертационной работы проявляется в широкой мировой востребованности разработанного автором геометрико-топологического подхода к прогнозированию и анализу кристаллических структур. Так, на конец 2023 года программный комплекс ToposPro, созданный и развиваемый при непосредственном участии диссертанта, используют более 7800 ученых из 103 стран мира, а разработанные при определяющем участии автора топологические базы

данных и сервисы для их использования применяются пользователями из 74 стран.

Личный вклад соискателя в диссертационную работу заключался в постановке задач и целей исследования, обработке и интерпретации всех полученных данных, обсуждении всех полученных научных результатов с их последующим обобщением и публикацией материалов проведенных исследований. При создании программного комплекса ToposPro автором были созданы самостоятельно три из восьми прикладных программ: Dirichlet, IsoCryst и StatPack. Разработка остальных пяти программ была осуществлена соискателем в соавторстве с проф. В.А. Блатовым. Достоверность представленных автором научных результатов подтверждается хорошим согласием экспериментальных и расчетных данных, их воспроизводимостью в численных экспериментах сторонними научными группами, большими объемами выборок экспериментальных данных, используемых для машинного обучения. Отметим также хорошую корреляцию представленных автором результатов с доступной из литературных источников информацией.

Диссертация Шевченко А.П. написана исключительно грамотным научным языком, изложена на 204 страницах машинописного текста, включает в себя 91 рисунок и 36 таблиц. Еще 2 рисунка и 12 таблиц находятся в приложении к диссертационной работе. По структуре работа включает в себя введение, четыре главы, общие выводы по работе (заключение) и список цитируемых источников из 284 наименований. На защиту автор выносит восемь защищаемых положений. Отмечу, что изложенные в авторской формулировке на странице 7-9 диссертации пункты, описывающие новые подходы, правила, алгоритмы, модели и базы знаний, формально не могут быть названы «защищаемыми **положениями**», под которыми принято понимать утвердительные тезисы, выдвинутые в диссертации впервые. В этой связи данный раздел было бы более правильно назвать, не «защищаемые положения», а «на защиту выносятся».

Во введении автор приводит обоснование актуальности представленной работы, формулирует цель и задачи работы, фиксирует

теоретическую и практическую значимость, методологию и используемые методы исследования, а также обосновывает научную новизну представленных в диссертации результатов.

Первая глава является литературным обзором. Рассматривая его в целом, можно отметить значительную работу, проведенную автором, по систематизации обширного материала о современных моделях строения кристаллических соединений, способах их описания, существующих информационных хранилищах кристаллоструктурных данных. Автор убедительно описал трудности, которые могут возникнуть при использовании квантово-химических моделей, основанных на поиске энергетического минимума кристаллического ансамбля, для обработки большого массива данных. Весьма наглядно продемонстрированы удобства применения для этих целей геометрических и топологических представлений кристаллических структур. Особое внимание автор уделит методам анализа, основанным на современных алгоритмах машинного обучения. Автор продемонстрировал, что для корректного и полного анализа кристаллического пространства необходимо помимо подпространства атомов анализировать дополнительно и подпространство межатомных пустот, что бывает весьма полезно для предсказания специальных свойств веществ. В главе также приведена общая схема современной обработки и использования кристаллографической информации для решения поставленных в диссертации задач (рис. 24).

Несмотря на положительное впечатление от этой главы у рецензента по ней имеются вопросы и некоторые замечания редакционного характера.

1) Насколько автор оценивает возможности использования потенциалов ионизации I_i из справочника Григорьева для корректной оценки положения максимума электронной плотности атомной орбитали в кристалле химического соединения? Учитывая тот факт, что в кристалле атомные орбитали обычно находятся в сложном смешанном состоянии различных уровней, то кривая последовательных справочных потенциалов I_i может не

совсем корректно отражать истинный ход ионизации атома при образовании химического связывания.

2) Стр. 25. Утверждается, что Слейтеровский радиус атома, характеризует *«размер атома, принятый в кристаллохимии»*. Рецензент считает, что данный тезис справедлив лишь для ограниченной части кристаллических структур и ни в коем случае не может относиться к высокоионным кристаллическим соединениям. Также, очевидно, требуются четкие пояснения, какие атомы при анализе полиэдров ВД относятся к металлам, а какие к неметаллам (стр. 26).

3) Рецензенту осталось абсолютно неясным различие между термином *координационный полиэдр* (определение дано на стр. 33) и *координационная фигура* (определение дано на стр. 35). Отмечу, что в дальнейшем изложении материала автор чаще использует второй термин (см. главу 2, 3), хотя он значительно менее распространен в кристаллохимической литературе. А в главе 4 автор возвращается к термину координационный полиэдр (см., например, рис. 84).

4) Таблицу 5 следовало бы озаглавить «некоторое программное обеспечение и веб-сервисы...». В противном случае может сложиться ощущение, что программный пакет USPEX является единственной программой для эволюционного предсказания кристаллических структур, а программ визуализаторов в мире всего три.

5) Указание мессбауэровской спектроскопии (стр. 65) в качестве экспериментального метода определения степени окисления атома в кристалле видится не совсем удачным примером, поскольку с помощью этого метода возможно определение зарядового состояния лишь для очень ограниченного числа атомных ядер.

6) Трансляционные индексы в гексагональной системе координат (см. рис. 5) лучше приводить в четырех-символьном виде, учитывая наличие дополнительного направления *и*.

В главе 2 автор в доступной и компактной форме описывает основные положения разработанного универсального геометрико-топологического

подхода к анализу и моделированию разнообразных кристаллических веществ. Описан функционал программного комплекса ToposPro, позволяющего реализовывать вышеупомянутые подходы в рамках единой информационно-аналитической системы. Приведена схема системы управления базами данных программного комплекса ToposPro и разобраны его функциональные модули и прикладные программы. Разобрана общая схема подготовки и анализа кристаллографических данных для системы искусственного интеллекта. Замечаний по существу у рецензента к этой главе нет. В качестве незначительного редакционного замечания к этой и последующим главам отмечу весьма частое изложение материала не от третьего, а от первого лица (и во множественном числе): «мы используем», «нами введено», «мы сформировали библиотеку» и т.д. и т.п., что смотрится несколько странно. Отмечу, что в главе 4 изложение ведется уже от третьего лица.

Главы 3 «Корреляции «состав-структура-свойство» в координационных полимерах» и 4 «Геометрический и топологический анализ кристаллических структур с иной природой связывания атомов» являются основными, содержащие конкретные результаты использования авторского подхода для решения **восьми** весьма разнообразных физико-химических задач. Среди них: анализ координационных многогранников атомов меди и цинка в координационных соединениях, прогноз размерности и топологического типа в координационных соединениях и металлоорганических координационных полимерах, анализ свободного пространства в таких полимерах, прогноз степеней окисления металлов в химических соединениях, анализ размеров атомов в структурах простых веществ, изучение каналов проводимости в Na-содержащих кристаллических структурах, теоретическая оценка плотности кристаллов насыщенных углеводородов и классификация структур интерметаллических соединений.

Отметим, что для решения всех этих задач автор использовал весьма представительные выборки кристаллоструктурных данных. Следует также сказать, что достоверность всех представленных в главах 3 и 4 результатов не

подлежит сомнению. Анализ результатов, представленных автором в главах 3 и 4, **позволяет считать все восемь пунктов, выносимых автором на защиту, убедительно обоснованными и проиллюстрированными.**

Тем не менее, учитывая разнообразие представленной информации, логично было бы эти главы разбить более подробно. Это лучше структурировало бы результаты проведенных исследований и не потребовало бы объединения весьма различных веществ под одним термином «полимеры», вынесенным в название третьей главы. В качестве незначительных замечаний редакционного плана также отмечается:

1) Отсутствие подписей к легендам на рисунках 68 и 69, что затрудняет понимание представленных графиков;

2) англоязычные подписи координатных осей на рисунках 71, 72, 73.

Незначительные вопросы и замечания, отмеченные в отзыве, не изменяют **положительную оценку** рецензируемой работы. Все они носят в подавляющем большинстве случаев рекомендательный характер. Содержание диссертационной работы полностью отражено в автореферате и соответствует паспорту научной специальности 1.4.4. «Физическая химия» (пункты 1, 10, 11, 12). Основные результаты работы изложены в 35 статьях в журналах, индексируемых в базах данных WoS, Scopus и RSCI и двух главах в монографиях. Результаты работы докладывались на 15-ти научных конференциях всероссийского и международного уровня. Автором были получены 18 свидетельств о регистрации компьютерных программ и баз данных.

Диссертация Шевченко Александра Петровича «Теория и методы компьютерного геометрико-топологического анализа и прогнозирования строения и физических свойств координационных соединений» по своему объёму и научному уровню удовлетворяет требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени доктора наук (установленными в п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденном

постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013г. №842) (с изменениями и дополнениями).

Автор диссертации Шевченко Александр Петрович за важное научное достижение – успешную разработку и внедрение новых методов анализа и предсказания строения и физических свойств координационных соединений заслуживает присуждения учёной степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. «Физическая химия».

Официальный оппонент

Еремин Николай Николаевич, член-корреспондент РАН, доктор химических наук (25.00.05 - минералогия, кристаллография), ученое звание – доцент.

Должность - декан геологического факультета, заведующий кафедрой кристаллографии и кристаллохимии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Адрес: 119234, Российская Федерация, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Геологический факультет, оф. 523.

Телефон: +7(495) 939-2970.

e-mail: neremin@geol.msu.ru ; neremin@mail.ru

«03» марта 2025 г.

Я, Еремин Николай Николаевич, даю согласие на использование моих персональных данных в документах, связанных с защитой диссертации Шевченко Александра Петровича, и их дальнейшей обработкой.

