

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Шевченко Александра Петровича** “Теория и методы компьютерного геометрико-топологического анализа и прогнозирования строения и физических свойств координационных соединений” на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Диссертационная работа Шевченко Александра Петровича посвящена теоретическим исследованиям строения и свойств металлоорганических координационных полимеров и развитию методов и алгоритмов автоматизированной обработки объемных выборок кристаллографических данных для поиска взаимосвязей «состав-структура-свойство».

Актуальность работы не вызывает сомнений, она ориентирована на стратегию сокращения срока разработки новых материалов за счет аккумуляции кристаллохимической и структурной информации и автоматизации её обработки с помощью современных методов машинного обучения. Автор решил задачи, связанные с разработкой геометрических дескрипторов кристаллической структуры и ее структурных строительных блоков, основанных, в том числе, на представлениях о полиэдрах Вороного; были усовершенствованы алгоритмы и написано оригинальное программное обеспечение для прогнозирования свойств и дизайна структуры координационных соединений, обладающих заданными физико-химическими свойствами, в частности, необходимой пористостью или плотностью. Решались задачи, связанные с анализом каналов проводимости в Na-содержащих структурах и классификацией кристаллических структур интерметаллидов. Реализация и апробация предложенных в диссертации решений производилась на базе известного и продолжающего набирать популярность среди ученых, работающих с кристаллографическими и кристаллохимическими данными, программном комплексе ToposPro и интернет-сервисах TopCryst. Впечатляют масштабы выборок и объемы обработанных данных, представленных в работе, это усиливает достоверность выводов, сделанных в диссертации.

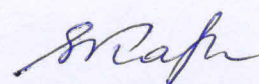
Научная новизна полученных в диссертации результатов не вызывает сомнений. В работе предложена новая прогностическая модель оценки степени окисления атомов-комплексообразователей исходя из геометрических дескрипторов на основе полиэдров Вороного; разработаны оригинальные подходы к количественному анализу свободного пространства в структуре кристаллов, богатых полостями. Развита теория топологических представлений кристаллических структур.

Практическая и научная значимость работы обоснована тем, что разработанный инструментарий и ряд предложенных методологий позволяют осуществлять направленный поиск и дизайн потенциальных твердых электролитов.

Диссертационная работа представляет собой оригинальное научное исследование, выполненное на современном уровне с использованием новейших инструментов, в том числе алгоритмов, разработанных автором. Совокупность полученных результатов вносит большой вклад в развитие востребованной методологии, ориентированной на автоматизированный анализ и эффективное прогнозирование физико-химических свойств кристаллических соединений, в том числе, свойств металлорганических координационных полимеров для задач разработки материалов с заданными функциональными свойствами. Материалы диссертации, изложенные в публикациях автора, представляют интерес для специалистов и обучающихся по направлениям физической химии, хемоинформатики; их целесообразно использовать в образовательных программах подготовки кадров высшей квалификации.

Таким образом, диссертация Шевченко Александр Петровича «Теория и методы компьютерного геометрико-топологического анализа и прогнозирования строения и физических свойств координационных соединений», представленная на соискание ученой степени доктора химических наук, подготовлена на актуальную тему, содержит новые научные результаты и представляет собой законченную научно-квалификационную работу и полностью соответствует требованиям, предъявляемым ВАК при Минобрнауки России к докторским диссертациям, и соответствует п. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г., в ред. от 25.01.2024, а её автор, Шевченко Александр Петрович, заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Доктор химических наук (1.4.4 – Физическая химия), доцент,
профессор кафедры теоретической и прикладной химии ЮУрГУ,
в.н.с., заведующий НИЛ Многомасштабного моделирования
многокомпонентных функциональных материалов
Барташевич Екатерина Владимировна
тел. +79123137705; e-mail: bartashevichev@susu.ru



20.03.2025

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», 454080, Россия, г. Челябинск, пр. Ленина, 76. Тел.: +7 (351) 267-99-00
e-mail: info@susu.ru, сайт: <http://www.susu.ru>

