

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Шевченко Александра Петровича на тему «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

Топологические методы анализа кристаллических структур сложных соединений с различными типами химических связей являются важным инструментом, который применяется при решении самых разных задач современной структурной химии. Получив свое развитие непосредственно от зрительного описания строения отдельных соединений, данный подход, в настоящее время, широко использует компьютерные вычислительные мощности, которые позволяют массово анализировать большое число структурных данных и сопоставлять их по многим параметрам. Это позволило по-новому взглянуть на особенности строения отдельных крупных групп соединений (в том числе структурно сложных, таких как интерметаллиды, координационные полимеры, цеолиты и металл-органические каркасы), что привело к установлению фундаментальных стереохимических и топологических закономерностей среди них. Все это, в настоящее время, широко применяется при направленном поиске соединений с заданной структурой и физическими свойствами, среди которых возможно установить потенциальных кандидатов для дальнейшего рассмотрения в качестве перспективных материалов.

Одним из важнейших инструментов современных топологических методов анализа является программный продукт ToposPro, который позволяет проводить наиболее полную диагностику и анализ кристаллических структур различных по типу строения соединений и проводить их кристаллохимическое сравнение. Следуя за развитием как теоретических, так и экспериментальных методов и подходов, данная программа постоянно совершенствуется, что, во многом, связано с творческой деятельностью А.П. Шевченко. Диссертационная работа А.П. Шевченко посвящена разработке теоретических моделей строения кристаллических веществ, алгоритмов и методов автоматизированной обработки объемных выборок кристаллографических данных для поиска закономерностей «состав-структура-свойство» кристаллов, а также прогнозирования их строения и физических свойств на примере координационных соединений (КС) и их важнейшего подкласса, металл-органических координационных полимеров (МОКП).

В качестве небольших вопросов хотелось бы отметить следующее:

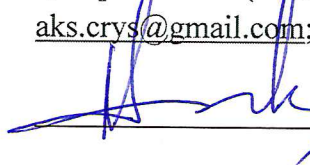
1. Определение степени окисления катионов в соединениях (особенно неорганических, с преобладанием ионных и ковалентных связей, например, солях металлов) во многом связано с концепцией баланса валентных усилий, значения которых бывает трудно напрямую определить из топологических вычислений без учета конкретных расстояний катион-анион. Возможен ли учет валентных усилий на основе анализа площади граней и объема полиэдров Вороного-Дирихле? Интеграция двух подходов в одном программном пакете позволило бы качественно повысить анализ строения кристаллических структур соединений, содержащих катионы в нескольких степенях окисления, а также определения их формального заряда.

2. Важным разделом диссертации является применение топологических методов анализа при описании транспортных свойств неорганических соединений, который позволяет устанавливать пути миграции рабочих ионов в кристаллических структурах. Возможно ли в дальнейшем учитывать рабочие ионы сложной геометрии при анализе путей миграции, что существенно упростит поиск различных матриц (для иммобилизации, сорбции и т.д.) не только отдельных ионов в приближении сферы, но и молекул с необычной геометрией.

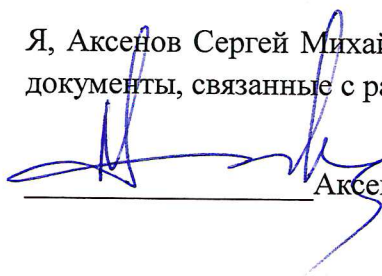
Высказанные вопросы и комментарии не являются существенными, а носят лишь уточняющий характер. По теме диссертации опубликовано 2 главы в монографиях, а также 35 статей в рецензируемых научных изданиях, индексирующихся в международных базах WoS и Scopus. Кроме того, получены 18 свидетельств о регистрации программ для ЭВМ и баз данных.

Нет никаких сомнений, что диссертационная работа Александра Петровича Шевченко по своей актуальности, научной новизне, объёму выполненных исследований, научной и практической значимости полученных результатов является завершённой научно-квалификационной работой и соответствует требованиям пп. 9–11, 13 и 14 Постановления Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 «Положения о присуждении учёных степеней», предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени доктора наук, а её автор Александр Петрович Шевченко заслуживает присуждения учёной степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Аксенов Сергей Михайлович, доктор химических наук (1.4.4 – «Физическая химия»)  
Заведующий лабораторией арктической минералогии и материаловедения,  
Центр наноматериаловедения, Федеральный исследовательский центр «Кольский научный центр РАН» (ФИЦ КНЦ РАН). 184209, г. Апатиты, ул. Ферсмана, д. 14. e-mail: [aks.crys@gmail.com](mailto:aks.crys@gmail.com); [s.aksenov@ksc.ru](mailto:s.aksenov@ksc.ru)

  
Аксенов С.М.

Я, Аксенов Сергей Михайлович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

  
Аксенов С.М.

Дата составления отзыва: 10.03.2025



Подпись   
ПО МЕСТУ РАБОТЫ УДОСТОВЕРЯЮ

НАЧАЛЬНИК ОБЩЕГО ОТДЕЛА  
ФИЦ КНЦ РАН

  
Л.В. КОСТРУБ  
10 03 2025 ГОДА