

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации 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

Диссертация Шевченко А. П. посвящена разработке и апробации методов компьютерного геометрико-топологического анализа и прогнозирования строения и физических свойств координационных соединений. Автором решены многочисленные теоретические, методологические, программно-информационные (программы, алгоритмы, базы знаний и др.) задачи, позволившие создать и апробировать универсальный геометрико-топологический подход к моделированию и анализу различных кристаллических структур. Диссертант показал его эффективность на примерах прогнозирования строения и физических свойств координационных соединений, оценки пористости кристаллических структур, поиска Na-ионных твердых электролитов, а также в решении других насущных задач физической химии, кристаллохимии и материаловедения.

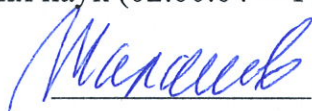
Рассматривая труд Александра Петровича Шевченко в целом, подчеркну, что содержание диссертации и полученные результаты далеко выходят за рамки частных химических наук и имеют, по моему мнению, общенаучное значение. Поясню свою точку зрения. И в нашей стране, и в мире давно уже работает немало замечательных ученых, занимающихся кибернетическими методами прогноза новых материалов на основе многочисленных идеологий машинного обучения и опирающихся в своих исследованиях на современные базы структурных и различных физико-химических данных. Однако исследования А.П. Шевченко концептуально отличаются от известных подходов, имеют свое неповторимое “лицо”, связанное с оригинальной тополого-геометрической концепцией строения кристаллов. По существу, в этой пионерской работе предложен новый **тополого-кибернетический язык** для изучения структуры вещества. Этот язык органично в комплексе включает в себя не только новые (разработанные автором) и известные методы кристаллохимии и кристаллографии, но и современные методы интеллектуального анализа данных, программные средства использования информационных хранилищ структурных строительных блоков и дескрипторов, а также механизмы их пополнения новыми данными. Представленный подход является универсальным и не ограничен приведенными иллюстрирующими примерами. Считаю, что рассматриваемая работа является **крупным научным достижением** и важным этапом теоретических материаловедческих исследований замечательной научной школы профессора Владимира Анатольевича Блатова.

Таким образом, можно заключить, что в рецензируемой научно-квалификационной работе Шевченко А.П. содержится решение актуальной научной задачи, имеющей важное теоретическое и практическое значение для развития

физической химии, химии твердого тела, координационной химии, а также материаловедения и физики конденсированного состояния.

Диссертационная работа «Теория и методы компьютерного геометрико-топологического анализа и прогнозирования строения и физических свойств координационных соединений» представляет собой законченную научно-квалификационную работу и полностью соответствует критериям Положения о присуждении ученых степеней, в т.ч. п. 9, утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (в действующей редакции с дополнениями и изменениями), предъявляемым к работам, представленным на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор, Александр Петрович Шевченко заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Профессор кафедры «Общая химия и технология силикатов» ФГБОУ ВО «Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова», доктор химических наук (02.00.04 – Физическая химия), профессор

 Таланов
Валерий Михайлович

Я, Таланов Валерий Михайлович, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Подпись профессора В.М. Таланова заверяю:

Ученый секретарь Совета вуза

26.02.2025 г.



Холодкова
Нина Николаевна

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова»

Адрес университета: 346428, Россия, Ростовская область, г. Новочеркасск, ул. Просвещения 132, ЮРГПУ (НПИ)

Официальный сайт в сети интернет: www.npi-tu.ru

Тел.: (86352)55105,

E-mail: valtalanov@mail.ru