

## ОТЗЫВ

научного консультанта о работе Федорова Игоря Александровича по теме диссертации «Проявления межмолекулярных взаимодействий в структурных, электронных и механических свойствах молекулярных кристаллов полициклических ароматических углеводородов, энергетических материалов и аминокислот», представленной к защите на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Диссертация И. А. Федорова «Проявления межмолекулярных взаимодействий в структурных, электронных и механических свойствах молекулярных кристаллов полициклических ароматических углеводородов, энергетических материалов и аминокислот» выполнена на кафедре теоретической физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский государственный университет».

В 2004 г. Федоров И. А. с отличием окончил Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Кемеровский государственный университет" по специальности «Физика». В 2004-2007 гг. учился в очной аспирантуре КемГУ. В 2008 г. под моим руководством защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Научные интересы Федорова И. А. связаны с применением современных теоретических и вычислительных методик для исследования структурных, упругих и электронных свойств систем в которых ключевую роль играют ван-дер-ваальсовы взаимодействия. К данным системам относятся изучаемые в данной диссертационной работе молекулярные кристаллы полициклических ароматических углеводородов, энергетических материалов и аминокислот. Интерес научного сообщества к данным объектам не уменьшается уже на протяжении длительного времени, что указывает на актуальность темы диссертации.

За время работы над диссертацией Федоровым И.А. были получены важные и интересные научные результаты. В рамках теории функционала плотности, используя схемы учета ван-дер-ваальсового взаимодействия, были выполнены исследования влияния давления на структурные и электронные свойства характерных представителей молекулярных кристаллов. Учет межмолекулярных взаимодействий позволил корректно определить равновесные структуры исследуемых молекулярных кристаллов, а полученные результаты имеют хорошее согласие с имеющимися экспериментальными

данными. Также были вычислены полные наборы упругих постоянных для исследуемых молекулярных кристаллов, что позволило определить их базовые механические свойства.

Научный уровень И.А. Федорова подтверждается публикациями в ведущих российских и зарубежных журналах. За время работы над диссертацией И.А. Федоров опубликовал в соавторстве 32 статьи в рецензируемых отечественных и зарубежных журналах. На основании материалов 20 статей была написана данная диссертационная работа. Результаты работы обсуждались на Всероссийских и международных конференциях.

И.А. Федоров – инициативный и добросовестный исследователь. Научную работу он совмещает с преподавательской деятельностью, являясь доцентом кафедры теоретической физики Кемеровского государственного университета.

Диссертация И. А. Федорова представляет собой целостное научное исследование, объединенное единой физической идеей. Работа является законченным исследованием, выполненным на актуальную тему. Основные результаты работы получены впервые и обладают ценностью для понимания роли слабых ван-дер-ваальсовых сил в структурных, электронных и механических свойствах молекулярных кристаллов.

На основании вышесказанного считаю, что диссертация И. А. Федорова «Проявления межмолекулярных взаимодействий в структурных, электронных и механических свойствах молекулярных кристаллов полициклических ароматических углеводородов, энергетических материалов и аминокислот» удовлетворяет всем требованиям ВАК, предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор Федоров Игорь Александрович заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

### Научный консультант

доктор физико-математических наук,  
профессор, почетный работник высшего  
профессионального образования РФ,  
заведующий кафедрой общей и  
экспериментальной физики ФГБОУ ВО  
«Кемеровский государственный  
университет»



Ю.Н. Журавлев  
1 сентября 2023 г.