

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Н. А. Кабановой «Кристаллохимические методы анализа свободного пространства в структуре кристалла и их применение для исследования некоторых классов твердых электролитов и цеолитов», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности «неорганическая химия – 02.00.01.».

Судя по автореферату и опубликованным работам, Н.А. Кабановой решены все поставленные перед ней задачи: модифицированы программы комплекса TOPOS для расчета систем пустот и каналов в структурах неорганических твердых электролитов, основанные на модели разбиения кристаллического пространства полиэдрами Вороного – Дирихле и на теории тайлингов; для 3130 литий содержащих соединений рассчитаны системы пустот и каналов, в результате создана кристаллоструктурная база данных из 381 соединения с литий-проводящими каналами и показано, что еще 13 соединений обладают каналами могут быть твердыми электролитами; создан атлас тайлингов из известных 225 цеолитных каналов; атлас занесен в базу данных цеолитных каркасов Международной цеолитной ассоциации (IZA); в топологическом подходе установлен ряд закономерностей для цеолитных систем, проведен анализ 274611 гипотетических цеолитных каркасов и найдено 16 каркасов, перспективных для синтеза новых цеолитов и цеолитоподобных материалов.

Н.А Кабанова воспитана Самарской кристаллохимической школой, работы которой находятся в поле зрения наших интересов и заслуживают пристального внимания не только кристаллохимиков, но и химиков тоже, поскольку результаты обобщений для больших классов соединений всегда предсказательны для синтетиков..

Кристаллоструктурный анализ, составляющий основное содержание работы, выполнен на высоком профессиональном уровне. Один вопрос к диссертанту все-таки остается: для чего была необходима модернизация программ? Требуется ли она для каждого нового типа соединений, или это еще доработка в целом комплекса программ кристаллохимического анализа?

Большой интерес представляет взгляд на структуру как упаковку стабильных «строительных блоков», автором указаны органические молекулы, геометрия которых допускает их использование в роли темплатов при дизайне новых цеолитов. Важно то, что эта работа служит стимулом для дальнейших исследований.

Считаю, что кандидатская диссертация Н.А. Кабановой полностью соответствуют предъявляемым ВАК требованиям, а ее автор вполне заслуживает присуждения искомой степени кандидата химических наук по специальности «неорганическая химия – 02.00.01.».

30 сентября 2015 г.

Ведущий научный сотрудник
ФГБУН Института неорганической химии
им. А.В.Николаева СО РАН, д.т.н.
Нина Васильевна Подберезская
630090 Новосибирск-90,
Проспект акад. Лаврентьева, 3
ИНХ СО РАН
e-mail podberez@niic.nsc.ru



Подпись *Н.В. Подберезская*
заверяю _____
Ученый секретарь ИНХ СО РАН
" 30 " 09 2015 г.

Н.В.Подберезская

Почтовый адрес: Проспект акад. Лаврентьева, 3 ИНХ СО РАН, Новосибирск, 630090