

Отзыв об автореферате 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 учёной степени кандидата химических наук
по специальности 02.00.01 – неорганическая химия

Твёрдые катионные проводники, природные цеолиты и их синтетические аналоги – важнейшие материалы современной техники, представляющие также и фундаментальный интерес. Поэтому данное исследование, посвящённое их кристаллохимическому анализу, безусловно, является весьма актуальным. Автором проделана большая работа по обоснованию методологии и её использованию для анализа кристаллических структур. Не будучи специалистом по цеолитам, не решаюсь комментировать соответствующую часть работы (хотя объём и глубина исследования впечатляет), а сосредоточусь на катионных проводниках. По этой части есть следующие замечания.

1) В фразе «Систематический поиск неорганических структур, обладающих системой каналов миграции катионов лития, до настоящего момента не проводился» (с. 3) правильнее было бы написать «до начала данной работы», а не «до настоящего момента». Ведь после первых публикаций автора (2006-2008) появился ряд других, что, кстати, подтверждает актуальность тематики, например:

M. Yashima. J. Ceram. Soc Japan. 2009. V. 117. P. 1055.

M. Sale, M. Avdeev. J. Appl. Cryst. 2012. V. 45. P. 1054.

M. Avdeev et al. Solid State Ionics. 2012. V. 225. P. 43.

R. Xiao et al. Sci. Repts. 2015. V. 5. 14227.

В работе Авдеева и др. в поисках каналов миграции Li^+ , Na^+ , K^+ , Ag^+ , Cu^+ просеяна вся база ICSD (около 13 тысяч структур с этими ионами). Правда, при этом, как и у Xiao et al., использован принципиально иной подход, основанный на методе валентности связи. Но он в случае лития представляется более адекватным, поскольку для такого малого иона (в отличие от Na^+ и K^+), стерический фактор не является главным ограничением проводимости и не может служить надёжным критерием для разграничения хороших и плохих Li^+ -ионных проводников.

2) В связи с этим вызывает удивление, что в центр внимания поставлены именно литий-содержащие фазы, а из твёрдых электролитов с крупными катионами, где стерический фактор действительно является решающим, рассмотрен лишь KAlO_2 .

3) Вряд ли стоило использовать рассматриваемый подход, основанный на фиксированных позициях атомов, к структурам с островными тетраэдрическими ионами (Li_2SO_4 , Li_3PO_4), которые могут вращаться, обеспечивая катионную проводимость по механизму гребного колеса (paddle wheel).

Указанные замечания не снижают общей положительной оценки работы. Основные результаты и выводы представляются хорошо обоснованными. Семь публикаций в уважаемых журналах достаточно полно отражают содержание диссертации. Полагаю, что работа Н.А. Кабановой удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 02.00.01 – неорганическая химия.

Канд. хим. наук, доцент химического факультета

Южного федерального университета
344090, Ростов-на-Дону, ул. Р. Зорге, 7.

В.Мали

Налбандян Владимир Бабкенович
e-mail: vbn@sfedu.ru

Подпись В.Б. Налбандяна удостоверяю

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Южный федеральный университет»

Личную подпись

ЗАВЕРЯЮ:

Ведущий специалист по работе с персоналом



« 12 / 20 17 »