

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 003.051.01
на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института
неорганической химии им. А.В. Николаева
Сибирского отделения Российской академии наук, ФАНО
ПО ДИССЕРТАЦИИ **Кабановой Наталья Александровны**
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА ХИМИЧЕСКИХ НАУК

аттестационное дело № _____
дата защиты 14 октября 2015 г. Протокол № 12

О присуждении *Кабановой Наталье Александровне*, гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «*Кристаллохимические методы анализа свободного пространства в структуре кристалла и их применение для исследования некоторых классов твердых электролитов и цеолитов*» в виде рукописи по специальности 02.00.01 – неорганическая химия (химические науки) принята к защите *29 апреля 2015 г., протокол № 7*, диссертационным советом Д 003.051.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН) (630090, г. Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, д. 3, действующего на основании приказа Минобрнауки РФ от 11.04.2012г. № 105/нк).

Соискатель *Кабанова Наталья Александровна*, гражданка России, 1984 года рождения, на момент защиты диссертации работает в лаборатории кристаллохимии и дизайна кристаллов Межвузовского научно-исследовательского центра по теоретическому материаловедению в должности младшего научного сотрудника. В период подготовки диссертации с ноября 2006 г. по сентябрь 2014 г. обучалась в очной аспирантуре при ФГБОУ ВПО «Самарский государственный университет». В 2006 году окончила Самарский государственный университет по специальности – химия.

Диссертация выполнена на кафедре неорганической химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Самарский государственный университет».

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор *Блатов Владислав Анатольевич* работает профессором кафедры физической химии и хроматографии химического факультета ФГБОУ ВПО «Самарский государственный университет».

Официальные оппоненты:

Лапшин Андрей Евгеньевич, гражданин России, доктор химических наук, заместитель директора по научной работе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Ордена Трудового Красного Знамени Института химии силикатов им. И.В. Гребенщикова Российской академии наук, г. Санкт-Петербург (ИХС РАН);

Вировец Александр Викторович, гражданин России, доктор химических наук, старший научный сотрудник лаборатории кристаллохимии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск – дали **положительные отзывы** о диссертации.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» дала **положительное заключение**. Заключение составлено доцентом кафедры неорганической химии, к.х.н. М.Г. Розовой, заведующим лаборатории неорганической кристаллохимии кафедры неорганической химии проф., д.х.н., чл.-к. РАН Е.В. Антиповым, заместителем декана химического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова по научной работе д.х.н., профессором В.И. Тишковым и утверждено проректором ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» **д.ф.-м.н., профессором Федяниным Андреем Анатольевичем**. В заключении указано, что работа «...соответствует критериям, установленным «Положением о порядке присуждения ученых степеней», утвержденным Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842 (п. 9), предъявляемым к кандидатским диссертациям, и ее автор *Кабанова Наталья Александровна* бесспорно заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.01 – неорганическая химия...». Отзыв о диссертационной работе Кабановой Н.А. обсужден и утвержден на заседании лаборатории неорганической кристаллохимии кафедры неорганической химии Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова (протокол №18 от 28.05.2015).

По теме диссертации соискатель имеет 7 опубликованных статей, из них 3 – в российских журналах, рекомендованных ВАК и 4 статьи в рецензируемых международных журналах, входящих в систему цитирования Web of Science. Общий объем опубликованных работ составляет 63 стр. (3,9 печ.л.). 7 работ опубликованы в материалах всероссийских и международных конференций и симпозиумов.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Anurova N.A. (Kabanova N.A.), Blatov V.A., Pyushin G.D., Blatova O.A., Ivanov-Schitz A.K., Dem'yanets L.N. Migration maps of Li⁺ cations in oxygen-containing compounds // Solid State Ionics. – 2008. – V. 179. N. 39. – P. 2248-2254.

2. Воронин В.И., Суркова М.Г., Шехтман Г.Ш., Анурова Н.А. (Кабанова Н.А.), Блатов В.А. Механизм проводимости в низкотемпературной модификации KAlO₂ // Неорганические материалы. – 2010. – Т. 46. №11. – С. 1360-1367.

3. Anurova N.A. (Kabanova N.A.), Blatov V.A., Pyushin G.D., Proserpio D. Natural Tilings for Zeolite-Type Frameworks // J. Phys. Chem. Section C. – 2010. – V. 114. N. 22. – P. 10160-10170.

На автореферат диссертации поступило 4 отзыва. Все отзывы положительные и содержат замечания. Отзывы поступили: от к.х.н. **Проскурниной Н.В.**, старшего научного сотрудника лаборатории нейтронных исследований вещества Института

физики металлов УрО РАН; от д.х.н. **Подберезской Нины Васильевны**, вед. науч. сотр. ФГБУН Института неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН (ИНХ СО РАН); от д.ф.-м.н., **Андреевой Александры Викторовны**, вед. науч. сотр. Института проблем технологии микроэлектроники РАН (ИПТМ РАН); от к.х.н. **Налбандяна Владимира Бабкеновича**, доцента химического факультета Южного федерального университета.

Замечания к автореферату объясняются ограниченным объемом автореферата и невозможностью представить полную информацию о проведенных исследованиях. Замечаний к выводам диссертации и положениям, выносимым на защиту, нет. Все отзывы заканчиваются выводом, что диссертационная работа Н.А. Кабановой **полностью соответствует** требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям ВАК РФ, а ее автор Н.А. Кабанова заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.01 – неорганическая химия.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается компетентностью оппонентов в области неорганической химии, в особенности в области кристаллохимического и структурного анализа в теоретических работах и области синтеза твердых электролитов и неорганических микропористых соединений в экспериментальных работах, что подтверждается наличием публикаций оппонентов и ведущей организации в данной области исследований.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработаны два новых автоматизированных кристаллохимических метода анализа свободного пространства в кристаллических структурах неорганических твердых электролитов и цеолитов, основанные на модели разбиения структуры кристалла полиэдрами Вороного-Дирихле (*геометрический подход*) и на теории тайлингов (*топологический подход*);

предложено использование созданных методов для прогнозирования новых литий-проводящих суперионных проводников и цеолитных каркасов;

доказана перспективность использования разработанных подходов для поиска структур, обладающих доступной для миграции катионов бесконечной системой полостей и каналов, и для дизайна моделей новых цеолитов. Выявлено 13 соединений, являющихся новыми потенциальными твердыми электролитами и установлено 16 гипотетических каркасов, являющихся перспективными для синтеза новых цеолитов и цеолитоподобных материалов;

создан атлас тайлингов, содержащий данные о пустотах и каналах для всех известных к настоящему времени 225 цеолитных каркасов. Атлас опубликован в базе данных по цеолитным каркасам Международной цеолитной ассоциации IZA и в настоящее время используется в экспериментальных работах по изучению адсорбционных свойств;

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказаны преимущества геометрического подхода при прогнозировании катион-проводящих свойств в неорганических ионных соединениях любого химического состава, позволяющего детально описывать траектории движения

подвижных катионов, и преимущества топологического подхода при составлении полных карт полостей и каналов в микропористых неорганических веществах, предоставляющего возможность определить все минимальные пустоты в структуре в соответствии со строгим алгоритмом;

применительно к проблематике диссертации результативно использованы кристаллохимические методы анализа, основанные на модели разбиения структуры кристалла полиэдрами Вороного-Дирихле и на теории тайлингов;

изучены системы пустот и каналов для 3130 тернарных и кватернарных литий-кислородсодержащих соединений. Создана кристаллоструктурная база данных из 381 соединения, геометрия которых допускает свободную миграцию ионов лития. Среди них 368 соединений имеют экспериментальные данные о литий-ионной проводимости, а 13 соединений являются потенциальными твердыми электролитами;

изучены закономерности в формировании цеолитных каркасов, позволившие провести анализ 274611 гипотетических цеолитов и выявить 16 каркасов, перспективных для синтеза новых цеолитов и цеолитоподобных материалов;

проведена модернизация алгоритмов расчета системы полостей и каналов в кристаллических структурах для исследования неорганических твердых электролитов и микропористых соединений.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

разработаны методы расчета системы полостей и каналов в кристаллических структурах позволяющие установить наличие предпосылок для ионной проводимости в неорганических соединениях. Разработанные методы в настоящее время используются в работе других лабораторий (Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН, г. Санкт-Петербург, лаборатория нейтронных исследований вещества Института физики металлов УрО РАН, химический факультет Университетского Колледжа Лондона (Department of Chemistry, University College London)), для изучения кислородсодержащих соединений с натрий-, калий-, рубидий-катионной проводимостью;

создана кристаллоструктурная база данных, содержащая 13 литий-кислородсодержащих неорганических соединений, являющихся потенциальными твердыми электролитами и служащих основой для создания новых литий-ионных материалов;

создан атлас, содержащий данные о топологии полостей в цеолитных каркасах и используемый в работах других лабораторий для изучения адсорбционных свойств цеолитов;

создана кристаллоструктурная база данных, содержащая 16 гипотетических каркасов, являющихся основой для синтеза новых цеолитов и цеолитоподобных материалов.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что:

теория построена на известных, широко используемых концепциях кристаллохимического анализа и топологических представлений строения кристаллических веществ;

Экспериментальная часть работы выполнена при помощи комплекса программного обеспечения, созданного сотрудниками Самарского государственного университета и позволяющего проводить обработку первичных кристаллоструктурных данных и расчет геометрико-топологических структурных характеристик для большой выборки (несколько тысяч) соединений.

Достоверность полученных результатов определяется точностью и надежностью современных методов кристаллохимических расчетов, использованных в работе, и статистически значимым объемом изученных выборок.

Результаты расчетов систем пустот и каналов хорошо *согласуются* с экспериментальными данными по определению катион-проводящих свойств соединений. Результаты расчетов тайлингов для цеолитных каркасов *включены* в базу данных по цеолитным каркасам Международной цеолитной ассоциации IZA.

Личный вклад соискателя состоит в том, что:

автор непосредственно участвовал в разработке алгоритмов расчета систем полостей и каналов в кристаллических структурах, проведении расчетов систем пустот и каналов для 3130 тернарных и кватернарных литий-кислородсодержащих соединений, подготовке данных для создания атласа тайлингов цеолитных каркасов, формулировке всех выявленных кристаллохимических закономерностей и выводов. Подготовка публикаций и докладов по теме диссертационной работы проводилась совместно с соавторами и научным руководителем.

Диссертационный совет Д 003.051.01 на заседании *14 октября 2015 г., протокол №12* пришел к выводу о том, что диссертация соответствует п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней» от 24 сентября 2013 г. № 842, т.е. представляет собой законченную научно-квалификационную работу, в которой содержатся описание двух новых кристаллохимических методов анализа свободного пространства в структуре кристалла и решения задач, связанных с поиском потенциальных твердых электролитов и с отбором гипотетических каркасов как основы для синтеза цеолитов и цеолитоподобных материалов, и принял решение присудить *Кабановой Наталье Александровне* ученую степень кандидата химических наук по специальности 02.00.01 – неорганическая химия.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 26 (двадцати шести) человек, из них 7 (семь) докторов наук по специальности 02.00.01 – неорганическая химия участвовавших в заседании и голосовании, из 33 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение учёной степени – 26 (двадцать шесть), против присуждения учёной степени – 0 (нет), недействительных бюллетеней – 0 (нет).

Председ:
чл.-к. РА

Ученый
д.ф.-м.н.
14 октябр



Федин Владимир Петрович

линный Владимир Акимович