

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.086.01, СОЗДАННОГО НА БАЗЕ  
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ  
ИНСТИТУТ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ ИМ. А.В. НИКОЛАЕВА СИБИРСКОГО  
ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК, МИНОБРНАУКИ РОССИИ, ПО  
ДИССЕРТАЦИИ АКСЕНОВА СЕРГЕЯ МИХАЙЛОВИЧА НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ  
СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 18 мая 2023 года № 11

О присуждении Аксенову Сергею Михайловичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени доктора химических наук.

Диссертация «Модулярность и топология минералов и неорганических соединений со смешанными анионами» в виде научного доклада по специальности 1.4.4. Физическая химия принята к защите 15.02.2023 г. (протокол заседания № 3) диссертационным советом 24.1.086.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН), Минобрнауки России, 630090, г. Новосибирск, пр-кт Академика Лаврентьева, д. 3, действующего на основании приказа Минобрнауки РФ от 11.04.2012 г. № 105/нк.

Соискатель Аксенов Сергей Михайлович, 12 октября 1988 года рождения, работает заведующим Лабораторией арктической минералогии и материаловедения Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федеральный исследовательский центр «Кольский научный центр Российской академии наук» (ФИЦ КНЦ РАН), Минобрнауки РФ.

Диссертацию «Кристаллические структуры высокоупорядоченных минералов из поздних ассоциаций, связанных с магматическими комплексами» на соискание ученой степени кандидата геолого-минералогических наук Аксенов Сергей Михайлович защитил в 2012 году в диссертационном совете Д 501.002.06 при Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова.

Диссертация в виде научного доклада на соискание ученой степени доктора химических наук выполнена в Лаборатории арктической минералогии и материаловедения ФИЦ КНЦ РАН, Минобрнауки РФ.

Научный консультант – доктор физико-математических наук Чуканов Никита Владимирович, главный научный сотрудник Лаборатории кинетической калориметрии Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН», г. Черноголовка.

**Официальные оппоненты:**

**Шевельков Андрей Владимирович**, член-корреспондент РАН, доктор химических наук, заведующий Кафедрой неорганической химии Химического факультета, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»;

**Кузьмичева Галина Михайловна**, доктор химических наук, профессор Кафедры цифровых и аддитивных технологий, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «МИРЭА – Российский технологический университет», г. Москва;

**Дмитриенко Владимир Евгеньевич**, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник отдела теоретических исследований Института кристаллографии им. А.В. Шубникова, Федеральное государственное учреждение «Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук», г. Москва

дали **положительные** отзывы на диссертацию.

**Ведущая организация** автономная некоммерческая образовательная организация высшего образования «Сколковский институт науки и технологий», г. Москва в своем **положительном** отзыве, подписанном Кабатяньским Григорием Анатольевичем, доктором физико-математических наук, вице-президентом по науке и академическому сотрудничеству, составленным Огановым Артемом Ромаевичем, доктором физико-математических наук, профессором РАН, указала, что диссертационная работа С.М. Аксенова на тему «Модулярность и топология минералов и неорганических соединений со смешанными анионами», по объему выполненных исследований, актуальности, научной новизне и практической значимости полностью удовлетворяет требованиям ВАК РФ, предъявляемым к докторским диссертациям (п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 в действующей редакции), а ее автор, Аксенов Сергей Михайлович, заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия. Отзыв на диссертацию обсужден и одобрен на научном семинаре лаборатории дизайна материалов Сколковского института науки и технологий (от 27 апреля 2023 г.).

Соискатель имеет 65 опубликованных работ в рецензируемых научных изданиях, в том числе 38 статей в журналах Q1-Q2, опубликованные за последние 10 лет. Все журналы входят в Перечень изданий, рекомендованных ВАК РФ для публикации результатов диссертационных исследований, и индексируются международными информационно-библиографическими базами Web of Science и Scopus. Количество работ, опубликованных в изданиях первого и второго квартилей за последние 10 лет, является достаточным для представления диссертации в виде научного доклада. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения о работах, опубликованных соискателем.

#### **Статьи в журналах Q1-Q2, опубликованные за последние 10 лет:**

1. Chukanov N.V., **Aksenov S.M.**, Rastsvetaeva R.K. Structural chemistry, IR spectroscopy, properties, and genesis of natural and synthetic microporous cancrinite- and sodalite-related materials: a review // *Microporous and Mesoporous Materials*. – 2021. – V. 323. – 111098. <https://dx.doi.org/10.1016/j.micromeso.2021.111098> (Q1)
2. Chukanov N.V., Pasero M., **Aksenov S.M.**, Britvin S.N., Zubkova N.V., Yike L., Witzke T. Columbite supergroup of minerals: nomenclature and classification // *Mineralogical Magazine*. – 2022. <https://dx.doi.org/10.1180/mgm.2022.105> (Q2)
3. Krivovichev S.V., Krivovichev V.G., Hazen R.M., **Aksenov S.M.**, Avdontceva M.S., Banaru A.M., Gorelova L.A., Ismagilova R.M., Korniyakov I.V., Kuporev I.V., Morrison S.M., Panikorovskii T.L., Starova G.L. Structural and chemical complexity of minerals: an update // *Mineralogical Magazine*. – 2022. – V. 86. – P. 183–204. <https://dx.doi.org/10.1180/mgm.2022.23> (Q2)
4. Chukanov N.V., **Aksenov S.M.**, Pekov, I.V. Infrared spectroscopy as a tool for the analysis of framework topology and extra-framework components in microporous cancrinite- and sodalite-related aluminosilicates // *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. – 2023. – V. 287. – № 1. – 121993. <https://dx.doi.org/10.1016/j.saa.2022.121993> (Q1)
5. Chukanov N.V., **Aksenov S.M.**, Pekov I.V., Chervonnaya N.A., Varlamov D.A., Ermolaeva V.N., Britvin, S.N. Ion exchange properties of natural titanium silicate caryochroite  $(\text{Na,Sr})_3\{(\text{Fe,Mg})^{2+}_{10}(\text{OH})_6[\text{TiO}(\text{Si}_6\text{O}_{17})(\text{OH})_{0.5}]_2\} \cdot 8\text{H}_2\text{O}$  with a 1D system of parallel wide channels: Experimental study and theoretical analysis of the topochemical mechanisms. *Microporous and Mesoporous Materials*. – 2021. – V. 312. – 110776. <https://dx.doi.org/10.1016/j.micromeso.2020.110776> (Q1)
6. Topnikova A.P., Eremina T.A., Belokoneva E.L., Dimitrova O.V., Volkov A.S., **Aksenov S.M.** Synthesis, crystal structure and topological features of microporous “anti-zeolite”  $\text{Yb}_3(\text{BO}_3)(\text{OH})_6 \cdot 2.1\text{H}_2\text{O}$ , a new cubic borate with isolated  $\text{BO}_3$ -groups // *Microporous and Mesoporous Materials*. – 2020. – V. 300. – 110147. <https://dx.doi.org/10.1016/j.micromeso.2020.110147> (Q1)
7. Zhang L., **Aksenov S.M.**, Kokot A.M., Perry S.N., Olds T.A., Burns P.C. Crystal chemistry and structural complexity of uranium(IV) sulfates: synthesis of  $\text{U}_3\text{H}_2(\text{SO}_4)_7 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$  and

- $U_3(UO_2)_{0.2}(SO_4)_6(OH)_{0.4} \cdot 2.3H_2O$  with framework structures by photochemical reduction of uranyl // *Inorganic Chemistry*. – 2020. – V. 59. – P. 5813–5817. <https://dx.doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c00385> (Q1)
8. Traustason H., **Aksenov S.M.**, Burns P.C. The lithium water configuration encapsulated by uranyl peroxide cage cluster  $U_{24}$  // *CrystEngComm*. – 2019. – V. 21. – P. 390–393. <https://dx.doi.org/10.1039/C8CE01774C> (Q1)
9. **Aksenov S.M.**, Chukanov N.V., Pekov I.V., Rastsvetaeva R.K., Hixon, A.E. Crystal structure and topological features of manganonaujakasite, a mineral with microporous heteropolyhedral framework related to AlPO-25 (ATV) // *Microporous and Mesoporous Materials*. – 2019. – V. 279. – P. 128–132. <https://dx.doi.org/10.1016/j.micromeso.2018.12.019> (Q1)
10. Hickam S., **Aksenov S.M.**, Dembowski M., Perry S.N., Trastasson H., Russell M., Burns P.C. Complexity of uranyl peroxide cluster speciation from alkali-directed oxidative dissolution of uranium dioxide. *Inorganic Chemistry*. – 2018. – V. 57. – P. 9296–9305. <https://dx.doi.org/10.1021/acs.inorgchem.8b01299> (Q1)
11. Dal Bo F., Kohlgruber T. Szymanowski J.E.S., **Aksenov S.M.**, Burns P.C.  $Rb_2[Ca(NpO_2)_2(PO_4)_2]$ , the first mixed alkali-alkaline earth metals neptunyl(V) phosphate: crystal chemistry and sheet stereoisomerism // *Crystal Growth and Design*. – 2018. – V. 18. P. 7254–7258. <https://dx.doi.org/10.1021/acs.cgd.8b01627> (Q1)
12. **Aksenov S.M.**, Mackley S.A., Deyneko D.V., Taroev V.K., Tauson V.L., Rastsvetaeva R.K., Burns P.C. Crystal chemistry of compounds with lanthanide based microporous heteropolyhedral frameworks: synthesis, crystal structures, and luminescence properties of novel potassium cerium and erbium silicates // *Microporous and Mesoporous Materials*. – 2019. – V. 284. – P. 25–35. <https://dx.doi.org/10.1016/j.micromeso.2019.04.006> (Q1)
13. Lazoryak B.I., **Aksenov S.M.**, Stefanovich S.Yu., Dorbakov N.G., Belov D.A., Baryshnikova O.V., Morozov V.A., Manylov M.S., Lin Z. Ferroelectric crystal  $Ca_9Yb(VO_4)_7$  in the series of  $Ca_9R(VO_4)_7$  nonlinear optical materials ( $R = REE, Bi, Y$ ) // *Journal of Material Chemistry C*. – 2017. – № 5. – P. 2301–2310. <https://dx.doi.org/10.1039/C7TC00124J> (Q1)
14. Kosmyna M.B., Matejchenko P.V., Nazarenko B.P., Shekhvotsov A.N., **Aksenov S.M.**, Spassky D., Mosunov A.V., Stefanovich S.Yu. Novel laser crystals in  $Ca_9Y(VO_4)_{7-x}(PO_4)_x$  mixed system // *Journal of Alloys and Compounds*. 2017. – V. 708. – P. 285–293. <https://dx.doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.02.219> (Q1)
15. **Aksenov S.M.**, Rastsvetaeva R.K., Rassylov V.A., Bolotina N.B., Taroev V.K., Tauson V.L. Synthesis, crystal structure and luminescence properties of novel microporous europium silicate  $HK_6Eu^{3+}[Si_{10}O_{25}]$  with a framework formed of nano-scale tubes. *Microporous and Mesoporous Materials*. 2013. – V. 182. – P. 95–101. <https://dx.doi.org/10.1016/j.micromeso.2013.08.021> (Q1)
16. Charkin D.O., Dolgikh V.A., Omelchenko T.A., Vaitieva Yu.A., Volkov S.N., Deyneko D.V., **Aksenov S.M.** Symmetry description of the complex polytypism of layered rare-earth tellurites and related selenites: the case of introducing magnetically active transition metal cations // *Symmetry*. – 2022. – V. 14. – № 10. – 2087. <https://dx.doi.org/10.3390/sym14102087> (Q1)
17. Charkin D.O., Volkov S.N., Dolgikh V.A., **Aksenov S.M.** Potassium rare-earth tellurite chlorides: a new branch from the old root // *Solid State Sciences*. – 2022. – V. 129. – 106895. <https://dx.doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2022.106895> (Q2)
18. Chukanov N.V., Vigasina M.F., Rastsvetaeva R.K., **Aksenov S.M.**, Mikhailova J.A., Pekov I.V. The evidence of hydrated proton in eudialyte-group minerals based on Raman spectroscopy data // *Journal of Raman spectroscopy*. – 2022. – V. 53. – P. 1188–1203. <https://dx.doi.org/10.1002/jrs.6343> (Q2)
19. **Aksenov S.M.**, Chukanov N.V., Pekov I.V., Nelyubina Yu.V., Varlamov D.A., Kogarko L.N. On the isomorphism of sodium at the  $M2$  site in the eudialyte-group minerals: The crystal structure of Mn-deficient manganoeudialyte and the problem of the existence of the  $^{M2}Na$ -dominant analogue of eudialyte // *Minerals*. – 2022. – V. 12. – № 8. – 949. <https://dx.doi.org/10.3390/min12080949> (Q2)

20. **Aksenov S.M.**, Mironova J.S., Yamnova N.A., Volkov A.S., Dimitrova O.V., Gurbanova O.A., Deyneko D.V., Blatov V.A., Krivovichev S.V. Polymorphism and topological features of compounds with the general formula  $A^{+1-x}B^{2+}_x\{M^{2+}_xM^{3+}_{1-x}[\text{BP}_2\text{O}_8(\text{OH})]\}$  (where  $x = 0, 1$ ): Synthesis and structure refinement of  $\text{Rb}\{\text{V}[\text{BP}_2\text{O}_8(\text{OH})]\}$ , analysis of the ion-migration paths, and comparative crystal chemistry of vanadium borophosphates // *J. Solid State Chemistry*. – 2022. – V. 308. – 122831.  
<https://dx.doi.org/10.1016/j.jssc.2021.122831> (Q2)
21. **Aksenov S.M.**, Antonov A.A., Deyneko D.V., Krivovichev S.V., Merlino S. Polymorphism, polytypism, and modular aspect of compounds with the general formula  $A_2M_3(\text{TO}_4)_4$  ( $A = \text{Na}, \text{Rb}, \text{Cs}, \text{Ca}$ ;  $M = \text{Mg}, \text{Mn}, \text{Fe}^{3+}, \text{Cu}^{2+}$ ;  $T = \text{S}^{6+}, \text{P}^{5+}$ ): OD (order-disorder), topological description, and DFT-calculations // *Acta Crystallographica B*. – 2022. – V. 78. – P. 61–69.  
<https://dx.doi.org/10.1107/S2052520621009136> (Q2)
22. **Aksenov S.M.**, Kabanova A.A., Chukanov N.V., Panikorovskii T.L., Blatov V.A., Krivovichev S.V. The role of local heteropolyhedral substitutions in the stoichiometry, topological characteristics, and ion-migration paths in the eudialyte-related structures: A quantitative analysis // *Acta Crystallographica B*. – 2022. – V. 78. – P. 80–90.  
<https://dx.doi.org/10.1107/S2052520621010015> (Q2)
23. **Aksenov S.M.**, Kuznetsov A.N., Antonov A.A., Yamnova N.A., Krivovichev S.V., Merlino S. Polytypism of compounds with the general formula  $\text{Cs}\{\text{Al}_2[\text{TP}_6\text{O}_{20}]\}$  ( $T = \text{B}, \text{Al}$ ): OD (order-disorder) description, topological features, and DFT-calculations // *Minerals*. – 2021. – V. 11. – № 7. – 708. <https://dx.doi.org/10.3390/min11070708> (Q2)
24. **Aksenov S.M.**, Yamnova N.A., Kabanova N.A., Volkov A.S., Gurbanova O.A., Deyneko D.V., Dimitrova O.V., Krivovichev S.V. Topological features of the alluaudite-type framework and its derivatives: synthesis and crystal structure of  $\text{NaMnNi}_2(\text{H}_2\text{P}_3\text{O}_4)_3$  // *Crystals*. – 2021. – V. 11. – № 3. – 237. <https://dx.doi.org/10.3390/cryst11030237> (Q2)
25. **Aksenov S.M.**, Ryanskaya A.D., Shchapova Yu. V., Chukanov N.V., Vladykin N.V., Votyakov S.L., Rastsvetaeva R.K. Crystal chemistry of lamprophyllite-group minerals from the Murun alkaline complex (Russia) and pegmatites of Rocky Boy and Gordon Butte (USA): Single crystal X-ray diffraction and Raman spectroscopy study // *Acta Crystallographica B*. – 2021. – V. 77. – P. 287–298. <https://dx.doi.org/10.1107/S2052520621000354> (Q2)
26. Chukanov N.V., Gritsenko Yu.D., **Aksenov S.M.**, Pekov I.V., Varlamov D.A., Pautov L.A., Vozchikova S.A., Ksenofontov D.A. Odikhinchaite,  $\text{Na}_9\text{Sr}_3[(\text{H}_2\text{O})_2\text{Na}]\text{Ca}_6\text{Mn}_3\text{Zr}_3\text{NbSi}(\text{Si}_{24}\text{O}_{72})\text{O}(\text{OH})_3(\text{CO}_3)\cdot\text{H}_2\text{O}$ , a new eudialyte-group mineral from the Odikhincha intrusion, Taimyr Peninsula, Russia // *Minerals*. – 2020. – V. 10. – № 12. – 1062.  
<https://dx.doi.org/10.3390/min10121062> (Q2)
27. Kohlgruber T.A., Mackley S.A., Dal Bo F., **Aksenov S.M.**, Burns P.C. The role of 1-ethyl-3-methylimidazolium diethyl phosphate ionic liquids in uranyl phosphate compounds // *J. Solid State Chemistry*. – 2019. – V. 279. – 120939. <https://dx.doi.org/10.1016/j.jssc.2019.120938> (Q2)
28. Dal Bo F., **Aksenov S.M.**, Burns P.C. A novel family of microporous uranyl germanates: framework topology and complexity of the crystal structures // *J. Solid State Chemistry*. – 2019. – V. 271. P. 126–134. <https://dx.doi.org/10.1016/j.jssc.2018.12.044> (Q2)
29. **Aksenov S.M.**, Borovikova E.Yu., Mironov V.A., Yamnova N.A., Volkov A.S., Ksenofontov D.A., Gurbanova O.A., Dimitrova O.V., Deyneko D.V., Zvereva E.A., Maximova O.V., Krivovichev S.V., Burns P.C., Vasiliev A.N.  $\text{Rb}_2\text{CaCu}_6(\text{PO}_4)_2\text{O}_2$ , a novel oxophosphate with a shchurovskyite-type topology: synthesis, structure, magnetic properties and crystal chemistry of rubidium copper phosphates // *Acta Crystallographica B*. – 2019. – V. 75. P. 903–913.  
<https://dx.doi.org/10.1107/S2052520619008527> (Q2)
30. **Aksenov S.M.**, Bykova E.A., Rastsvetaeva R.K., Chukanov N.V., Makarova I.P., Hanfland M., Dubrovinsky L. Microporous crystal structure of labuntsovite-Fe and high-pressure behavior up to 23 GPa // *Acta Crystallographica B*. – 2018. V. 74. – P. 1–11.  
<https://dx.doi.org/10.1107/S205252061700498X> (Q2)
31. Smith P.A., **Aksenov S.M.**, Jablonski S., Burns P.C. Structural unit charge density and molecular cation templating effects on orientational geometric isomerism and interlayer spacing in 2-D uranyl sulfates // *J. Solid State Chemistry*. – 2018. – V. 266. – P. 286–296.

<https://dx.doi.org/10.1016/j.jssc.2018.07.028> (Q2)

32. Chukanov N.V., **Aksenov, S.M.**, Rastsvetaeva R.K., Kristiansen R., Pekov I.V., Belakovskiy D.I., Van K.V., Bychkova Y.V., Britvin, S.N. Crystal structure of the novel OH-dominant gadolinite-(Y) analogue,  $(Y,Ca)_2(Fe,\square)Be_2Si_2O_8(OH,O)_2$  from Heftejern pegmatite, Norway // *Acta Crystallographica B*. – 2017. – V. 73. – P. 899–906.

<https://dx.doi.org/10.1107/S2052520617006588> (Q2)

33. Chukanov N.V., **Aksenov S.M.**, Rastsvetaeva R.K., Schäfer C., Pekov I.V., Belakovskiy D.I., Scholz R., de Oliveira L.C.A., Britvin S.N. Eleonorite,  $Fe^{3+}_6(PO_4)_4O(OH)_4 \cdot 6H_2O$ : Validation as a mineral species and new data // *Mineralogical Magazine*. – 2017. – V. 81. – № 1. – P. 61–76.

<https://dx.doi.org/10.1180/minmag.2016.080.070> (Q2)

34. Chukanov N.V., **Aksenov S.M.**, Rastsvetaeva R.K., Lyssenko K.A., Belakovskiy D.I., Färber G., Möhn G., Van K.V. Antipinite,  $KNa_3Cu_2(C_2O_4)_4$ , a new mineral species from a guano deposit at Pabellón de Pica, Chile // *Mineralogical Magazine*. – 2015. – V. 79. – № 5. – P. 1111–1121.

<https://dx.doi.org/10.1180/minmag.2015.079.5.07> (Q2)

35. Chukanov N.V., **Aksenov S.M.**, Rastsvetaeva R.K., Blass G., Varlamov D.A., Pekov I.V., Belakovskiy D.I., Gurzhiy V.V. Calcinaksite,  $KNaCa(Si_4O_{10}) \cdot H_2O$ , a new mineral from the Eifel volcanic area, Germany // *Mineralogy and Petrology*. – 2015. – V. 109. – № 4. – P. 397–404.

<https://dx.doi.org/10.1007/s00710-015-0376-4> (Q2)

36. Chukanov N.V., **Aksenov S.M.**, Rastsvetaeva R.K., Pekov I.V., Belakovskiy D.I., Britvin S.N. Möhnite,  $(NH_4)K_2(SO_4)_2$ , a new guano mineral from Pabellon de Pica, Chile // *Mineralogy and Petrology*. – 2015. – V. 109. – № 5. – P. 643–648. <https://dx.doi.org/10.1007/s00710-015-0395-1> (Q2)

37. Menezes Filho L.A.D., Chukanov N.V., Rastsvetaeva R.K., **Aksenov S.M.**, Pekov I.V., Chaves M.L.S.C., Richards R.P., Atencio D., Brandão P.R.G., Scholz R., Krambrock K., Moreira R.L., Guimarães F.S., Romano A.W., Persiano A.C., de Oliveira L.C.A., Ardisson J.D. Almeidaite,  $PbZn_2(Mn,Y)(Ti,Fe^{3+})_{18}O_{37}(OH,O)$ , a new crichtonite-group mineral, from Novo Horizonte, Bahia, Brazil // *Mineralogical Magazine*. – 2015. – V. 79. – № 2. – P. 269–283

<https://dx.doi.org/10.1180/minmag.2015.079.2.06> (Q2)

38. **Aksenov S.M.**, Rastsvetaeva R.K., Chukanov N.V., Kolitsch U. The crystal structure of calcinaksite  $KNa[Ca(H_2O)][Si_4O_{10}]$ , the first hydrous member of the litidionite group of silicates with  $[Si_8O_{20}]^{8-}$  tubes // *Acta Crystallographica B*. – 2014. – V. 70. – P. 768–775.

<https://dx.doi.org/10.1107/S2052520614012992> (Q2)

На диссертацию в виде научного доклада поступило двенадцать отзывов. Все отзывы положительные, три отзыва замечаний не содержат. Отзывы поступили от: **д.х.н., чл.-к. РАН Еремина Николая Николаевича**, заведующего Кафедрой кристаллографии и кристаллохимии, и.о. декана геологического факультета ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»; **д.ф.-м.н. Болотиной Надежды Борисовны** и **д.ф.-м.н. Макаровой Ирины Павловны**, ведущих научных сотрудников Лаборатории рентгеновских методов анализа и синхротронного излучения ФГУ «Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук»; **д.г.-м.н., профессора Филатова Станислава Константиновича**, почетного профессора Кафедры кристаллографии Института наук о Земле ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет» и **к.г.-м.н. Шаблинского Андрея Павловича**, старшего научного сотрудника Лаборатории структурной химии оксидов ФГБУН Ордена Трудового Красного Знамени Института химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН; **д.х.н. Бубновой Риммы Сергеевны**, заведующей Лабораторией структурной химии оксидов и **к.х.н. Бирюкова Ярослава Павловича**, старшего научного сотрудника Лаборатории структурной химии оксидов ФГБУН Ордена Трудового Красного Знамени Института химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН; **д.г.-м.н. Дорогокушца Петра Ивановича**, главного научного сотрудника Лаборатории петрологии, геохимии и рудогенеза ФГБУН Института земной коры Сибирского отделения РАН; **д.х.н., профессора**

**Асланова Леонида Александровича**, профессора, заведующего Лабораторией структурной химии Кафедры общей химии Химического факультета ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»; **д.х.н., профессора Блатова Владислава Анатольевича**, заведующего Кафедрой общей и неорганической химии и **д.х.н. Александра Евгения Викторовича**, доцента Кафедры общей и неорганической химии ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет»; **д.х.н. Таусона Владимира Львовича**, заведующего Лабораторией моделирования геохимических процессов ФГБУН Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН; **д.х.н., профессора Хайкиной Елены Григорьевны**, главного научного сотрудника Лаборатории оксидных систем ФГБУН Байкальский институт природопользования СО РАН; **д.х.н., профессора Федорова Павла Павловича**, главного научного сотрудника Лаборатории технологии наноматериалов для фотоники ФГБУН Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН; **д.г.-м.н. Сийдры Олега Иоханнесовича**, профессора Кафедра кристаллографии Института наук о Земле ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет»; **д.х.н., профессора Белоконевой Елены Леонидовны**, профессора Кафедры кристаллографии и кристаллохимии Геологического факультета ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

*Замечания и вопросы к диссертации, отмеченные в отзывах:* почему кристаллическая структура лабунцовита-Fe стабильна до 25 ГПа, а измерения в алмазных наковальнях проводились *in situ* лишь до 22.5 ГПа; каким образом выделены производные аллюодитового каркаса; какой вывод по возможности применения полученных результатов на практике; в работе часто встречаются термины «тайл», «тайлинг», «натуральный тайлинг», но не приводятся строгие определения для них; как обосновывается выбор для анализа именно «натуральных тайлов» из бесконечного числа возможных; о какой энергетической стабильности идет речь для случая политипов и гибридных структур; какое количество кристаллических структур было расшифровано при участии диссертанта; какое число политипов было предсказано; как можно спрогнозировать, исходя из модулярного строения, наиболее энергетически стабильный политип; как определялась симметрия слоёв в сложных теллурит-галогенидах редких земель.

Замечания и вопросы носят уточняющий и рекомендательный характер и не ставят под сомнение достоверность полученных результатов и выводов. Все отзывы заканчиваются выводом, что диссертационная работа Аксенова Сергея Михайловича **полностью соответствует** требованиям, предъявляемым ВАК РФ к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

**Выбор официальных оппонентов и ведущей организации** обоснован компетентностью данных экспертов в области рентгеноструктурного и кристаллохимического анализа минералов и неорганических соединений сложной структуры, теоретической кристаллографии и кристаллохимии, что подтверждается наличием у оппонентов и сотрудников ведущей организации публикаций по данной тематике в профильных журналах.

**Диссертационный совет отмечает**, что на основании выполненных соискателем исследований:

**проведено** рентгеноструктурное исследование около 400 природных и синтетических неорганических соединений, характеризующихся наличием смешанных тетраэдрических и гетерополиэдрических каркасов или обладающих модулярным (в том числе политипным) строением;

**выполнен** теоретический анализ топологии кристаллических структур и сравнение тайлингов (MT-кластеров) гетерополиэдрических каркасов с тайлингами (T-кластерами) классических тетраэдрических цеолитов;

*изучен* полиморфизм смешанных каркасов и влияние локального гетерополиэдрического изоморфизма на топологию каркасов;

*продемонстрированы* возможности модулярного анализа кристаллических структур с выделением крупных стабильных фрагментов-модулей, которые являются родственными для значительного числа структур как природных, так и синтетических соединений;

*предсказаны* новые структурные типы на основе комбинации модулей различного типа.

**Теоретическая значимость исследования** обоснована тем, что:

*получена фундаментальная информация* о кристаллических структурах большого числа природных и синтетических неорганических соединений, что позволяет выявлять кристаллохимические закономерности их строения;

*показана* возможность широкого применения топологических расчетов для анализа особенностей строения цеолитоподобных материалов с гетерополиэдрическими каркасами, что дало возможность для их дальнейшего сравнения с классическими цеолитами, характеризующимися наличием тетраэдрических каркасов;

*показана* возможность применения методов модулярной кристаллографии и кристаллохимии, в сочетании с теоретическими топологическими расчетами, к известным структурам для предсказания новых гипотетических структурных типов соединений, а также для анализа их потенциальных физических и химических свойств;

*показана* возможность применения формализма OD (“*order-disorder*”) теории для описания политипов не только слоистых, но и каркасных структур.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики** подтверждается тем, что понимание принципов и кристаллохимических закономерностей строения природных и синтетических неорганических соединений *позволяет* предсказывать новые структурные типы соединений и анализировать их потенциальные физические и химические свойства.

*Продемонстрирована* роль модулярного подхода в современной неорганической кристаллохимии, который является мощным инструментом, позволяющим не только более детально анализировать известные структуры и находить между ними структурное родство, но также и предсказывать потенциально новые структуры, которые могут быть востребованы современным материаловедением;

*показана* роль топологического анализа при кристаллохимическом дизайне цеолитоподобных материалов со смешанными каркасами;

*установлены* принципы стехиометрии и строения микропористых соединений со смешанными каркасами различных типов.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила** высокий экспериментальный и теоретический уровень работы. Достоверность представленных результатов определяется использованием комплекса современных методов анализа состава, структуры и свойств исследованных природных и синтетических соединений, а также использованием для теоретических расчетов самых современных компьютерных программ, характеризующихся высокой воспроизводимостью результатов. Все полученные результаты и сделанные на их основе выводы находятся в согласии с опубликованными в научной литературе данными о кристаллохимии и структурных особенностях минералов и неорганических соединений со смешанными анионами. Результаты работы апробировались и обсуждались на всероссийских и международных конференциях.

**Личный вклад соискателя заключается** в постановке цели и задач исследований, планировании экспериментов, проведении рентгеноструктурных исследований природных и синтетических соединений, расшифровке их кристаллических структур и сравнительном кристаллохимическом анализе, установлении закономерностей строения между родственными соединениями, выявлении топологических особенностей, обобщении результатов, формулировке выводов и подготовке рукописей публикаций.

В ходе защиты диссертации были высказаны следующие критические замечания: в докладе не отражено четкое определение термина «тайл» и неясно отличие его значения от терминов «строительный блок» или «модуль», «группоид» от «группа» и других подобных.

Соискатель Аксенов С.М. ответил на задаваемые в ходе защиты вопросы и пояснил, что под тайлом в работе подразумевается обобщенный полиэдр, в котором вершина может быть инцидентна не только трем и более вершинам (как в обычном полиэдре), но и двум вершинам. Важнейшим свойством тайлов является способность заполнять пространство, образуя нормальное (грань к грани) разбиение – тайлинг. Отличие «тайла» от «строительного блока» или «модуля» связано с различной областью применимости данных терминов, так как первый относится к теории графов (используемой при анализе атомных сеток), в то время как второй оперирует реальными полиатомными группировками с учетом химических связей в них. «Группоид» является аналогом пространственной группы для описания симметрии OD-структур.

Диссертационный совет 24.1.086.01 на заседании 18 мая 2023 г., протокол № 11, пришел к выводу о том, что диссертация в виде научного доклада соответствует п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», то есть представляет собой законченную научно-квалификационную работу, в которой развиты принципы и подходы модулярной кристаллографии и кристаллохимии в комбинации с симметричным и тополого-симметричным OD-анализом, позволяющие на глубоком уровне устанавливать родство между известными кристаллическими структурами, предсказывать как различные упорядоченные (и неупорядоченные) политипы, так и всевозможные гибридные структуры, а в случае кристаллических структур с гетерополиэдрическими каркасами позволяет выявлять внутреннюю взаимосвязь между симметричными особенностями различных политипов и их топологией, что вносит вклад в современную структурную и физическую химию, и принял решение присудить Аксенову Сергею Михайловичу ученую степень доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 22 (двадцати двух) человек, из них 5 (пять) докторов наук по специальности 1.4.4. Физическая химия (химические науки), участвовавших в заседании, из 32 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение ученой степени – 18 (восемнадцать), против – 2 (два), недействительных бюллетеней – 2 (два).

Председатель диссертационного совета  
д.х.н., чл.-корр. РАН

Федин Владимир Петрович

Ученый секретарь диссертационного совета  
д.х.н., доцент

Потапов Андрей Сергеевич

18 мая 2023 г.



ЗАВЕРЯЮ  
УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ  
« 18 » 05 2023  
ФЕДИНА В.П.,  
ПОТАПОВА А.С.,  
О.А. ГЕРАСЬКО  
ИНХ СО РАН