

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

экспертной комиссии диссертационного совета Д 003.051.01 на базе ИНХ СО РАН по кандидатской диссертации **Кабановой Натальи Александровны** «Кристаллохимические методы анализа свободного пространства в структуре кристалла и их применение для исследования некоторых классов твердых электролитов и цеолитов»

Комиссия диссертационного совета Д 003.051.01 (по химическим наукам) на базе ФГБУН Института неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН в составе: председателя — доктора физико-математических наук **Борисова С.В.** и членов комиссии — доктора физико-математических наук **Громилова С.А.**, доктора физико-математических наук **Цыбули С.В.**, в соответствии с п. 25 Положения о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, утвержденного приказом Минобрнауки России от 13 января 2014 г. № 7, на основании ознакомления с кандидатской диссертацией **Кабановой Натальи Александровны** и состоявшегося обсуждения приняла следующее заключение:

1. Соискатель ученой степени кандидата химических наук соответствует требованиям пп. 2-4 Положения о порядке присуждения ученых степеней (утв. Постановлением Правительства России от 24.02.2013 г. №842), необходимым для допуска его диссертации к защите.
2. Диссертация на тему «Кристаллохимические методы анализа свободного пространства в структуре кристалла и их применение для исследования некоторых классов твердых электролитов и цеолитов» в полной мере соответствует специальности 02.00.01 – «физическая химия» (по химическим наукам), к защите по которой представлена работа.
3. Основные положения и выводы диссертационного исследования в полной мере изложены в 7 статьях в научных рецензируемых журналах и 5 тезисах докладов на научных конференциях, опубликованных **Кабановой Натальей Александровной**. Представленные соискателем сведения об опубликованных им работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, достоверны.
4. Оригинальность содержания диссертации составляет не менее 90% от общего объема текста; цитирование оформлено корректно; заимствованного материала, использованного в диссертации без ссылки на автора либо источник заимствования, не обнаружено; научных работ, выполненных соискателем ученой степени в соавторстве, без ссылок на соавторов, не выявлено.
5. Диссертационное исследование посвящено разработке и апробации новых кристаллохимических методов анализа свободного пространства в твердых электролитах и цеолитах, а также использованию созданных методов для прогнозирования новых литий-проводящих суперионных проводников и цеолитных каркасов. В работе разработаны два новых метода расчета систем полостей и каналов в структурах неорганических твердых электролитов, основанные на модели разбиения кристаллической структуры полиэдрами Вороного-Дирихле и на теории тайлингов. Рассчитаны системы пустот и каналов

для 3130 тернарных и кватернарных литий-кислородсодержащих соединений. Созданы кристаллоструктурные базы данных по соединениям, обладающим доступной для катионов лития системой каналов миграции, литий-кислородсодержащим соединениям, являющимся потенциальными твёрдыми электролитами, а также гипотетическим каркасам, перспективным для синтеза новых цеолитов и цеолитоподобных материалов. Результаты исследования имеют научную значимость и вносят вклад в понимание организации свободного пространства в кристаллических структурах неорганических твердых электролитов и цеолитов. В работе установлен ряд закономерностей в формировании цеолитных каркасов, позволивший выявить критерии для дизайна моделей новых цеолитов, на основе которых предложены 16 гипотетических каркасов, перспективных для синтеза новых цеолитов. Практическая значимость работы связана с разработкой системы критериев для прогнозирования ионной проводимости в кристаллах, а также адсорбционных свойств цеолитов.

Комиссия рекомендует:

1. Принять к защите на диссертационном совете Д 003.051.01 на базе ИНХ СО РАН кандидатскую диссертацию **Кабановой Натальи Александровны** на тему «Кристаллохимические методы анализа свободного пространства в структуре кристалла и их применение для исследования некоторых классов твердых электролитов и цеолитов»

2. Утвердить *официальными оппонентами:*

– доктора химических наук, старшего научного сотрудника Вировца Александра Викторовича, ФГБУН Института неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
– доктора химических наук, заместителя директора по научной работе Лапшина Андрея Евгеньевича, ФГБУН Ордена Трудового Красного Знамени Института химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН.

3. Утвердить в качестве *ведущей организации* – ФГБОУ ВПО «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова», химический факультет

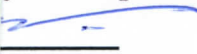
Борисов **Станислав**



Громилев **Сергей**



уля Сергей Васильевич



Борис
Подпись Громилев
заверяю
ученый секретарь
"24" 01