

**Отзыв** на автореферат диссертационной работы  
Кабановой Натальи Александровны  
«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 02.00.01 – неорганическая химия

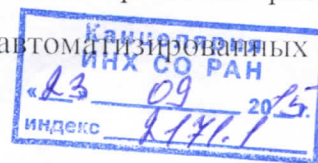
Известно, что геометрические и топологические характеристики свободного пространства в кристалле играют значимую роль в возникновении ионной проводимости в твердых электролитах. Для возникновения суперионной проводимости в структуре должны присутствовать каналы проводимости, по которым могут перемещаться ионы.

Многие годы цеолиты остаются одним из наиболее интенсивно исследуемых классов химических соединений, благодаря их большому структурному разнообразию и широкому практическому применению. Неорганические соединения с литий- и калий-ионной проводимостью также имеют практическую ценность как материалы для создания химических источников энергии. Именно поэтому кристаллохимикам приходится решать задачи по поиску пространственно доступных мест локализации подвижных ионов или молекул. Актуальность представленной работы не вызывает сомнений.

В связи с этим, целью работы явилась разработка и апробация новых кристаллохимических методов анализа свободного пространства в твердых электролитах и цеолитах, использование созданных методов для прогнозирования новых литий-проводящих суперионных проводников и цеолитных каркасов.

Для достижения поставленной в диссертационной работе цели автором проведен большой объем по разработке и сравнительному анализу методов автоматизированного расчета системы пустот и каналов в структурах неорганических твердых электролитов и цеолитов; проведены расчеты систем пустот и каналов для всех литий-кислородсодержащих соединений. В связи с этим научная новизна работы не вызывает сомнений, а полученные автором результаты обладают теоретической и практической ценностью.

Характеризуя работу в целом, следует отметить, что в ней представлен обширный материал, который может быть использован как исследователями, работающими в области неорганической химии, физической химии, химии твердого тела, так и материаловедцами и технологами для решения различных прикладных задач. Автором разработаны два новых автоматизированных метода



анализа свободного пространства для исследуемых классов твердых электролитов и цеолитов: топологический и геометрический. Подробно описан сравнительный анализ каждого из методов. Автором работы выявлен ряд закономерностей для натуральных тайлингов цеолитов.

Материал хорошо изложен и оформлен, посвящен актуальному вопросу, основная часть исследований выполнена и опубликована впервые. Материалы диссертации обсуждались на российских и международных конференциях. Автореферат отражает основное содержание работы. При прочтении автореферата возникли следующие вопросы и замечания:

1. Осуществлялись ли попытки синтеза новых цеолитов и им подобных материалов на основании полученных в работе данных?
2. В качестве замечания хотелось бы отметить не совсем удачное представление некоторых рисунков в автореферате (рис.6, рис.11). Достаточно сложно увидеть сетку пустот и каналов. Слишком мелкие надписи на рис.8 и рис.13 (нижний график).

В целом данная диссертация является завершенной научно-квалификационной работой. Сделанные в ней выводы обоснованы и логичны. По результатам проведенного исследования опубликовано 14 работ.

Считаю, что диссертация Кабановой Н.А. соответствует требованиям п.9 Положения о порядке присуждения ученых степеней (в редакции постановления Правительства Российской Федерации от 24.09.13 № 842), предъявляемым к кандидатским диссертациям. Автор Кабанова Наталья Александровна, безусловно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.01 – неорганическая химия.

Старший научный сотрудник  
лаборатории нейтронных исследований вещества  
ИФМ УрО РАН  
К.х.н.

Проскурнина Наталья Владимировна

620990, г. Екатеринбург,  
ул. С.Ковалевской, 18



Подпись *Проскурнина*  
завещаю  
Руководитель общего отдела  
*Лямина* Н.Ф. Лямина  
11 05 2015 г.