

О Т З Ы В

на автореферат диссертации *Кабановой Н.А.*

«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
(специальность 02.00.01 – неорганическая химия)

Актуальность и новизна представленной работы не вызывают сомнений. Высокофункциональные, знание-содержащие материалы с заданными свойствами приобретают решающее практическое значение. Для поисков таких материалов необходимы новые методы и подходы. Работа Кабановой Н.А. представляет *инновационное решение* (т.е. шаг на пути к внедрению и коммерциализации научных результатов). Работа важна для классификации, прогнозирования и поиска новых системных свойств широкого класса перспективных каркасных материалов, таких как твердые электролиты и цеолиты. *Оригинальна постановка задачи* диссертационной работы: кристаллохимический анализ свободного кристаллического пространства методами *структурного моделирования* на основе геометрического и топологического подходов с помощью комплекса программ «ТОПОС». В работе соискателя впервые проведены расчеты систем пустот и каналов, построены миграционные карты для литий (калий)-кислородсодержащих твердых электролитов и созданы базы данных натуральных тайлингов для цеолитов. Однозначность разбиения пространства методом Вороного-Дирихле, определение натуральных строительных единиц, а также большой объем выполненных расчетов и моделей характеризует *надежность полученных результатов*. На многочисленных примерах, в автореферате показана *универсальность* представленных подходов. Выявленные системные свойства, позволяют прогнозировать гипотетические структуры, перспективные для синтеза новых твердых электролитов и цеолитов, что характеризует *практическую значимость работы*.

По реферату имею ряд замечаний:

- 1) Неоднократно отмечая практическую ценность выбранных объектов исследования, автор нигде не приводит конкретные цифры, характеризующие наиболее значимые свойства (например, ионная проводимость для твердых электролитов, удельная свободная поверхность для цеолитов и др.).
- 2) Вызывает удивление, что для Li, имеющего один из самых маленьких ионных радиусов, при оценке значимых элементарных пустот и каналов в литий (калий)-кислородсодержащих твердых электролитах принимаются значения (Li- 1.3Å, K – 1.7Å). Поскольку приведенные в автореферате (с.11) расстояния Li-O (1.8Å) и K-O (2.3Å), то для каркасных ионов (O) получаются необычно малые значения радиусов,

что, вероятно, может привести к ошибкам в оценках критических размеров свободных мест, по которым могут перемещаться подвижные ионы. Из автореферата непонятно какая система ионных радиусов используется в работе.

- 3) В целом, хотелось бы, чтобы в автореферате была представлена не только констатация интересных фактов и закономерностей, выявленных в результате моделирования и расчета, а установлены причинно-следственные связи и общность наблюдаемых системных свойств исследуемых материалов. Например, если при формулировке критериев отбора значимых пустот геометрические факторы изложены достаточно ясно, то роль вскользь упомянутых физических факторов (возможность электростатического отталкивания одноименно заряженных ионов, коэффициент деформации γ) практически не объяснена. Вероятно, при анализе миграционных карт нужно учитывать и другие факторы, например, способность к поляризации каркасной структуры и подвижных ионов.

Причинно-следственные связи важны при анализе анизотропии проводимости по оценке размерности миграционных карт геометрическими и топологическими методами, а также при анализе симметрии каркас-образующих и цементирующих тайлов в натуральных тайлингах цеолитов.

Последнее замечание носит характер пожелания дальнейшей работы в перспективном научном направлении.

Сделанные замечания не снижают положительной оценки. Основные положения диссертационной работы опубликованы в научных журналах с высоким импакт-фактором, результаты работы докладывались и обсуждались на представительных научных конференциях.

Считаю, что представленная работа соответствует требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а ее автор, Кабанова Наталья Александровна, заслуживает присвоения ученой степени кандидата химических наук.

*Доктор физико-математических наук, проф.
ведущий научный сотрудник. ИПТМ РАН*



А.В. Андреева

*Подпись А.В. Андреевой заверяю
Ученый секретарь Института проблем технологии
микрорелектроники РАН, оф. 11*



октябрь 2015



А.Н. Редькин