

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

экспертной комиссии диссертационного совета 24.1.086.01 на базе ИНХ СО РАН по диссертации на соискание ученой степени доктора химических наук в виде научного доклада **Аксенова Сергея Михайловича «Модулярность и топология минералов и неорганических соединений со смешанными анионами»** по специальности 1.4.4. Физическая химия

Комиссия диссертационного совета 24.1.086.01 на базе ФГБУН Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН в составе: председателя — доктора физико-математических наук **Громилова Сергея Александровича**, членов комиссии — доктора химических наук **Наумова Николая Геннадьевича** и доктора химических наук **Романенко Галины Владиславовны**, в соответствии с п. 31 Положения о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук, утвержденного приказом Минобрнауки России от 10 ноября 2017 г. № 1093 (в ред. от 07.06.2021 г.), на основании ознакомления с диссертацией на соискание ученой степени доктора химических наук в виде научного доклада **Аксенова Сергея Михайловича** и состоявшегося обсуждения приняла **следующее заключение:**

- 1) соискатель ученой степени доктора химических наук соответствует требованиям п.п. 2-4 Положения о присуждении ученых степеней (утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.02.2013 г. № 842 в ред. от 20.03.2021 г.), необходимым для допуска его диссертации к защите;
- 2) диссертация в виде научного доклада на тему «Модулярность и топология минералов и неорганических соединений со смешанными анионами» в полной мере соответствует специальности 1.4.4. Физическая химия (химические науки), по которой работа представлена к защите;
- 3) основные положения и выводы диссертационного исследования отражены в 65 статьях, опубликованных **Аксеновым Сергеем Михайловичем** в российских и международных журналах, входящих в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени доктора наук и индексируемых в международных информационно-библиографических системах Web of Science и Scopus, в том числе в 34 статьях и 3 обзорах в научных изданиях первого (Q1) и второго (Q2) квартилей, а также доложены на всероссийских и международных научных конференциях. Представленные соискателем сведения об опубликованных им работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, достоверны;
- 4) оригинальность диссертации в виде научного доклада составляет 93 % от общего объема текста; цитирование оформлено корректно по всему тексту; заимствованного материала, использованного в диссертации без ссылки на автора либо источник заимствования, не обнаружено; научных работ, выполненных соискателем ученой степени в

соавторстве, но без ссылок на соавторов, не выявлено. Текст диссертации в виде научного доклада, представленный в диссертационный совет, идентичен тексту, размещенному на официальном сайте ИНХ СО РАН;

5) в диссертационной работе на основе структурных данных по представительной группе природных и синтетических соединений были развиты подходы модулярной кристаллохимии к неорганическим соединениям со смешанными анионами и описанию сложных гетерополиэдрических каркасов с применением современных топологических подходов. На основании полученных результатов были установлены закономерности строения микропористых цеолитоподобных фаз со смешанными каркасами, что позволило выявить их топологическое родство с классическими цеолитами с тетраэдрическими каркасами. Показано, что модулярность кристаллических структур неорганических соединений является распространенным явлением и хорошо согласуется с принципами минимальной структурной сложности. Кроме того, наличие в структурах повторяющихся модулей создает предпосылки к проявлению полисоматизма и формированию соответствующих полисоматических серий соединений с большим числом гибридных структур.

В работе принципы и подходы модулярной кристаллографии и кристаллохимии, использованные в сочетании с симметричным и тополого-симметричным OD-анализом позволили на более глубоком уровне установить родство между известными кристаллическими структурами, а также предсказать энергетически стабильные упорядоченные политипы и всевозможные гибридные структуры. В случае кристаллических структур с гетерополиэдрическими каркасами такой комплексный подход позволяет выявить более глубокую взаимосвязь между симметричными особенностями различных политипов и их топологией.

Таким образом, на примере большого числа природных и синтетических неорганических соединений в работе наглядно продемонстрированы широкие возможности для предсказания новых гипотетических структурных типов соединений и анализа их потенциальных физических и химических свойств, обеспечиваемые сочетанием современных методов модулярных кристаллографии и кристаллохимии с теоретическими топологическими расчетами. Все это определяет практическую значимость диссертационной работы, в которой решаются методологические проблемы поиска новых кристаллических структур и установления взаимосвязи состав-структура-свойства. Достоверность представленных данных определяется использованием комплекса современных методов анализа состава, строения и свойств изучаемых минералов и синтетических соединений. Все полученные результаты и сделанные на их основе выводы находятся в согласии с опубликованными в научной литературе данными по кристаллохимии и структурным особенностям неорганических фаз.

Работа вносит существенный вклад в развитие современной неорганической кристаллохимии и структурной химии природных и синтетических неорганических соединений, изучение их кристаллических структур методами рентгеноструктурного анализа, а также в применение топологических методов при сравнении и систематике неорганических соединений.

**Комиссия рекомендует:**

1) принять к защите на диссертационном совете 24.1.086.01 на базе ИНХ СО РАН диссертацию на соискание ученой степени доктора химических наук в виде научного доклада **Аксенова Сергея Михайловича** «Модулярность и топология минералов и неорганических соединений со смешанными анионами»;

2) утвердить официальными оппонентами:


– **Шевелькова Андрея Владимировича**, члена-корреспондента РАН, доктора химических наук, ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», г. Москва,


– **Кузьмичеву Галину Михайловну**, доктора химических наук, профессора, ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет», г. Москва,

– **Дмитриенко Владимира Евгеньевича**, доктора физико-математических наук, ФГУ «Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук», г. Москва;

3) утвердить в качестве ведущей организации автономную некоммерческую образовательную организацию высшего образования «Сколковский институт науки и технологий», г. Москва.

  
д.ф.-м.н. Громилов Сергей Александрович

  
д.х.н. Наумов Николай Геннадьевич

  
д.х.н. Романенко Галина Владиславовна



Подпись *Романенко Г.В.*  
заверяю.  
Зав. отделом кадров ИТЦ СО РАН  
*Г.И. Ермакова*  
Г.И. Ермакова

10.02.2023



Подпись *Громилова С.А., Наумова Н.Г.*  
заверяю *Г. Гераско С.А.*  
Ученый секретарь ИНХ СО РАН  
" 10 " 02 2023 г.