

ОТЗЫВ

**на автореферат диссертации Голова Андрей Анатольевича
«Взаимосвязь сорбционных и геометрико-топологических
кристаллоструктурных свойств цеолитов и каркасных координационных
полимеров», представленной на соискание ученой степени кандидата
химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия**

В настоящее время базы данных гипотетических и синтезированных кристаллических соединений насчитывают сотни тысяч структур. Такое огромное разнообразие делает чрезвычайно актуальной задачу направленного поиска среди известных кристаллических структур материалов с заданными характеристиками. Обширный класс микропористых кристаллических веществ широко используется в таких областях, как разделение газовых смесей, создание эффективных катализаторов и сорбентов, химических сенсоров и газовых контейнеров. Для нахождения корреляций между строением и сорбционными свойствами микропористых соединений требуется скрининг и анализ большого числа структур.

Диссертационная работа Голова А.А. посвящена анализу геометрических и топологических характеристик свободного пространства микропористых кристаллических соединений и выявлению взаимосвязи этих параметров с сорбционными свойствами материалов. В ходе выполнения работы автором разработаны универсальные методы анализа пористых материалов и проведена наиболее полная на настоящий момент систематика характеристик каналов и полостей. Особо стоит отметить, что автор самостоятельно провел программную реализацию нового подхода поиска и характеристики систем каналов в пористых материалах. Кроме того, проведена декомпозиция каркасных МОКП и систематика всех строительных блоков, которая в дальнейшем может быть использована при построении гипотетических структур МОКП. Отдельным существенным результатом работы стал расчет параметров полостей цеолитов и определение структуронаправляющих агентов, которые можно применять при синтезе.

Полученные автором результаты могут рассматриваться как существенный вклад в развитие фундаментальных исследований химии микропористых материалов, могут быть использованы для дизайна новых функциональных материалов, а также для направленного поиска сорбентов с заданными свойствами.

Основные результаты работы представлены в 8 статьях в рецензируемых научных журналах, входящих в список ВАК, 6 тезисах докладов на российских и международных конференциях, а также получено три свидетельства о государственной регистрации баз данных.

В качестве замечаний к автореферату можно отметить следующее:

Разработанные автором программы были бы интересны широкому кругу исследователей, в связи с чем, их было бы желательно подробно описать в отдельных публикациях. На настоящий момент такие публикации представлены в виде тезисов докладов, тогда как необходимы полные статьи по каждой программе.

В автореферате не проводится сравнение разработанного автором метода для расчета

геометрических и топологических характеристик свободного пространства пористых структур с известным подходом, реализованным в программном пакете Zeo++, который также основан на разбиении Вороного. Позволяет ли метод автора получить результаты быстрее или они более точно описывают экспериментальные сорбционные характеристики?

Нет пояснения, как проводился выбор каркасных МОКП для систематики строительных единиц. Видно, что в этом разделе использовалось меньше структур, чем при определении геометрических характеристик каналов и полостей, но не ясно, какие именно структуры были выведены из рассмотрения при декомпозиции МОКП на строительные блоки.

Указанные замечания носят скорее рекомендательный характер и не снижают положительного впечатления от диссертационной работы.

В целом автореферат и публикации позволяют заключить, что диссертационное исследование Голова А.А. «Взаимосвязь сорбционных и геометрико-топологических кристаллоструктурных свойств цеолитов и каркасных координационных полимеров» является законченной научной квалификационной работой, которая по актуальности, научной новизне, теоретической и практической значимости полностью отвечает требованиям пп. 9-14 Положения о порядке присуждения степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г., №842 (в ред. 01.10.2018). В рецензируемой научно-квалификационной работе содержится решение научной задачи по установлению взаимосвязей между геометрическими параметрами свободного пространства и сорбционными свойствами известных микропористых материалов. Это имеет значение для развития страны в сфере направленного поиска материалов с заданными характеристиками среди уже известных кристаллических соединений, что крайне важно для создания эффективных сорбентов и катализаторов в нефтехимической промышленности, химических датчиков и газовых контейнеров. Автор работы, Голова А.А., заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 - физическая химия.

Синельщикова Анна Александровна

Кандидат химических наук по специальностям 02.00.04 – физическая химия, 02.00.01 – неорганическая химия

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН

Старший научный сотрудник

119071, г. Москва, Ленинский проспект, д.31, корп. 4

тел. 8(495)955-48-74

e-mail: asinelschikova@gmail.com

Я, Синельщикова Анна Александровна, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Подпись Синельщиковой А.А. заверяю

Ученый секретарь ИФХЭ РАН Варшавская И.Г.

