

Отзыв на автореферат диссертации

Голова Андрея 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»

Работа Голова А.А. посвящена установлению взаимосвязи между сорбционными и геометрико-топологическими кристаллоструктурными свойствами кристаллических микропористых веществ – цеолитов и каркасных координационных полимеров. В настоящее время такие соединения очень востребованы и находят разнообразное применение как в промышленности (цеолиты в качестве сорбентов и носителей для катализаторов), так и в лабораторной практике (ковалентно-органические и металл-органические координационные полимеры (МОКП) в качестве перспективных катализаторов, газовых контейнеров и молекулярных сит). В настоящее время уже накоплены значительные массивы данных о соединениях, обладающих системой полостей и каналов, их кристаллическом строении и свойствах. Поэтому цель, сформулированная в работе, является весьма актуальной: используя имеющуюся информацию, установить взаимосвязь между геометрическими и топологическими параметрами систем полостей и каналов, структурными особенностями и сорбционными свойствами известных и гипотетических микропористых кристаллических материалов (цеолитов, каркасных металл-органических координационных полимеров, а также 3-периодических аллотропов углерода, полученных методами математического моделирования).

В ходе выполнения работы автор решал задачи разработки универсального метода расчёта геометрико-топологических характеристик полостей и каналов в структурах кристаллических веществ, разработки и программной реализации универсальных методов поиска внутрискелетных систем каналов, доступных для заданной молекулы-зонда, а также декомпозиции структур координационных полимеров на строительные единицы (СЕ), проведения расчета геометрико-топологических параметров систем полостей и каналов в известных структурах цеолитов, каркасных МОКП и гипотетических 3-периодических аллотропов углерода.

Автором был обоснован и реализован алгоритм расчёта геометрических и топологических характеристик свободного пространства в кристаллических структурах, основанный на разбиении Вороного. Разработанные программы позволяют проводить топологическую классификацию системы каналов, рассчитывать геометрические характеристики отдельных внутрискелетных полостей, проводить направленный поиск потенциальных структуронаправляющих агентов (СНА) с целью синтеза структуры цеолита с заданной топологией каркаса. Весьма интересен также разработанный автором и реализованный в виде компьютерной программы универсальный метод декомпозиции структур координационных полимеров на строительные единицы, что позволило провести систематизацию таких «строительных блоков» на большом массиве структурных данных, выявить определенные закономерности и выполнить дизайн трёх новых структур микропористых каркасных металл-органических координационных полимеров.

Значительное внимание в работе уделено апробации разработанных методов и их применению для поиска взаимосвязей сорбционных и геометрико-топологических свойств пористых материалов, а также для дизайна новых пористых веществ. Так,

апробация метода расчета пористости, проведенная на примере 70 структур МОКП показала хорошее соответствие со значениями, полученными методом газо-сорбционной порометрии. Эффективность разработанных методов была также продемонстрирована на примере сравнения экспериментально установленных и теоретически рассчитанных значений сорбционной емкости микропористых материалов.

Еще одно важное направление работы соискателя – установление взаимосвязей между сорбционными свойствами микропористых материалов и геометрико-топологическими параметрами систем полостей и каналов в их структуре, а также классификация и создания базы данных многоатомных СЕ и топологических мотивов их связывания в каркасных МОКП. В этом направлении автором тоже были достигнуты существенные результаты. Так, были систематизированы сведения о характеристиках полостей и каналов в структурах каркасных МОКП, 3-периодических гипотетических аллотропах углерода и структурах цеолитов. При этом были выявлены определенные закономерности. Так, было обнаружено, что, независимо от линейного размера молекул сорбата, их диффузия в большинстве структур цеолитов и каркасных металл-органических координационных полимеров имеет однонаправленный характер. Важным достижением диссертанта является также создание наиболее полной в мире базы данных SACADA, содержащей информацию по структуре и свойствам аллотропов углерода.

Достоверность полученных результатов не вызывают сомнений, так как предложенные соискателем алгоритмы были тщательно обоснованы и апробированы на большом массиве структурных данных для каркасных металл-органических координационных полимеров (МОКП), цеолитов и гипотетических 3-периодических аллотропов углерода, представленных в кристаллоструктурных базах данных CSD, ICSD, IZA, и других источниках научной информации.

Таким образом, в рецензируемой научно-квалификационной работе содержится решение важной и актуальной научной задачи создания универсального подхода, позволяющего определять геометрико-топологические характеристики полостей и каналов в структурах микропористых материалов (цеолитов и каркасных координационных полимеров), прогнозировать возможность транспорта молекул заданного размера через систему каналов и конструировать пористые материалы с заданными характеристиками. Важно подчеркнуть, что автор не только проанализировал уже существующий массив структурных данных, но и создал пакет программ, дающий в руки исследователю возможность искать пористые материалы с заданными свойствами и заниматься направленным дизайном новых микропористых материалов.

По содержанию автореферата хотелось бы высказать следующее пожелание.

В автореферате указано, что в работе проведен расчет барьеров и карт катионной миграции для 18 структур К-ионных кристаллических проводников, сделаны выводы о наличии ионной проводимости. Хотелось бы увидеть примеры результатов такого расчета в сравнении с расчетами, выполненными другими методами, и подтвержденными экспериментально.

В заключение следует отметить, что, автором проделана большая работа, основное содержание которой неоднократно докладывалось на Российских и международных конференциях, а также изложено в 8 статьях в рецензируемых журналах. Материал, представленный в автореферате, хорошо структурирован, снабжен достаточным количеством таблиц и иллюстраций, что существенно облегчает восприятие изложенной информации.

Таким образом, представленная работа обладает актуальностью, достоверностью, новизной, а также научной и практической значимостью полученных результатов, и, тем самым, отвечает всем квалификационным признакам ВАК РФ для кандидатских диссертаций. Работа соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, изложенным в «Положении о порядке присуждения ученых степеней» (пп. 9-13), утвержденном Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., и ее автор, Голов Андрей Анатольевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

доктор химических наук,
ведущий научный сотрудник
Химического факультета
МГУ им. М.В.Ломоносова

И.В. Морозов

ФИО

Морозов Игорь Викторович

Ученая степень, звание:

доктор химических наук, доцент

Шифр специальности:

неорганическая химия, 02.00.01

Основное место работы:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова», химический факультет Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Должность:

ведущий научный сотрудник кафедры неорганической химии Химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Почтовый адрес:

119991, Россия, Москва, Ленинские горы, д.1
корп.3, ГСП-1, МГУ имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, кафедра неорганической химии

Телефон:

+7(495)9392870

Адрес электронной почты:

morozov@inorg.chem.msu.ru

дхн, внс

18 сентября 2019 г.

И.В. Морозов

