

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации

Голова Андрея Анатольевича

*«Взаимосвязь сорбционных и геометрико-топологических кристаллоструктурных свойств
цеолитов и каркасных координационных полимеров»*

представленной на соискание степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04
– физическая химия

Изучение свойств микропористых материалов расчетными методами является одним из активно развивающихся направлений теоретического материаловедения, поскольку позволяет осмыслить результаты, полученные экспериментальными методами. Почти все статьи, выходящие в данной области, декларируют, что расчетные методы могут быть использованы для направленного дизайна материалов с заданными свойствами, но разрыв между результатами исследования структур, сгенерированных компьютерными алгоритмами и существующими только в памяти компьютера и данными экспериментальных методов, прежде всего, рентгеноструктурного анализа, еще слишком велик. Прежде всего, потому, что даже самые сложные и изощренные алгоритмы недостаточно хорошо учитывают сложность межатомных взаимодействий (от ковалентных связей до слабых ван-дер-ваальсовых взаимодействий), тем самым позволяя сгенерировать множество нереалистичных структур, на исследование которых затрачиваются усилия и по результатам изучения которых делаются далеко идущие выводы.

Диссертационную работу Голова А.А., на первый взгляд, тоже можно было бы заподозрить в отвлеченности от реальных проблем материаловедения микропористых материалов. Тем не менее, в ней поставлены актуальные задачи, которые могут быть интересны не только теоретикам, но и тем, кто занимается экспериментальными исследованиями (прежде всего, специалистам в рентгеновской дифракции, а также в электронной микроскопии и адсорбции газов). Автор работы применяет для исследований метод разбиения Вороного, использующий математическую топологию и позволяющий провести систематизацию большого числа экспериментальных данных и определить размеры полостей, доступных молекулам-гостям и катионам (в случае систем с ионной проводимостью). В ходе проведения исследований установлено, что размер полостей для 70 металлорганических каркасов отличается от экспериментальных данных в среднем на 11%, что следует признать хорошим согласием. Более того, для 18 структур с доказанной ионной проводимостью катионов калия рассчитаны барьеры переноса и проведено картирования

маршрутов их транспорта. Эти данные составляют основную научную новизну данного диссертационного исследования. Практическая значимость диссертационной работы заключается в создании новых методов поиска структуронаправляющих агентов и создании баз данных, которые доступны для использования широкому кругу исследователей.

По автореферату выдвинуты следующие замечания:

1. Характер изложения в автореферате зачастую очень сжатый, из-за чего упущены подробности, необходимые для понимания значения этой работы. В выводе 2 (стр. 22) написано, что «... независимо от линейного размера молекул сорбата, их диффузия в большинстве структур цеолитов и каркасных металл-органических координационных полимеров имеет однонаправленный характер». Вывод о таком «однонаправленном» характере диффузии газов для одномерных полостей (каналов) в координационных полимерах не выглядит столь очевидным, как это написано на стр. 15 (особенно при приложении высокого давления). Автору следует объяснить взаимосвязь структуры и характера диффузии более подробно.
2. На стр. 4 указано, что «Найдены взаимосвязи между сорбционными и геометрико-топологическими структурными свойствами пористых веществ». По моему мнению, это должно быть одним из важнейших результатов работы, однако в выводах эти взаимосвязи в явном виде не отражены. Читателю остается искать эти закономерности в тексте автореферата или диссертации.
3. Специалисты, занимающиеся уточнением структур, полученных в рентгеноструктурных исследованиях, используют метод определения размера полостей, встроенный в широко распространенное программное обеспечение, такое как программы PLATON, Mercury (входит в состав Кембриджской базы структурных данных) и OLEX2. Эти методы просты в использовании и наглядны. Метод же, используемый автором, требует умений работы с программой TOPOS, распространённость которой все же меньше, чем у PLATON, Mercury и OLEX2. Из текста автореферата непонятно, имеет ли метод, используемый автором, какие-либо преимущества перед вышеуказанными способами расчета.

Данные замечания не умаляют результатов и выводов диссертационного исследования. По актуальности, новизне и значимости полученных результатов, уровню решения научной задачи, практической значимости полученных результатов диссертационная работа отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (Постановление Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842, в редакции от 01.10.2018), а ее автор Голов Андрей Анатольевич

заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Ведущий научный сотрудник
Лаборатории рентгеноструктурных исследований
Федерального государственного учреждения науки
Института элементоорганических соединений
им. А.Н. Несмеянова
Российской академии наук,
доктор химических наук по специальностям
02.00.04 – физическая химия и 02.00.08 – химия элементоорганических соединений,
профессор РАН
Корлюков Александр Александрович

119991, Москва, ул. Вавилова., 28

Тел.: 8 (499) 135-92-14; e-mail: alex@xrlab.ineos.ac.ru

Корлюкова А.А. 

«19» сентября 2019 г.

Подпись А.А. Корлюкова заверяю.

Ученый секретарь, к.х.н.



Евгений

Тумакова Е.Н.