

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА
Д 002.107.01, СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО
ЗНАМЕНИ ИНСТИТУТА ХИМИИ СИЛИКАТОВ ИМ. И.В. ГРЕБЕНЩИКОВА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА ХИМИЧЕСКИХ НАУК**

О присуждении **Голову Андрею Анатольевичу**, гражданину Российской Федерации, ученой степени **кандидата химических наук**.

Диссертация «Взаимосвязь сорбционных и геометрико-топологических кристаллоструктурных свойств цеолитов и каркасных координационных полимеров» в виде рукописи по специальности 02.00.04 – физическая химия, химические науки, **принята к защите** «28» мая 2019 года, **протокол № 160**, диссертационным советом **Д 002.107.01 на базе** Федерального государственного бюджетного учреждения науки Ордена Трудового Красного Знамени Института химии силикатов им. И.В. Гребенщикова Российской академии наук (199034, г. Санкт-Петербург, наб. Адм. Макарова, д. 2, приказ о создании диссертационного совета от «19» июня 2014 года № 346/нк).

Соискатель **Голов Андрей Анатольевич**, 05 ноября 1990 года рождения, в 2014 году окончил Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Самарский государственный университет», химический факультет, кафедра физической химии и хроматографии, с присвоением квалификации «Химик».

Голов Андрей Анатольевич являлся аспирантом очной формы обучения в аспирантуре федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» с 01.09.2014 г. по 31.08.2018 г. (приказ о зачислении в аспирантуру № 1330-02-11 от 19.09.2014 г.) по специальности 02.00.04 – «физическая химия».

Работает младшим научным сотрудником в Межвузовском научно-исследовательском центре по теоретическому материаловедению при федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева».

Диссертация выполнена в Межвузовском научно-исследовательском центре по теоретическому материаловедению при федеральном государственном автономном

образовательном учреждении высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева».

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор Блатов Владислав Анатольевич, директор Международного научно-исследовательского центра по теоретическому материаловедению при Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Самарский государственный технический университет».

Официальные оппоненты:

Сийдра Олег Иоханнесович, доктор геолого-минералогических наук, профессор кафедры кристаллографии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»;

Волков Сергей Николаевич, кандидат химических наук, старший научный сотрудник лаборатории структурной химии оксидов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Ордена Трудового Красного Знамени Института химии силикатов им. И.В. Гребенщикова Российской академии наук **дали положительные отзывы на диссертацию.**

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» (МГУ) дала **положительный отзыв** на диссертационную работу Голова А. А., подготовленный и подписанный Еремином Николай Николаевичем, доктором химических наук, профессором РАН, заведующим кафедрой кристаллографии и кристаллохимии Геологического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, Белоконева Еленой Леонидовной, доктором химических наук, профессором кафедры кристаллографии и кристаллохимии Геологического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова и Вознесенским Евгением Арнольдовичем, доктором геолого-минералогических наук, профессором, заместителем декана Геологического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова по научной работе.

Отзыв ведущей организации обсужден на расширенном заседании кафедры кристаллографии и кристаллохимии Геологического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова 28 марта 2019 г (протокол №02/19 от 28.03.2019 г.). В отзыве **отмечается следующее.**

Диссертация Голова А. А. состоит в комплексном исследовании обширного класса кристаллических структур органических, неорганических и гибридных соединений, объединяемых наличием систем пор до 20 Å включительно. Соединения, попавшие по своим геометрико-топологическим характеристикам в этот класс (цеолиты, металл-органические полимеры, гипотетические аллотропные модификации углерода), могут являться эффективными сорбентами, молекулярными ситами, химическими датчиками, газовыми контейнерами и катализаторами. Таким образом, поставленная автором цель диссертации (установление взаимосвязи между геометрическими параметрами, структурными особенностями и сорбционными свойствами существующих и

гипотетических микропористых веществ с их последующей систематизацией в оригинальных базах данных, а также разработка специализированных программ для автоматизации геометрико-топологического анализа структур) является актуальной.

Отмечено, что содержание реферируемой диссертации изложено в логически последовательной форме. Диссертация оформлена в соответствии с требованиями ВАК РФ.

Тем не менее, в ходе обсуждения и анализа диссертации Голова А.А. возникли **следующие замечания по существу работы:**

1. Замечание, касающееся используемых двух наборов потенциалов межатомного взаимодействия (раздел 2.2.4). Диссертант никак не комментирует выбор именно этих, причем совершенно не похожих друг на друга наборов. Если набор работы [213], очевидно использует высоко-ионное приближение, то набор [214] должен оперировать зарядами на атомах, существенно меньшими их валентностей. Как тогда во втором случае соблюдается баланс зарядов для разных стехиометрических соотношений в конкретных соединениях? Сравнивались ли результаты расчета одного соединения с помощью разных наборов? Какова точность предсказания известных кристаллических структур при использовании этих наборов? К сожалению, обо всех этих особенностях используемых расчетных моделей приходится догадываться буквально «между строк» лаконичного авторского текста, что вызывает определенное огорчение.

2. Диссертант не приводит ни гиперссылки на созданные с его участием программные продукты Channel Analyser и MORsDEcomposer, ни описаний работы этих программ. Между тем, развернутая инструкция по использованию этих, очевидно, исключительно полезных для анализа кристаллических структур программных продуктов, украсили бы диссертационную работу. То же самое касается утверждения автора (стр. 59) о преимуществе предлагаемой им методики оценки геометрических характеристик свободного пространства над альтернативными подходами. Эти преимущества желательно было бы отразить в главе 2 несколькими тестовыми примерами.

3. В выводе 3 (стр. 89) утверждается, что карты катионной миграции были рассчитаны для 18 структур К-ионных кристаллических проводников, однако никаких карт в работе не представлено.

4. В таблице 3 (страница 47) в качестве источников структурных данных для 522 гипотетических 3-х мерных периодических аллотропных модификаций углерода упомянуто 422 литературных источника. Очевидно, их можно было бы привести (если не в списке литературы, то в виде отдельного приложения или, хотя бы, гиперссылки на соответствующий электронный документ). В противном случае эту информацию невозможно использовать.

Из замечаний по оформлению работы выделим следующее:

1) Диссертант никак не расшифровывает многочисленные сокращения в тексте (например, каркасов цеолитов, либо тайлингов), считая это само собой разумеющимся. Тем не менее, классификационные таблицы этих сокращений, безусловно, позволили бы читателям лучше ориентироваться в материале автора.

2) Не всегда ясно авторство иллюстраций (например, рис. 14, 17, 31, 34 и т.д.). Это оригинальные рисунки диссертанта или они заимствованы из цитируемых в тексте работ?

3) В символах пространственных групп (см. таблицы в приложениях) курсивом принято выделять только буквы, но не цифры; обозначение инверсионных осей следует записывать с чертой над цифрой, а не сбоку. Знак ангстрема (Å) также не принято выделять курсивом.

4) Диссертант не указывает, какие именно программы для визуализации кристаллических структур он использовал при оформлении многих своих структурных иллюстраций.

5) Определенное недоумение вызывает рисунок 50. Во-первых, из подрисуночной подписи следует, что сравнение данных, полученных по методике диссертанта, идет с результатами работы Ongari et al (2017); вместе с тем в легенде ссылка идет на совершенно другую работу (Eremin et al, 2018). Непонятна и размерность оси абсцисс на рис. 50б. Обозначение $\text{см}^3/\text{см}^3$ является не совсем корректным с точки зрения размерности (вероятно, проценты были бы более правильными).

Сделанные замечания в основном носят рекомендательный характер, касаются стиля и некоторых неточностей изложения материала и не снижают общей положительной оценки, как самой диссертации, так и ее научной и практической значимости. Таким образом, проведенный анализ диссертационной работы Голова Андрея Анатольевича, представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04. - «физическая химия» показал следующее:

- 1) Диссертационная работа Голова А.А., посвященная исследованию обширного класса кристаллических структур органических, неорганических и гибридных соединений, вносит существенный вклад в материаловедение, структурную кристаллографию, а также химию и физику твердого тела. Работа выполнена автором самостоятельно, актуальна, полученные результаты отличаются научной новизной и практической ценностью, достоверностью и обоснованностью.
- 2) В работе создана наиболее полная в мире база данных, содержащая информацию по структуре и свойствам аллотропов углерода; предсказаны потенциально новые сорбенты; создана методика направленного поиска структуронаправляющих агентов с целью синтеза цеолитов с заданной топологией каркасов; предложен метод декомпозиции структур координационных полимеров на строительные единицы, что позволило выполнить пробный дизайн трех новых гипотетических структур.
- 3) Полученные результаты могут быть использованы в учебном процессе, в частности в курсах лекций для кристаллографов, материаловедов, химиков и физиков, занимающихся твердым телом.
- 4) Все выводы, сделанные в работе, четко сформулированы и доказаны. Защищаемые положения в диссертации не вызывают сомнений.

- 5) Результаты работы опубликованы в 7-ми статьях в рецензируемых журналах и доложены на 6-ти конференциях российского и международного уровня. Автором получено 3 свидетельства о государственной регистрации баз данных.
- 6) Содержание автореферата полностью соответствует содержанию диссертационной работы. Основные материалы диссертации, аргументация защищаемых положений и выводы в полной мере отражены в автореферате.

Таким образом, диссертация Голова А.А. представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, соответствующую всем критериям и требованиям раздела II «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года. Автор диссертации, **Голов Андрей Анатольевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04. - физическая химия.**

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается профилем их специализации, близкой к теме диссертации, наличием публикаций в рецензируемых научных изданиях по теме диссертации, а также возможностью дать объективную оценку всем аспектам диссертационной работы.

Основные результаты диссертации опубликованы в 17 научных изданиях, включая 8 статей в рецензируемых научных журналах из перечня ВАК, 3 свидетельства о государственной регистрации баз данных и тезисы 6 докладов на научных конференциях.

Основные работы:

1. Mobin, S. M. Acid-Driven Dimensionality Control of Cd(II) Complexes: From Discrete Double Open Cubane to One- and Three-Dimensional Networks / S. M. Mobin, V. Mishra, A. Chaudhary, D. K. Rai, **A. A. Golov**, P. Mathur // Cryst. Growth Des. – 2014. – Vol. 14. – P. 4124-4137.
2. Шевченко, В. Я. Комбинаторно-топологическое моделирование кластерной самосборки кристаллических структур цеолитов: компьютеризированный поиск молекулярных темплатов для нового цеолита ISC-2 / В. Я. Шевченко, **А. А. Голов**, В. А. Блатов, Г. Д. Илюшин // Известия академии наук: серия химическая. – 2016. – Т. 1. – С. 29-39.
3. Hoffmann, R. Homo Citans and Carbon Allotropes: For an Ethics of Citation / R. Hoffmann, A. A. Kabanov, **A. A. Golov**, D. M. Proserpio // Angew. Chem. Int. Ed. – 2016. – Vol. 55. – P. 10962-10977.
4. Onuchak, L. A. Space Filling of Permethylated β -Cyclodextrin by Volatile Hydrophobic and Hydrophilic Guests in Polyethylene Glycol / L. A. Onuchak, Y. G. Kuraeva, M. A. Evdokimova, **A. A. Golov** // J. Chin Chem. Soc. – 2019. – Vol. 66. – P. 157-163.
5. Eremin, R.A. High-throughput search for potential potassium ion conductors: A combination of geometrical-topological and density functional theory approaches / R. A. Eremin, N. A. Kabanova, Ye. A. Morkhova, **A. A. Golov**, V. A. Blatov // Solid State Ionics – 2018. – Vol. 326. – P. 188-199.
6. Fan, D. D-carbon: Ab initio study of a novel carbon allotrope / D. Fan, S. Lu, **A. A. Golov**, A. A. Kabanov, X. Hu // J. Chem. Phys. – 2018. – Vol. 149. – P. 114702 -114708.
7. Blatova, O.A. Natural tilings and free space in zeolites: models, statistics, correlations, prediction / O. A. Blatova, **A. A. Golov**, V. A. Blatov // Zeitschrift für Kristallographie. – 2018. Vol. 234. – P. 7 - 8.
8. Blatov, V. A. Network topological model of reconstructive solid-state transformations // V. A. Blatov, **A. A. Golov**, C. Yang, Q. Zeng, A. A. Kabanov // Scientific Reports. – 2019. – Vol. 9. – № 6007.

9. **Голов А. А.**, Кабанов А. А., Прозерпио Д. М., Блатов В. А. SACADA (Samara Carbon Allotropes Database). // Свидетельство о государственной регистрации базы данных 2017, №2017620431.

10. **Голов А. А.**, Александров Е. В., Шевченко А. П., Блатов В. А. CaCh (Cavities and Channels). // Свидетельство о государственной регистрации базы данных 2018, №2018620301.

11. **Голов А. А.**, Александров Е. В., Еремин Р. А., Блатов В. А., Яблоков Д. Е. / DSBU (Database of Structural Building Units) // Свидетельство о государственной регистрации базы данных 2018, №2018620300.

На автореферат диссертации поступило 5 отзывов, **все положительные**. В отзывах указывается, что представляемая диссертационная работа является научной квалификационной работой, которая отвечает всем требованиям п.п.9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемым к диссертациям на соисканием ученой степени кандидата наук, а ее автор, Голов Андрей Анатольевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

1. Галанов Валерий Михайлович, д. хим. наук, профессор кафедры общей химии и технологии силикатов Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова». *Без замечаний.*

2. Синельщикова Анна Александровна, к. хим. наук, старший научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина» РАН. *Замечания:*

1) 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.

2) 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?

3) 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.

3. Корлюков Александр Александрович, д.х.н., профессор РАН, вед.н.с. лаборатории рентгеноструктурных исследований ФГБУН Института элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН (г. Москва). *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, встроенных 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, распространенность 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.

4. **Иванов-Шиц Алексей Кириллович**, д.х.н., вед.н.с., профессор кафедры математики, эконометрики и информационных технологий Московского государственного института международных отношений МИД России. *Замечания:*

1. Из текста автореферата не ясно, учитывались ли такие параметры, как растворимость и стабильность молекулы темплата, при поиске структурнонаправляющего агента для цеолита ISC-2. Исходя из строения, предложенного структурнонаправляющего агента, можно заключить, что он должен обладать лиофильными свойствами и, как следствие, будет мало растворим в водных растворах. В связи с этим, использование данной молекулы в синтезе цеолита представляется маловероятным;

2. В случае микропористых кристаллических сорбентов, получаемых, как правило, в виде микрокристаллического порошка и обладающих развитой внешней поверхностью, необходимо учитывать влияние поверхности на процесс сорбции. Более того, химическая природа сорбата и сорбента также оказывают значительное влияние на сорбционный процесс. Все эти факторы не в полной мере нашли отражение в тексте автореферата.

5. **Морозов Игорь Викторович**, д.х.н., доцент, вед. научный сотрудник кафедры неорганической химии Химического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова.

Замечание: 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 параметры результатов такого расчета в сравнении с расчетами, выполненными другими методами, и подтвержденными экспериментально.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработаны и реализованы в виде компьютерных программ универсальные методы поиска и расчёта геометрико-топологических характеристик систем полостей и каналов в структурах кристаллических веществ;

проведена оценка сорбционных свойств и **найденны** потенциальные микропористые сорбенты среди 13725 каркасных металл-органических координационных полимеров, 239 цеолитов и 522 3-периодических аллотропов углерода на основании анализа результатов расчёта геометрических и топологических характеристик полостей и каналов в их структурах;

установлены взаимосвязи между геометрико-топологическими структурными и сорбционными свойствами микропористых кристаллических материалов. **Обнаружено**, что независимо от линейного размера молекул сорбата, их траектории диффузии в большинстве структур цеолитов и каркасных металл-органических координационных полимеров однопериодические. **Показано**, что ёмкость и селективность кристаллического сорбента по отношению к конкретным сорбатам могут быть оценены исходя из геометрии доступных для данных молекул систем каналов;

создана наиболее полная в мире база данных SACADA по структуре и свойствам 3-периодических существующих и гипотетических аллотропов углерода;

разработана новая методика направленного поиска структуронаправляющих агентов с целью синтеза цеолитов с заданной топологией каркаса. **Предложен** потенциальный структуронаправляющий агент для синтеза гипотетического цеолита ISC-2;

предложен и реализован в виде компьютерной программы универсальный метод декомпозиции структур координационных полимеров на строительные единицы. **Создана** наиболее полная в мире база данных строительных единиц каркасных металл-органических координационных полимеров;

выполнен дизайн трёх новых структур микропористых каркасных металл-органических координационных полимеров.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

предложен новый алгоритм поиска систем каналов в кристаллических структурах, который позволяет найти не только широчайшие, но и все возможные системы каналов в заданном веществе, а также определить максимальный размер молекул, способных по ним мигрировать, что дает возможность не только оценить селективность кристаллического сорбента по отношению к конкретным молекулам сорбата, но и спрогнозировать возможные траектории диффузии данных молекул в структуре сорбента;

разработан новый алгоритм определения геометрических характеристик пор в кристаллических структурах, который позволяет рассчитывать геометрические параметры (объём и площадь поверхности) для отдельно взятых каналов и полостей;

проведена топологическая систематика строительных единиц, полученных декомпозицией 8755 структур каркасных координационных полимеров. Полученная информация может быть использована для направленного дизайна новых кристаллических сорбентов с заданными свойствами.

Применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов) использован комплекс современных методов математического моделирования включающих: молекулярную механику, методы дизайна структур координационных полимеров, совмещенные с теорией графов и численные методы расчёта характеристик пористости кристаллических структур;

исследовано влияние геометрико-топологических характеристик полостей и каналов кристаллических сорбентов на их селективность и ёмкость по отношению к конкретным молекулам сорбата;

проведена модернизация алгоритма численного расчёта пористости с использованием полиэдров Вороного с целью его приложения к исследованию микропористых кристаллических сорбентов.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

создана база данных по геометрико-топологическим характеристикам полостей и каналов 13725 кристаллических структур каркасных металл-органических координационных полимеров CaCh (Свидетельство о государственной регистрации базы данных №2018620301) для направленного поиска сорбентов с заданными характеристиками;

создана база данных 5286 металл-содержащих и 2892 органических уникальных строительных единиц каркасных металл-органических координационных полимеров DSBU (Свидетельство о государственной регистрации базы данных 2018, №2018620301) для дизайна новых пористых материалов;

создана наиболее полная база данных гипотетических и существующих 3-периодических структур углерода SACADA (Свидетельство о государственной регистрации базы данных №2017620431), содержащая информацию по структуре и свойствам 522 уникальных аллотропов углерода.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

установлена хорошая согласованность рассчитанных значений пористости по предложенному соискателем методу с результатами экспериментальных измерений пористости, представленными в независимых источниках по данной тематике;

достоверность полученных результатов основана на применении математически строгих алгоритмов, а также на обсуждении предложенных методов и установленных

закономерностей в ходе тематических российских и международных научных мероприятий и на публикациях в рецензируемых научных журналах;

выводы обоснованы и подтверждены в диссертационной работе; они согласуются с современными принципами и представлениями физической и структурной химии.

Личный вклад автора заключается в поиске и анализе литературных данных, создании алгоритмов и написании программ расчёта геометрико-топологических характеристик свободного пространства в кристаллических материалах и декомпозиции структур координационных полимеров на строительные единицы, разработке методики поиска СНА для синтеза цеолитных каркасов, применении разработанных алгоритмов к выборкам пористых кристаллических структур, а также анализе и систематизации полученных результатов. Создание базы данных по 3-периодическим аллотропам углерода проводилось при участии к.ф.-м.н. Кабанова А. А. и профессора Миланского государственного университета Прозерпио Д. М. Подготовка публикаций выполнялась совместно с соавторами работ и научным руководителем.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается логичностью её построения, последовательностью изложения и комплексным характером, включающим 1) разработку универсального метода расчёта геометрико-топологических характеристик полостей и каналов в структурах кристаллических веществ; 2) разработку и программную реализацию универсального метода поиска внутрискруктурных систем каналов, доступных для заданной молекулы-зонда; 3) расчёт геометрико-топологических параметров систем полостей и каналов в известных структурах цеолитов, каркасных металл-органических координационных полимеров и гипотетических 3-периодических аллотропов углерода; 4) установление взаимосвязей между сорбционными свойствами микропористых материалов (цеолитов, металл-органических координационных полимеров и гипотетических 3-периодических аллотропов углерода) и геометрико-топологическими параметрами систем полостей и каналов в их структуре; 5) разработку и программную реализацию универсального метода декомпозиции структур координационных полимеров на строительные единицы; 6) классификацию и создание базы данных СЕ и способов их связывания в каркасных металл-органических координационных полимеров. Содержание и название диссертации соответствует паспорту специальности 02.00.04 – физическая химия в п. 1. Экспериментальное определение и расчет параметров строения молекул и пространственной структуры веществ; п. 3. Определение термодинамических характеристик процессов на поверхности, установление закономерностей адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях.

Диссертация Голова Андрея Анатольевича на тему «Взаимосвязь сорбционных и геометрико-топологических кристаллоструктурных свойств цеолитов и каркасных координационных полимеров» представляет собой научно-квалификационную работу, в которой решена задача установления взаимосвязей 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). Полученные результаты вносят существенный вклад в развитие физической химии и материаловедения.

Диссертационным советом сделан вывод о том, что по актуальности, новизне и практической значимости диссертация Голова Андрея Анатольевича соответствует критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней (п.п. 9-14), утвержденным Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (ред. от 01.10.2018 г.).

На заседании 25 сентября 2019 года диссертационный совет принял решение присудить Голову Андрею Анатольевичу ученую степень кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, химические науки.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них 14 докторов наук (отдельно по каждой специальности рассматриваемой диссертации), участвовавших в заседании, из 21 человека, входящих в состав совета (из них 0 человек дополнительно введены на разовую защиту), проголосовали: за - 15, против - нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель

диссертационного совета,

академик, д.х.н.

Ученый секретарь

диссертационного совета, к.х.н.



 Шевченко Владимир Ярославович

 Масленникова Татьяна Петровна

25.09.2019 г.