

ОТЗЫВ

на диссертационную работу в виде научного доклада
Александрова Евгения Викторовича «Топологические закономерности
формирования и принципы дизайна координационных полимеров и
водородно-связанных органических кристаллов», представленную на
соискание ученой степени доктора химических наук
по специальности 1.4.4 – «Физическая химия»

За последние несколько десятков лет накопилось огромное разнообразие структур пористых металл-органических координационных полимеров (МОКП). Среди них особое место занимают каркасы со сложными структурными блоками, такими как кластерные фрагменты. Такие группировки придают каркасам высокую стабильность и возможность участия в адсорбционных и каталитических процессах. Органическая часть каркасов может быть функционализирована в широчайших пределах. Исследование строения таких материалов в первую очередь опирается на рентгенодифракционные методы. Большой объем структурных данных и спровоцировал представленное в диссертационной работе Александрова Е.В. появление новых теоретических (топологических) подходов к анализу всех известных кристаллических структур этого класса соединений, выявлению закономерностей в их структурной организации и проектированию новых материалов. Развиваемые диссертантом подходы автоматизированы, что позволило им в некоторой степени обогнать экспериментальные исследования в значимости и распространенности. Так обычно, подробный кристаллохимический анализ с расчетом новых характеристик (дескрипторов) нескольких структур составляет содержание одной весомой научной статьи. В диссертации приведены результаты подобного анализа более 90000 структур МОКП и предложены топологические мотивы для еще большего числа новых структур. Что интересно, такие же закономерности наблюдаются и для водородно-связанных органических кристаллов (ВОК) –

структур с менее прочными (водородными) связями, но похожими по геометрии и топологии связывания структурными блоками. Выявленные взаимосвязи топологических и геометрических дескрипторов структур с физико-химическими, физическими и химическими свойствами позволили осуществлять целенаправленный поиск новых перспективных материалов. Поэтому можно считать, что в данной работе совершен фундаментальный прогресс в развитии физической химии кристаллов. Таким образом, топологический подход к дизайну кристаллических структур – это мощный инструмент для исследования МОКП и ВОК. С его помощью диссертантом получена уникальная информация о топологических свойствах МОКП и ВОК, наиболее предпочтительных топологических мотивах для сборки кристаллов, способах переплетений полимерных сеток, топологическом сходстве и структурной изомерии координационных полимеров, возможных схемах дизайна восьми классов периодических структур, особенностях формирования 61 новых МОКП и 21 водородно-связанных органических каркасов, механической анизотропии, параметрах пор, электрической проводимости, генерации второй гармоники, возможности тушения люминесценции, селективности адсорбции катионов и анионов, паров и газов, возможности ускорения циклоприсоединения диоксида углерода к органическим эпоксидам, способности к диспергированию на наночешуйки, структурной стабильности, структурных трансформациях.

По существу к диссертации в виде научного доклада замечания отсутствуют. Есть вопрос: Диссертантом было исследовано диспергирование монокристаллов $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})(\text{HCO}_2)(\text{ImO}_2)] \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$, $[\text{Cu}(\text{MeImO}_2)_2]$, $[\text{Cu}(\text{Me}_2\text{ImO}_2)_2]$, $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})(\text{HCO}_2)(\text{MeImO}_2)] \cdot \text{H}_2\text{O}$ с образованием наночешуек. Подтверждался ли размер полученных наночешуек традиционными методами характеристики наночастиц, такими как динамическое светорассеяние и методом сканирующей электронной микроскопии?

Высказанные замечания не влияют на положительную оценку работы. Диссертация в виде научного доклада «Топологические закономерности формирования и принципы дизайна координационных полимеров и водородно-связанных органических кристаллов», автор которой Александров Евгений Викторович, несомненно, является завершенной научно-квалификационной работой, выполненной на высоком уровне. Диссертационная работа полностью соответствует требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (с изменениями и дополнениями), и Александров Евгений Викторович, заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 – «Физическая химия».

Я, Федин Матвей Владимирович, даю согласие на использование и обработку моих персональных данных на нужды, связанные с работой диссертационного совета.

Директор МТЦ СО РАН, доктор физико-математических наук (01.04.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества), профессор РАН Федин Матвей Владимирович



«30» сентября 2022 г.

Я, Порываев Артем Сергеевич, даю согласие на использование и обработку моих персональных данных на нужды, связанные с работой диссертационного совета.

Научный сотрудник МТЦ СО РАН, кандидат химических наук (02.00.04 (1.4.4) – Физическая химия) Порываев Артем Сергеевич



«30» сентября 2022 г.

Дата составления: «30» сентября 2022 г.

Подпись профессора Федина М.В. и н.с. Порываева А.С. заверяю:

Ученый секретарь _____

(подпись, печать)



К.Ф.Н. Яньшолё Л.В.

Полное название организации:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт «Международный томографический центр» Сибирского отделения Российской академии наук (МТЦ СО РАН).

Почтовый адрес: 630090 Россия, г. Новосибирск, ул. Институтская, д. 3а

<https://www.tomo.nsc.ru/>

Телефон: (383) 333-14-48

Факс: (383) 333-13-99

Электронная почта: mfedin@tomo.nsc.ru, poryvaev@tomo.nsc.ru