

**Отзыв на автореферат диссертации Александра Евгения Викторовича
«Топологические закономерности формирования и принципы дизайна
координационных полимеров и водородно-связанных органических кристаллов» на
соискание ученой степени доктора химических наук**

Диссертационная работа Александра Е.В. посвящена важному направлению современной кристаллохимии – глубокому пониманию тонких особенностей внутреннего строения молекулярных кристаллов с их физическими свойствами. В рамках данного подхода, который базируется на наиболее современных методах математической кристаллографии и теории графов, топологического анализа кристаллических структур и ретикулярной кристаллохимии (которые, во многом, были развиты при непосредственном участии самого Евгения Викторовича), было проанализировано огромное число метал-органических координационных полимеров (МОКП) и пористых водородно-связанных органических каркасов (ВОК) с целью поиска закономерностей между их химическим составом, структурой и свойствами. Огромный прикладной потенциал данной работы отражен в том, что на основе полученных результатов появилась возможность появилась возможность дизайна и направленного синтеза материалов с практически значимыми свойствами.

В рамках диссертационной работы Александровым Е.А. был разработан общий подход к исследованию топологических свойств координационных полимеров и водородно-связанных органических каркасов, основанный на расчете и анализе широкого набора топологических дескрипторов кристаллической структуры, что позволило подготовить современную систематику этих соединений. Предложен автоматизированный метод распознавания топологического сходства и структурной изомерии координационных полимеров, а также введены понятия изомерии строительных единиц, изомерии связывания строительных единиц, сеточной изомерии, а также изомерии переплетения. Выполненный детальный анализ позволил установить наиболее предпочтительные геометрические типы. Убедительно продемонстрировано, что топологический тип, геометрия базовой сетки и химический состав МОКП определяют механическую анизотропию, состав поверхности и размеры пор, электрическую проводимость, генерацию второй оптической гармоники и множество других физических характеристик и свойств твердых тел, в том числе и структурную стабильность.

В качестве небольшого комментария следовало бы отметить, что все вышеперечисленные характеристики кристаллов тесно связаны с понятиями структурной сложности, которые могли бы также украсить топологический анализ кристаллических структур и выявить не только наиболее стабильные структурные типы, но также и наиболее кристаллохимически «простые».

По результатам исследований Александровым Е.В. было опубликовано более 30 статей в журналах Q1 и Q2, в том числе крупный обзор в журнале Chemical Reviews, который является самым высокорейтинговым обзорным журналом по химии. Таким образом, диссертационная работа отвечает всем требованиям «Положения о присуждения ученых степеней» (утверждено Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. №842), предъявляемым к докторским диссертациям.

Нет никаких сомнений, что Александров Евгений Викторович является крупным специалистом в области детального кристаллохимического и топологического анализа кристаллических структур и полностью заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

14.10.2022 г.

Доктор геолого-минералогических наук, академик РАН, Генеральный директор ФИЦ КНЦ РАН

Кривовичев Сергей Владимирович

Кандидат геолого-минералогических наук, заведующий Лабораторией арктической минералогии и материаловедения ФИЦ КНЦ РАН

Аксенов Сергей Михайлович

Федеральный исследовательский центр "Кольский научный центр РАН" (ФИЦ КНЦ РАН)
Адрес: ул. Ферсмана, 14, Апатиты, Мурманская обл., 184209
Телефон: 8 (815) 557-65-67 e-mail: ksc@ksc.ru

Подпись Кривовичев С.В.
ПО МЕСТУ РАБОТЫ УДОСТОВЕРЯЮ

НАЧАЛЬНИК ОБЩЕГО ОТДЕЛА
ФИЦ КНЦ РАН

Д.В. Костров
"14" октября 2022 г.



Подпись Аксенов С.М.
ПО МЕСТУ РАБОТЫ УДОСТОВЕРЯЮ

НАЧАЛЬНИК ОБЩЕГО ОТДЕЛА
ФИЦ КНЦ РАН

Д.В. Костров
"14" октября 2022 г.

