

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Реутовой Ольги Валерьевны
«Кристаллические структуры новых синтетических иодатов и германат-силикатов с крупными катионами: тополого-симметричный анализ и соотношение структура-свойства»,
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.6.4 – «Минералогия, кристаллография, геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых».

Диссертация О.В. Реутовой посвящена исследованию кристаллических структур иодатов и германат-силикатов с крупными катионами и включает подробный анализ структурной обусловленности их функциональных свойств. Работа привлекает внимание благодаря успешному сочетанию экспериментальных методов и современных кристаллохимических подходов, таких как тополого-симметричный анализ с применением OD-теории Дорнбергер-Шифф. Научная новизна диссертации заключается в определении структур и кристаллохимическом анализе 11 новых соединений, включая 7 оригинальных структур. Работа базируется на обширных экспериментальных данных, полученных с использованием современных методов включая рентгеноструктурный анализ монокристаллов, термогравиметрический анализ, ИК-спектроскопию и тесты на генерацию второй оптической гармоники. Использованные методы были выбраны адекватно целям работы и позволили автору провести всесторонний анализ структурных особенностей исследованных соединений и достоверно обосновать выводы. Тополого-симметричный OD-подход сыграл ключевую роль в интерпретации выявления закономерностей при анализе кристаллических структур. В диссертационной работе продемонстрированы возможности OD-подхода для выявления скрытых симметричных закономерностей, объяснения нелинейно-оптических свойств и предсказания новых структурных типов, что делает его эффективным инструментом кристаллохимии.

Например, в структуре Cs₂In-германат-силиката выделен и описан новый тип гофрированного слоя из тетраэдрических цепочек и с использованием OD-анализа были смоделированы гипотетические слоистые

структуры со слоями подобные палыгорскиту, которые могут быть реализованы экспериментально или найдены в новых минералах. Другой германато-силикат демонстрирует сходство с минералом костылевитом, но при этом формирует уникальные смешанные слоисто-каркасные структуры. Это указывает на новые возможности комбинаций состава и симметрии в гидротермальных условиях. В структуре $\text{Ba}(\text{OH})\text{IO}_3$ обнаружена псевдоцентросимметричность, объясняющая слабость нелинейно-оптического эффекта, а анализ слоистых иодатов $\text{PbF}(\text{IO}_3)$ с применением OD-теории позволил прояснить их структурную полиптипию и показать, как нелинейно-оптическая активность может зависеть от способа объединения флюоритоподобных фрагментов и полярных йодатных слоев. Структурное сходство с иодатами Vi и Ta позволило предположить возможность образования других политипных форм, зависящих от условий синтеза.

Результаты исследования новых структур внесены в международные базы данных CCDC (ICSD), что расширяет доступность полученных данных для научного сообщества. Новые соединения могут представлять интерес для практического применения благодаря их нелинейно-оптическим свойствам. Кроме того, гипотетические модели структур, предложенные автором, представляют основу для дальнейших исследований и экспериментов в области синтеза новых соединений в гидротермальных системах и для дальнейшего развития материаловедения.

Замечания по работе в основном касаются изложения материала.

1. Нелинейно-оптические свойства почти всех рассматриваемых соединений, описываются лишь качественно (“слабые”, “высокие”, “выраженные”, “превосходные” и т.п.). Отсутствие количественных характеристик затрудняет объективную оценку степени влияния выявленных тонких симметричных закономерностей на изменения этих свойств. Включение численных данных, например интенсивности генерации второй гармоники, существенно повысило бы научную строгость выводов.

2. На рисунке 7 а,б различия между структурами ромбической и моноклинной разновидностей $PbF(IO_3)$ визуальны представлены недостаточно наглядно. Структуры выглядят настолько схожими, что возникают сомнения в их принципиальных различиях. Для устранения этой неопределенности следовало бы визуальны на рисунке акцентировать внимание на уникальных структурных различиях и симметричных характеристиках. Кроме того, из описания не совсем ясно, как в моноклинной структуре с пространственной группой Pn может происходить “размножение полярного йодатного слоя...за счёт одной из осей Z_1 ”?

3. Подобное замечание относится к рисунку 10, на котором представлены очень схожие структуры политипов Rb,Sc-йодата. Для более ясного объяснения их различий следовало бы визуальны выделить группы атомов, чьи небольшие смещения приводят к удвоению параметра b в структуре.

Указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования О.В. Реутовой. В целом, диссертация представляет собой самостоятельное, актуальное и высококачественное исследование. Она отличается высокой теоретической и практической ценностью, а также демонстрирует компетентность автора в решении сложных научных задач. Результаты работы О.В. Реутовой опубликованы в 10 рецензируемых статьях и в тезисах профильных научных конференций.

Представленный автореферат отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова. Содержание автореферата соответствует паспорту специальности 1.6.4 – «Минералогия, кристаллография, геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых», а также критериям, определенным пп. 2.1–2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, и правилам, определенным в приложениях № 8, 9 Положения о диссертационном совете Московского

государственного университета имени М.В. Ломоносова, а автор Реутова Ольга Валерьевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук.

Болотина Надежда Борисовна
д.ф.-м.н. (специальность 01.04.18 – Кристаллография, физика кристаллов)
ведущий научный сотрудник
лаборатории рентгеновских методов анализа и синхротронного излучения
Института кристаллографии им. А.В. Шубникова Курчатовского комплекса
кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт»
Адрес: 119333, г. Москва, Ленинский проспект, д. 59,
Тел.: 8 (905) 767-19-01
E-mail: nb_bolotina@mail.ru

Даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

20.11.2024



Н.Б. Болотина

Иванова Анна Геннадьевна
к.х.н (специальность 25.00.05 – Минералогия, кристаллография)
ведущий научный сотрудник
лаборатории рентгеновских методов анализа и синхротронного излучения
Института кристаллографии им. А.В. Шубникова Курчатовского комплекса
кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт»
Адрес: 119333, г. Москва, Ленинский проспект, д. 59,
Тел.: 8(499)135-31-10
E-mail: ani@crys.ras.ru

Даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

20.11.2024



А.Г. Иванова

Подписи в.н.с Ивановой А.Г. и в.н.с. Болотиной Н.Б удостоверяю:
Начальник отдела кадрового сопровождения КККиФ



А.Н. Титова

