

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», представленную на
соискание ученой степени кандидата химических наук по
по научной специальности 1.6.4. – «Минералогия, кристаллография.
Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых»

Диссертационная работа О.В.Реутовой направлена на определение и уточнение кристаллических структур новых германат-силикатных и иодатных соединений с их последующим анализом и разным кристаллохимическим описанием.

Все четко сформулированные задачи для достижения поставленной цели, которая, к сожалению, представлена многословно, О.В.Реутовой успешно решены комплексом методов, основным из которых рентгеноструктурный анализ. Уже в данном кратком описании актуальности работы диссертанта незримо присутствует все: *мотивация, грамотно выбранные объекты для исследования, продуманная методология, научная значимость, практические результаты.*

Диссертационная работа О.В.Реутовой – прекрасное очередное подтверждение, каких научных результатов можно достичь, владея рентгеноструктурным методом и кристаллохимическими знаниями. Из 12 пунктов раздела «**Научной новизны**» в 8 пунктах отмечено об определении структур новых соединений с детальным их описанием, отнесением к определенным семействам с возможностью прогнозирования новых семейств с помощью тополого-симметричного OD-анализа. Диссертантом представлен довольно интересный результат: показано применение тополого-симметричного анализа как метода оценки структурных результатов, позволяющего обнаружить пропущенный центр инверсии в структурах. Безусловно, знанию и владению данным анализом с применением расширенной OD-теории О.В.Реутова обязана своему руководителю – профессору Е.Л.Белоконевой, которая развивает данное направление. К научным результатам, безусловно, можно отнести и установление связи «структура-свойства» для ряда объектов, что, в свою очередь, подчеркивает и «**Практическую ценность**».

На мой взгляд, украшением диссертационной работы О.В.Реутовой представляются результаты изучения, анализа, обобщения, систематизации и структурных особенностей иодатов разного состава и строения вместе с их свойствами – мало изученного класса соединений.

Из **прикладных результатов** О.В.Реутовой можно отметить прежде всего представление термических и нелинейно-оптических свойств изученных соединений, попытку связать последние со структурными особенностями и объяснить

наблюдаемый эффект. Очевидная **«Практическая ценность»**: вся полученная О.В.Реутовой качественная структурная информация, внесенная в базы ICSD и CCDC, о новых соединениях и соотнесение их с соединениями других составов дает прекрасную возможность последователям диссертанта использовать ее данные для нахождения всевозможных корреляционных связей: «состав-свойства», «структура-свойства», «состав-структура-свойства» и пр.

Актуальность, научная новизна и прикладная значимость диссертационной работы О.В.Реутовой подтверждены многочисленными публикациями в рецензируемых журналах, которые известны специалистами в данных областях знания, и выступлениями на конференциях.

Хочу отдельно отметить прекрасный русский и научный язык О.В.Реутовой с использованием современных терминов, хорошее знание литературы в своей предметной области, умение обобщать, систематизировать, выделять главное.

Замечания:

1. Не очень понятна запись «полярной зонтичной группировки IO_3^- » (стр. 7) и «слоистые иодаты семейства MXIO_3 ($M = \text{Ba}, \text{Bi}, \text{Pb}, X = \text{O}, \text{OH}, \text{F}$)» (стр. 6) с точки зрения степеней окисления иода, M и X , в частности, кислорода
2. Стр. 12: «Средний ионный радиус катионов Ba^{2+} (1.35 Å) и Pb^{2+} (0.98 Å) составляет 1.165 Å, что довольно близко к ионному радиусу Sr^{2+} (1.18 Å)». В структуре типа $\text{Sr}(\text{IO}_3)_2$, в которой кристаллизуется $\text{PbBa}(\text{IO}_3)_4$, ионы Sr занимают два правильные системы точек с $K\text{CSr}=8$ и 9, для которых разные ионные радиусы в зависимости от координационного числа (Shannon, R. D. (1976). *Acta crystallographica section A: crystal physics, diffraction, theoretical and general crystallography*, 32(5), 751-767). Анализировать и сравнивать средние ионные радиусы представляется некорректным. По какой системе приведены ионные радиусы Ba^{2+} , Pb^{2+} , Sr^{2+} и для каких координационных чисел?
3. Хотелось бы увидеть объяснение зонтичной координации $(\text{IO}_3)^{1-}$, которая характерна для ионов Bi^{3+} и Pb^{2+} с активными E-парами (в автореферате, к сожалению, это тоже не представлено).
4. Известно много определений политипов и политипии, из которых классическое представлено в работе А. Р. Верма, П. Кришна «Полиморфизм и политипизм в кристаллах» (1969 г). Какое определение политипии и политипам может дать диссертант на основании результатов своей работы?

Диссертационная работа Реутовой Ольги Валерьевны на тему «Кристаллические структуры новых синтетических иодатов и германат-силикатов с крупными катионами: тополого-симметричный анализ и соотношение структура-свойства» - законченная научно-квалификационная работа, которая имеет очевидную и бесспорную научную новизну и практическую значимость. Диссертация

соответствует паспорту научной специальности 1.6.4. – «Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых» и отвечает требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 № 842 (редакция от 01.10.2018, с изменением от 26.05.2020). Автор диссертации О.В.Реутова показала себя квалифицированным специалистом и несомненно заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.6.4. – «Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых»

Доктор химических наук (специальность 02.00.04 «Физическая химия»), профессор кафедры материаловедения института перспективных технологий и индустриального программирования федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «МИРЭА — Российский технологический университет» (РТУ МИРЭА).

Кузьмичева Галина Михайловна

«25» ноября 2024 г.

Контактные данные:

тел.: +7 (495) 246 05 55 (IP 434), e-mail: kuzmicheva@mirea.ru

Адрес места работы:

119454, ЦФО, г. Москва, Проспект Вернадского, д.78, «РТУ МИРЭА»

Я, Кузьмичева Галина Михайловна, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Кузьмичева Галина Михайловна

ноября 2024 г.

Подпись сотрудника ФГБОУ ВО «МИРЭА — Российский технологический университет» Г.М. Кузьмичевой удостоверяю:

Первый проректор

Н.И. Прокопов