

## 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»

Диссертационная работа О. В. Реутовой посвящена нескольким важным и актуальным проблемам, затрагивающим как фундаментальные вопросы, связанные с расширением знаний о процессах образования минералов и возможности синтеза их аналогов, так и прикладные вопросы поиска корреляций структура-свойство для получения новых неорганических материалов.

В работе описывается 11 новых кристаллических структур, из которых семь не имеют аналогов среди известных соединений. В числе полученных структур — германосиликат и Cs-Sc-иодат, представляющие новые структурные типы. Свойства соединений изучены с помощью набора физико-химических методов исследования, включающих определение нелинейно-оптической активности порошковых образцов ряда несцентросимметричных иодатов.

Особый интерес представляет анализ полученных и известных родственных структур в рамках тополого-симметричного OD-подхода Дорнбергера-Шиффа. Анализ позволил выделить в структурах иодатов фрагменты, ответственные за проявления нелинейно оптических свойств, и напрямую проследить взаимосвязь структуры с эффективностью генерации второй гармоники. Обнаруженные закономерности устройства и симметрии строительных блоков кристаллов позволили также упорядочить данные о

кристаллическом строении и предсказать возможность существования полиморфов и политипов.

За исключением некоторого количества опечаток и неверной нумерации рисунков, текст хорошо написан, а иллюстративный материал хорошо подобран для представления результатов диссертационного исследования. При этом к работе имеется ряд замечаний и вопросов:

1) Во всём тексте следовало бы более чётко разграничивать псевдосимметрию, выделяемую в рамках OD-подхода, и симметрию в реальных кристаллических структурах. Например не понятно, как в структурах Ag-Vi-иодатов центросимметричность слоёв L2 совместимо с ГВГ, имеется ли в виду псевдоцентр инверсии? Кроме этого, в автореферате для данных известных иодатов отсутствует информация о пространственной группе, что затрудняет визуальный анализ.

2) Для тех же Ag-Vi-иодатов, почему гидротермальные условия получения способствуют кристаллизации упорядоченных структур?

3) В нескольких местах при обсуждении симметрии используется выражения типа "слегка отклоняется". Возможно ли описать отклонение от симметрии количественно, например, с помощью максимального допуса, при котором элемент симметрии может быть найден, или величиной подобной непрерывной мере симметрии (CSM)?

4) Из рисунков также видно, что угол между иодатные фрагменты расположены под разным углом к полярным осям или плоскостям. Есть ли зависимость эффективности ГВГ в зависимости от этого угла?

5) Обычно разупорядочение приводит к более высокой кажущейся симметрии, почему тогда в случае  $K_3Sc(IO_3)_6$  она связывается с более высокой эффективностью ГВГ?

Вместе с тем указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. 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» (по химическим наукам), 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.

Я, Федянин Иван Владимирович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

к.х.н., с.н.с. Лаборатории рентгеноструктурных исследований Института элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук  
Федянин Иван Владимирович

Контактные данные:

Тел.: +7(499)135-5091 д. 1144, e-mail: [octy@xrlab.ineos.ac.ru](mailto:octy@xrlab.ineos.ac.ru)

Специальность, по которой защищена диссертация: 02.00.04 – «Физическая химия»

Адрес места работы: 119334, г. Москва, ул. Вавилова, д. 28., стр. 1,

Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова Российской академии наук (ИНЭОС РАН)

Тел.: (499) 135-92-0 .ac.ru

Подпись сотрудника Федянина удостоверяю:

УЧЁНЫЙ СЕКРЕТАРЬ  
К. Х. Н. ГУЛАКОВА Е.