

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 геолого-минералогических наук по специальности 1.6.4.– Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых (химические науки)

Соискательница определила кристаллические структуры 11 новых соединений, используя современное оборудование и методы работы с целью поиска и идентификации новых кристаллических фаз среди продуктов гидротермальных реакций в многокомпонентных системах, содержащих Ge, In, Sc, Rb, Cs, I и другие редкие и рассеянные элементы. Диссертация отвечает требованиям новизны и актуальности, а также отличается надежностью полученных результатов.

Особо следует отметить установленную связь изоморфных соотношений в катионных позициях с геометрическими и топологическими особенностями структуры для новых германат-силикатов $Cs_2In_2[(Si_{2.1}Ge_{0.9})_2O_{15}](OH)_2 \cdot H_2O$, $Ba_2In_2(Si_{0.8}Ge_{0.2})_6O_{18} \cdot H_2O$ и иодата $PbBa(IO_3)_4$.

В структурах новых германат-силикатов $Cs_2In_2[(Si_{2.1}Ge_{0.9})_2O_{15}](OH)_2 \cdot H_2O$, $Ba_2In_2(Si_{0.8}Ge_{0.2})_6O_{18} \cdot H_2O$ обнаружены гетерополиэдрические каркасы различной топологии, в которых каналы заполнены крупными катионами Cs, Ba и молекулами воды, а каркасы образованы октаэдрами InO_6 и изолированными тетраэдрическими кольцами в случае $Ba_2In_2(Si_{0.8}Ge_{0.2})_6O_{18} \cdot H_2O$ или гофрированными слоями в случае $Cs_2In_2[(Si_{2.1}Ge_{0.9})_2O_{15}](OH)_2 \cdot H_2O$.

Иодаты металлов, имея асимметричную геометрию, образуют разнообразные необычные структуры, и многие из них являются перспективными новыми материалами, генерирующими вторую гармонику света (SHG). Они демонстрируют широкие области длин волн прозрачности,

большие коэффициенты SHG и высокие пороги оптического повреждения, а также умеренно высокую термическую стабильность. Использование ионов переходных металлов с электронной конфигурацией d^n ($n \neq 0$) в иодатных системах также может вызывать образование соединений NCS, когда неподеленные пары иодатных групп ориентированы соответствующим образом. Поэтому изучение соискательницей кристаллических структур иодатов совершенно оправдано.

Проведено кристаллохимическое сопоставление структур двух политипов нового иодата $Rb_3Sc(IO_3)_6$ (пр. гр. Pc) со структурами α - $K_3In(IO_3)_6$ и $K_3Sc(IO_3)_6$ с (пр. гр. Fdd_2) и на основании их сходства предложено структурное семейство $A_3M(IO_3)_6$ ($A = K, Rb; M = In, Sc$). Описаны полярные блоки $[Sc(IO_3)_6]$ с зеркальной симметрией m в структурах политипов $Rb_3Sc(IO_3)_6$, и полярные слои, составленные из данных блоков.

Установлено, что полярная конфигурация блоков и слоёв является причиной высокой нелинейно-оптической активности в структурах $Rb_3Sc(IO_3)_6$, тогда как в структурах α - $K_3In(IO_3)_6$ и $K_3Sc(IO_3)_6$, содержащих псевдо-центросимметричные блоки с симметрией $2/m$, нелинейно-оптические свойства можно объяснить разупорядочением в структурах и, как и в случае $KSc(IO_3)_3Cl$, возможной примесью KIO_3 , присутствовавшей в шихте при синтезе.

В диссертации использован тополого-симметричный подход для решения ряда кристаллохимических задач, включая структурную классификацию и поиск взаимосвязей между структурами различных соединений, предсказание гипотетических разновидностей структур, определение соотношения структура-свойства и прогнозирование возможных свойств в предсказанных разновидностях, поиск центра инверсии в ходе структурных расчётов, исчерпывающее описание структур с разупорядоченным строением.

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 (химические науки), 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, Асланов Леонид Александрович даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Доктор химических наук, профессор

Профессор, заведующий лабораторией структурной химии химического факультета Федерального государственного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

Асланов Леонид Александрович

Подпись

Дата подписания

15.11.2024

Контактные данные:

Служебный телефон: 495-939-13-27, e-mail: aslanov@struct.chem.msu.ru

Специальность, по которой защищена диссертация: 02.00.04 – Физическая химия

Адрес места работы: 119991, г. Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 3, МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет

Тел. приемной химфака: 495-939-35-71; e-mail: dekanat@chem.msu.ru

Подпись профессора химфака МГУ Л.А. Асланова удостоверяю:

Руководитель отдела делопроизводства

Д.Х. Самошина

организации