

**ОТЗЫВ официального оппонента
на диссертацию на соискание ученой степени
кандидата химических наук Реутовой Ольги Валерьевны
на тему: «Кристаллические структуры новых синтетических иодатов и
германат-силикатов с крупными катионами: тополого-симметрийный
анализ и соотношение структура-свойства»
по специальности 1.6.4. – Минералогия, кристаллография.
Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых
(химические науки)**

Диссертационная работа Реутовой О.В. посвящена кристаллохимии новых синтетических минералоподобных соединений с анионами IO_3 , SiO_4 и GeO_4 . По сути работа относится к области структурной химии, но подходы к кристаллохимическому исследованию, использованные диссидентом, происходят из минералогии/минералогической кристаллографии (тополого-симметрийный анализ). Поэтому представляется весьма удачным и правильным выбранная специальность из области наук о Земле, но с соисканием ученой степени кандидата химических наук. Минералы с силикатным анионом являются наиболее распространенными в Земной коре, в то время как германаты – это очень экзотические природные, также, как и йодаты. Установление условий синтеза и кристаллизации по соединениям двух последних семейств может способствовать уточнению знаний об условиях образования и формах концентрации IO_3 и GeO_4 в природе. В плане теоретической составляющей диссертации, в результате работы Реутовой О.В. разработана кристаллохимическая систематика нескольких семейств соединений. Выполнение тополого-симметрийного анализа показывает отличное владение диссидентом математическим аппаратом.

Тематика диссертационной работы является актуальной. Работы по синтезу новых силикатов для самых разнообразных применений от катализа до разработки новых сорбентов ведутся в ряде лабораторий мира, что подтверждается ссылками, приводимыми в диссертации. Активные исследования в области неорганического синтеза йодатов также проводятся довольно активно с целью получения новых нелинейно-оптических

материалов. В работе цитируется 202 литературных источника, часть которых как раз иллюстрирует практические приложения соединений родственных новым, полученным в рамках работы над диссертацией.

Новизна работы является очевидной и подробно изложена на страницах 10-11 диссертации. Получено 7 (!) новых структурных типов, не имеющих аналогов среди минералов и синтетических соединений. Еще 4 новых соединения являются изоструктурными уже известным и описанным в литературе. В тексте подробно дается синтез новых соединений, а для целого ряда соединений приводятся практически важные свойства (сигнал ГВГ, например). Такое количество новых структурных данных является серьезным вкладом в Неорганическую кристаллохимию.

Защищаемые положения хорошо обоснованы. В первую очередь, практически все результаты, изложенные в работе, опубликованы в классических рецензируемых изданиях кристаллографического профиля, что дополнительно подтверждает достоверность. Структурные данные депонированы в базы данных, да и в самой работе приводятся все необходимые таблицы для оценки представленных структурных экспериментов (не всегда с однозначным результатом). Сами формулировки довольно громоздки. Но такой характер защищаемых положений достаточно типичен для работ в области структурной химии и минералогической кристаллографии.

Диссертация оставляет очень приятное впечатление. Работа написана аккуратно, количество опечаток мало. Работа насыщена прекрасными по исполнению и отлично скомпонованными структурными рисунками, что показывает не формальное отношение к разрабатываемой тематике диссертантом. Приятно рассматривать такую графику.

По результатам работы Реутовой О.В. опубликовано 10 статей в журналах Кристаллография, Symmetry и CrystEngComm. Это значительное количество для кандидатской диссертации. Если бы квартиль журнала был выше, то можно было бы защищаться в виде доклада. Отдельно отмечу, что

все опубликованные статьи не являются стандартными «структурными сообщениями» с изложением только основных кристаллографических данных, но являются полноценными работами по неорганической кристаллохимии и систематике. В большинстве статей диссертант выступает первым автором, что показывает её решающий вклад в большинство выполненных работ.

По тексту диссертаций есть несколько вопросов и замечаний:

1. Удалось ли в итоге автору успешно синтезировать новые соединения, используя тополого-симметрийный OD анализ ранее известных или впервые установленных структур? Хорошо бы привести примеры.

2. Результаты уточнения некоторых кристаллических структур показывают достаточно высокие значения факторов сходимости. Наиболее высокое значение в почти 10% получено для «политипа 2» $Rb_3Sc(IO_3)_6$. Помимо этого, Таблица 25 показывает наличие очень сильных остаточных пиков (-9.283/7.767). Параметр b практически ровно в два раза больше по значению по сравнению с таковым в структуре «политипа 1». Автор отмечает, что был уточнен рацемический двойник и инструкция BASF показала значение в 0.54 (!). Без наличия картин реконструкции обратного пространства и выделения рефлексов, отвечающих за удвоение параметра b , все указывает на ложное выделение политипа. Весьма вероятно, что автор имел дело со сростком пластинчатых кристаллов.

3. В работе встречаются несколько странные словосочетания, как например «дифракционные порошковые спектры».

4. Возможно ли дать четкие определения «фазам Силлена» и «фазам Ауривилиуса», на основании которых можно отнести полученные соединения к тому или иному семейству?

Вместе с тем указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации

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 оформлена согласно приложениям № 8, 9 Положения о докторской совете Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Таким образом, соискатель Реутова Ольга Валерьевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.6.4. – «Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых» (химические науки).

Официальный оппонент:

доктор геолого-минералогических наук,
профессор каф. кристаллографии Института наук о Земле
Федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный университет»

Сийдра Олег Иоханнесович

29.11.2024

Контактные данные:

тел.: 7(921)7575249, e-mail: o.siidra@spbu.ru

Специальность, по которой официальным оппонентом
зашита диссертация:

25.00.05 – Минералогия, кристаллография

Адрес места работы:

199034, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7/9,
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»
Тел.: +7 (812) 350 66 88; e-mail: o.siidra@spbu.ru