

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Желуница Ивана Александровича**
«Электрофизические свойства синтетических соединений и минералов со структурой граната и эшинита при высоких температурах», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.6.4. – Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых.

Диссертационное исследование И.А. Желуница посвящено комплексному изучению связи «состав – структура – свойства» для синтетических и природных материалов со структурами граната и эшинита. Выбор темы является актуальным как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. Гранаты и эшиниты представляют интерес для материаловедения (феримагнетики, диэлектрики, СВЧ-керамика) и наук о Земле (геофизика, минералогия). Особую значимость придает работе фокус на мультиредкоземельных (высокоэнтропийных) соединениях – перспективном классе материалов с настраиваемыми свойствами.

Положительные характеристики работы:

1. Комплексный и системный подход. Исследование сочетает синтез широкой линейки соединений (более 60 образцов, 41 из которых получен впервые), их всестороннюю характеристику (рентгеноструктурный анализ, СЭМ, ТГ-ДТА, дилатометрия, оптическая, рамановская, мессбауэровская, импедансная спектроскопия) и теоретическое моделирование (DFT, полуэмпирические расчеты). Такой многомасштабный анализ является безусловной сильной стороной работы.

2. Высокая научная новизна. Автором получен значительный объем оригинальных данных:

Проведены DFT-расчеты для ряда гранатов и полуэмпирическое моделирование для мультикомпонентных систем. Впервые выявлена корреляция между термической историей природных гранатов и их электрофизическими свойствами, а также показана высокая чувствительность импедансной спектроскопии к начальным стадиям фазового разложения.

Замечания и рекомендации. Несмотря на высокий уровень работы, в автореферате можно выделить несколько моментов, требующих уточнения или которые могли бы усилить впечатление от работы:

Недостаточная детализация по некоторым аспектам моделирования.

В тексте упоминается, что проведены DFT-расчеты и полуэмпирическое моделирование, приведены некоторые общие выводы (например, о трендах длин связей). Однако отсутствует краткое описание использованных функционалов, базисов и

программного обеспечения для DFT-расчетов, что является стандартом для научных публикаций в этой области.

В абзаце оптические характеристики, где указаны полосы поглощения в гранатах (стр. 14) есть информация по механизму переноса заряда $O^{2-} \rightarrow Fe^{3+}$ (485 нм), в какой координации находится ион Fe^{3+} ?

Вместе с тем указанные замечания не умаляют значимость диссертационного исследования. Представленный автореферат отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова. Содержание автореферата соответствует 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 Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова, а автор **Желуницын Иван Александрович** заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук.

Я, Николаев Анатолий Германович, даю согласие на включения своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Кандидат геол.-мин. наук, доцент,

Доцент каф. минералогии и литологии Института геологии и нефтегазовых технологий Казанского (Приволжского) федерального университета

Николаев Анатолий Германович

09.12.2025

Контактные данные:

Тел: 89270389110, e-mail: anatolij-nikolaev@yandex.ru

Специальность, по которой защищена диссертация: 25.00.05 – «Минералогия, кристаллография»

Адрес места работы: 420008, Республика Татарстан, г. Казань, ул. Кремлевская, д.18, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт геологии и нефтегазовых технологий, кафедра минералогии и литологии.

Тел.: +7(843)233-74-00; e-mail: public.mail@kpfu.ru

Подпись сотрудника Института геологии и нефтегазовых технологий А.Г. Николаева удостоверяю

I. Зиганшина

09.12.2025