



УТВЕРЖДАЮ:  
И. о проректора по НИР  
ФГБОУ ВПО «Самарский  
государственный университет»  
д.ф.-м.н., профессор  
Крутов Александр Федорович  
« \_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2015 г.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Самарский государственный университет»

Диссертация «Нанокластеры и локальные атомные конфигурации в структуре интерметаллидов»  
выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Самарский государственный университет» (ФГБОУ ВПО «Самарский государственный университет»)

В период подготовки диссертации соискатель Эссер Арина Александровна работала на кафедре неорганической химии химического факультета ГОУ ВПО «Самарский государственный университет», в ОАО «Кузнецов» и МНИЦТМ ФГБОУ ВПО «Самарский государственный университет» в должностях лаборант, ведущий химик и младший научный сотрудник, соответственно.  
(являлась аспирантом очной формы обучения в аспирантуре ФГБОУ ВПО «Самарский государственный университет» 2011-2015 гг.)

В 2011 г. окончила ГОУ ВПО «Самарский государственный университет», химический факультет, кафедру неорганической химии по специальности – химия.

Удостоверение о сдаче кандидатских экзаменов выдано в 2015 г. ФГБОУ ВПО «Самарский государственный университет».

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор Блатов Владислав Анатольевич является директором межвузовского научно-исследовательского центра по теоретическому материаловедению, а также работает профессором кафедры физической химии и хроматографии ФГБОУ ВПО «Самарский государственный университет» Министерства образования и науки РФ.

По результатам рассмотрения диссертации «Нанокластеры и локальные атомные конфигурации в структуре интерметаллидов» принято следующее заключение:

Диссертационная работа Эссер Арины Александровны на тему *«Нанокластеры и локальные атомные конфигурации в структуре интерметаллидов»* выполнена в рамках гранта Правительства РФ № 14.В25.31.0005 (исполнитель) и гранта РФФИ № 13-07-00001 (исполнитель).

### **Актуальность работы**

В структурной химии интерметаллидов большое внимание уделяется выяснению их строения, рациональной систематике, а также исследованию родственных между структурными типами. Последняя задача особенно актуальна для материаловедения, так как установление структурного родства необходимо для выявления сходства физических свойств интерметаллидов и сплавов разного состава и создания новых материалов на их основе. В настоящее время одним из наиболее распространенных является описание кристаллических структур интерметаллидов в терминах кластеров (строительных блоков). Однако, как правило, кластерное представление имеет субъективный характер, основывается на визуальном анализе геометрии структуры и зачастую не опирается на анализ межатомных взаимодействий. В результате выделение кластерных фрагментов в атомной сетке происходит вне связи с процессом ее формирования и может быть весьма произвольным, что мешает определению структурных отношений между кристаллическими структурами интерметаллидов. Кроме того, за последние десятилетия массив структурных данных, которые требуют систематизации, значительно увеличился; в частности, в крупнейших кристаллохимических базах содержатся сведения по строению более чем 27000 интерметаллидов. Очевидно, что использование традиционных методов визуального анализа для обобщения такого объема информации невозможно. Одним из возможных путей преодоления указанных проблем является использование топологических методов, позволяющих автоматизировать описание структур интерметаллидов любой сложности.

### **Личное участие автора в получении результатов, изложенных в диссертации**

Эссер А. А. участвовала в постановке задач, решаемых в рамках диссертационной работы, в проведении классификации топологии всех интерметаллических соединений, информация о которых размещена в международных кристаллографических базах данных, разработке метода топологической классификации типов локального связывания нанокластеров, интерметаллидах, формулировке кристаллохимических закономерностей, связывающих химический состав, локальную и глобальную топологию интерметаллидов, синтезе некоторых новых интерметаллидов, и подготовке к публикации статей.

### **Степень достоверности результатов проведенных исследований**

Достоверность полученных результатов определяется математической строгостью использованных моделей и алгоритмов, большим объемом изученных выборок, а также прецизионностью использованных экспериментальных методов определения кристаллической структуры. Полученные данные хорошо согласуются с результатами исследований других авторов.

### **Научная новизна результатов исследования**

Научная новизна работы заключается в том, что впервые проведен кристаллохимический анализ и определение геометрико-топологических параметров нанокластерных моделей строения для всех известных интерметаллических соединений. Выявлены взаимосвязи между химическим составом, геометрическими и топологическими свойствами икосаэдрических, додекаэдрических и 26-атомных (типа  $\gamma$ -латуни) нанокластеров и способам их связывания в структуре интерметаллидов. Предложен новый метод топологической систематики интерметаллидов на основе построения модели локального связывания нанокластеров. Получены данные о кристаллическом строении трех новых интерметаллидов.

### **Научная и практическая значимость**

Созданная база данных по топологическим типам полиоболочечных нанокластеров является инструментом систематизации интерметаллических соединений по критерию сходства образующих их нанокластеров, а также может быть использована в качестве справочника. Обнаруженные взаимосвязи между составом металлических нанокластеров, локальной и глобальной топологией их связывания позволяют прогнозировать особенности кристаллического строения интерметаллидов.

### **Ценность научных работ соискателя**

Ценность работы соискателя Эссер А. А. заключается в том, что впервые проведен кристаллохимический анализ и определение геометрико-топологических параметров нанокластерных моделей строения для всех известных интерметаллических соединений. Выявлены взаимосвязи между химическим составом, геометрическими и топологическими свойствами икосаэдрических, додекаэдрических и 26-атомных (типа  $\gamma$ -латуни) нанокластеров и способам их связывания в структуре интерметаллидов. Предложен новый метод топологической систематики интерметаллидов на основе построения модели локального связывания нанокластеров. Получены данные о кристаллическом строении трех новых интерметаллидов.

По теме диссертации опубликованы 4 статьи в рекомендованных ВАК рецензируемых журналах, а также тезисы 5 докладов.

### **Специальность, которой соответствует диссертация**

Диссертация соответствует паспорту специальности 02.00.04 – физическая химия в п. 1 – экспериментальное определение и расчет параметров строения молекул и пространственной структуры веществ.

### **Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных соискателем**

Основные результаты работы достаточно полно отражены в 4 статьях, опубликованных в рецензируемых научных журналах, рекомендуемых ВАК, и 5 тезисах докладов на российских и международных конференциях.

– Статьи:

1. Панкова А. А. (*Эссер А. А.*), Илюшин Г. Д., Блатов В. А. Нанокластеры на основе пентагондодекаэдров в виде дельтаэдров D32, D42 и D50 в кристаллических структурах интерметаллидов // Кристаллография. – 2012. – Т. 57, № 1. – С. 5-13.
2. Pankova A. A. (*Esser A. A.*), Blatov V. A., Ilyushin G. D., Proserpio D. M.  $\gamma$ -Brass Polyhedral Core in Intermetallics: The Nanocluster Model // Inorg. Chem. – 2013. – Vol. 52, N 22. – P. 13094-13107.
3. Jana P. P., Pankova A. A. (*Esser A. A.*), Lidin S. Au<sub>10</sub>Mo<sub>4</sub>Zn<sub>89</sub>: A Fully Ordered Complex Intermetallic Compound // Inorg. Chem. – 2013. – Vol. 52, N 19. – P. 11110-11117.
4. Pankova A. A. (*Esser A. A.*), Akhmetshina T. G., Blatov V. A., Proserpio D. M. A collection of topological types of nanoclusters and its application to icosahedra-based intermetallics // Inorg. Chem. – 2015. – Vol. 54, N 13. – P. 6616-6630.

– Тезисы докладов на конференциях:

1. Pankova A. A. (*Esser A. A.*), Blatov V. A., Ilyushin G. D., Proserpio D. M. Multishell nanoclusters with the  $\gamma$ -brass polyhedral core in intermetallics // In book «27th European Crystallographic Meeting», Bergen, Norway, Book of abstracts, 2012 – P. 32.
2. Панкова А. А. (*Эссер А. А.*), Блатов В. А. 4-150 атомные кластеры в структурах интерметаллидов // В кн. «7-я Национальная кристаллографическая конференция», Суздаль, Тезисы докладов, 2013 – С. 136.
3. Pankova A. A. (*Esser A. A.*), Blatov V. A. 4-150 atom Lennard-Jones clusters in intermetallics // In book «28th European Crystallographic Meeting», Warwick, United Kingdom, Book of abstracts, 2013 – P. 459.
4. Pankova A. A. (*Esser A. A.*), Blatov V. A., Ilyushin G. D., Proserpio D. M. Multishell Nanoclusters in Intermetallics: a Topological Approach // In book «SCTE 2014 – 19th International Conference on Solid Compounds of Transition Elements», Genova, Italy, Book of abstracts, 2014 – P. 110.
5. Pankova A. A. (*Esser A. A.*), Blatov V. A., Ilyushin G. D., Proserpio D. M. New Tools for Taxonomy of Nanoclusters in Intermetallics // In book «2nd Joint AIC-SILS Conference», Florence, Italy, Book of abstracts, 2014 – P. 91.

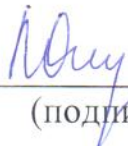
Диссертация *Эссер Арины Александровны* на тему «*Нанокластеры и локальные атомные конфигурации в структуре интерметаллидов*» представляет собой самостоятельно выполненную автором научно-квалификационную работу, результаты которой обеспечивают решение важных экспериментальных и теоретических задач, вносят вклад в развитие топологических методов исследования кристаллохимических закономерностей формирования интерметаллических соединений. Она полностью соответствует критериям Положения о порядке присуждения ученых степеней, предъявленным к кандидатским диссертациям.

Диссертация «*Нанокластеры и локальные атомные конфигурации в структуре интерметаллидов*» Эссер Арины Александровны рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Заключение рассмотрено и одобрено на заседании кафедры физической химии и хроматографии.

Присутствовало на заседании 18 чел., с правом голоса – 9 чел., из них докторов наук – 4, кандидатов наук – 5. Результаты открытого голосования: «за» - 9 чел., «против» - нет, «воздержались» - нет, протокол №1 от «08» сентября 2015 г.

Заведующий кафедрой  
физической химии и хроматографии,  
доктор химических наук, профессор

  
\_\_\_\_\_  
(подпись)

Л. А. Онучак

Секретарь кафедры  
физической химии и хроматографии,  
кандидат химических наук, учебный мастер

  
\_\_\_\_\_  
(подпись)

Т. С. Капралова