

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации А.А. Эссер  
«Нанокластеры и локальные атомные конфигурации в структуре интерметаллидов»  
на соискание ученой степени кандидата химических наук  
по специальности 02.00.04 – физическая химия

Диссертационная работа Эссер Арины Александровны посвящена систематике кристаллических структур интерметаллидов на основе ряда нанокластерных единиц. Хорошо известно, что при переходе от объемных тел к наночастицам значительно изменяются их механические (твердость, пластичность) и магнитные свойства, химическая активность, поляризуемость а так же некоторые другие параметры, поэтому постановка задачи исследования представляется весьма актуальной. Так же можно отметить, что создание материалов с необычными свойствами является одной из самых приоритетных областей исследований, как в физике, так и химии и все это в полной мере можно отнести к сфере производства кристаллов и совершенствования технологий их получения.

В настоящее время очень быстро и динамично происходит развитие рынка кристаллических материалов и поэтому основной целью ближайшего будущего в этой области является промышленное производство новых недорогих кристаллов редких элементов. Можно надеяться, что посредством фундаментального изучения структурных, электронных и оптических свойств, которыми обладают эти объекты, и их дальнейшей комбинацией удастся создать совершенные материалы, обладающие высокими ацентричными свойствами. Отмечу так же, что значительное внимание к проблеме формирования интерметаллических кристаллов объясняется необходимостью создания композитов с заранее определенной пространственной ориентацией и субструктурой.

Используемое в работе компьютерное моделирование на основе реалистичных межатомных потенциалов может дать необходимую теоретическую оценку различных аспектов структурообразования и проследить на атомном уровне возможные механизмы перестройки кристаллической структуры. Такого рода исследования позволяют, как бы непосредственно наблюдать взаимодействие атомов различных химических элементов, что является хорошей иллюстрацией при сопоставлении поведения реальных макросистем.

Представляемая к защите работа выполнена достаточно аккуратно и обстоятельно. Полученные данные находятся в хорошем согласии с экспериментальными и теоретическими значениями. Прослеживаются основные особенности формирования структуры и делаются грамотные выводы из полученных данных. Результаты работы прошли хорошую апробацию на конференциях, включая международные, и достаточно полно опубликова-

ны в ряде изданий.

Считаю, что диссертационная работа А.А. Эссер является завершённым исследованием и может расцениваться как значительный вклад в решение ряда принципиальных вопросов актуальных в проблематике определения структурных характеристик металлических систем. Полученные в ней результаты и выводы представляют несомненный интерес в теоретическом и прикладном отношении. Работа выполнена на высоком научном уровне и удовлетворяет всем требованиям ВАК России к диссертационным работам и ее автор, несомненно, заслуживает присвоения ученой степени кандидата химических наук.

Заведующий кафедрой общей и экспериментальной  
физики ХГУ им. Н.Ф. Катанова, доктор физико-  
математических наук, профессор

Гафнер Юрий Яковлевич

Почтовый адрес:

655017 г. Абакан пр. Ленина 90

Хакасский государственный университет

им. Н.Ф. Катанова

e-mail: [ygafner@khsu.ru](mailto:ygafner@khsu.ru)

телефон: 8-961-744-3175

