

Отзыв

на автореферат диссертации Эссер Арины Александровны "Нанокластеры и локальные атомные конфигурации в структуре интерметаллидов", представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04- физическая химия

Исследование А.А. Эссер посвящено систематизации кристаллических структур интерметаллидов (более 27000) по признаку сходства нанокластерных структурных единиц, образующих этот класс соединений, а также определению локальной и глобальной топологии их связывания. Решение этой задачи возможно только при условии автоматизации процесса. Этот алгоритм реализован в комплексе программ кристаллохимического анализа ТОPOS, созданного Самарской кристаллохимической школой.

Положения и научные результаты, выносимые на защиту, научная новизна работы и выводы взаимосвязаны и подтверждены содержанием диссертационной работы, изложенным в автореферате. Автором впервые проведен кристаллохимический анализ всего массива структурно исследованных интерметаллидов, предложен новый метод топологической систематики, основанный на построении модели локального связывания нанокластеров в структурах, создана база данных топологических типов полиоболочечных нанокластеров, получены новые интерметаллиды, изучено их строение методом рентгеноструктурного анализа.

Замечания к автореферату относятся к типу стилистических

Подписи к рисункам на стр.14 и 18 не сразу воспринимаются из-за некоторой усложненности формулировок. Так, стр.14, рис.9 «Штриховка верхней и нижней части каждой ячейки таблицы», (кстати, штриховка совсем незаметна) можно заменить более четким «Полностью заштрихованные клетки ...» и «заштрихованные сверху и снизу выступают в качестве ,, соответственно.»

Интересно, что сверху заштрихована только клеточка атома висмута, есть ли у автора работы объяснение этому факту?

Рис.14, стр. 18 «Серым цветом выделены...» Все клетки таблицы выглядят серыми. Надо бы «Более темным цветом выделены ...»

Достоверность результатов гарантирована использованием современного комплекса программ и сопоставлением полученных результатов с частичными исследованиями не автоматизированного кристаллохимического анализа структур интерметаллидов.

Полученные данные могут быть включены в соответствующие справочники и в дальнейшем использоваться для идентификации соединений. Сведения о структурах, впервые установленных автором для кристаллов новых соединений, занесены в международный банк структурных данных и доступны мировому научному сообществу. Использование результатов работы возможно и в преподавательской деятельности в курсах по кристаллохимии и химии неорганических соединений.

Основные результаты докладывались на Российских и Международных конференциях, опубликованы тезисы 5 докладов и 4 статьи в рецензируемых журналах, («Кристаллография», «Inorg. Chemistry»).

Изложение материала в автореферате грамотное и логичное свидетельствует о научной зрелости А.А. Эссер.

Диссертация А.А. Эссер соответствует критериям, установленным п.9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года №842. Автор диссертационной работы, Арина Александровна Эссер, вполне достойна утверждения в искомом качестве кандидата химических наук по специальности 02.00.04—физическая химия

Нина Васильевна Подберезская
д.х.н., старший научный сотрудник,
Ведущий научный сотрудник
ФГБУН Института неорганической химии
им. А.В.Николаева СО РАН
по специальности «Физическая химия – 02.00.04» .

Н.В.Подберезская

630090 Новосибирск-90,
Проспект акад. Лаврентьева, 3
ИНХ СО РАН
e-mail podberez@niic.nsc.ru



Подпись Н. В. Подберезская
заверяю _____
Ученый секретарь ИНХ СО РАН
" 19 " 11 2015 г.