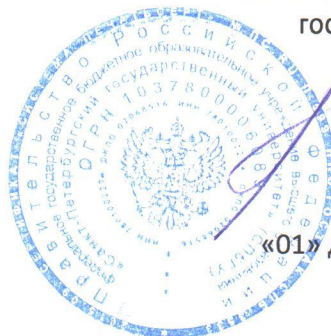


УТВЕРЖДАЮ

И.о. проректора по научной работе
Санкт-Петербургского
государственного
университета



С.В. Микушев

«01» декабря 2015 г.

О Т З Ы В

ведущей организации СПбГУ о диссертации Эссер Арины Александровны «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 А.А. посвящена исследованию в области структурной химии интерметаллидов. Работа представляется несомненно актуальной ввиду важности этого класса соединений с точки зрения их использования в разнообразных сферах современных технологий. В литературе накоплен огромный материал по их структурным характеристикам, который требует систематического осмысления и анализа. Целью работы А.А. Эссер было выявление локальных атомных конфигураций (как правило, наноразмерного уровня), выдерживающихся от структуры к структуре и построение на этой основе новой «нанокластерной» классификации и систематики интерметаллидов. Поставленные в работе цели и задачи представляются весьма важными и актуальными, а их решение имеет общий характер и вносит фундаментальный вклад в развитие кристаллохимии и структурной химии неорганических соединений.

В **первой главе**, названной «Обзор литературы», А.А. Эссер рассматривает основные принципы описания кристаллических структур интерметаллидов, предваряя его кратким экскурсом в общие принципы описания кристаллических структур неорганических соединений. Вторая часть этой главы (часть 1.2) называется «Способы кристаллохимического описания атомного строения интерметаллидов» и занимает всего 4 страницы, из которых 3 посвящены нанокластерному моделированию – теории, развиваемой авторами. Известно, что кристаллохимии интерметаллидов (или интерметаллических соединений) посвящена большая и разнообразная литература, которая, однако, заслуживает в диссертации лишь краткого и, можно сказать, снисходительного упоминания. Таким образом, остаётся без внимания широкий пласт, в частности, отечественной (или советской) литературы, посвященной изучению интерметаллидов -

например, львовской кристаллохимической школы. Достаточно упомянуть, что в списке литературы диссертации отсутствует фундаментальная монография П.И. Крипякевича «Структурные типы интерметаллических соединений» (М., 1977), а также монография Е.И. Гладышевского и О.И. Бодак «Кристаллохимия интерметаллических соединений редкоземельных металлов» (Львов, 1982). Очень слабо цитируется двухтомник Пирсона – один из самых крупных трудов по кристаллохимии интерметаллидов XX-го века. Не затрагиваются систематики интерметаллидов на основе чередования плоских сеток (см. монографию П.И. Крипякевича). Создается впечатление, что диссертант отбрасывает как ненужное целый пласт кристаллохимической литературы, имеющий непосредственное отношение к теме работы. По всей видимости, это связано с тем, что основной идеей работы было распространение использования комплекса TOPOS на класс интерметаллидов, что, несомненно, дало очень важные и интересные результаты. Вместе с тем, было бы принципиально важно поставить эти результаты в общий план кристаллохимических исследований интерметаллидов.

Вторая глава посвящена описанию экспериментальной работы автора по систематическому исследованию интерметаллидов. Здесь наряду с методами кристаллохимического анализа интерметаллидов с использованием нанокластерной модели и трехмерных сеток, излагаются особенности собственно «живого», непосредственного эксперимента, в результате которого были получены три новых соединения. Стоило бы все же выделить конкретные экспериментальные исследования, работу с веществом, в отдельный раздел. Не вполне понятно, где проводились эксперименты, и какую роль в них играл сам автор работы.

Третья глава представляет собой описание данных по изучению кристаллохимии интерметаллидов с помощью программного комплекса TOPOS. Эта глава содержит основные результаты работы и наиболее интересна и оригинальна. В частности, разбираются: геометрико-топологическая систематика интерметаллидов на основе топологических типов нанокластеров, статистика распределения интерметаллидов по разным структурно-топологическим типам, моделирование интерметаллидов как ансамблей нанокластеров и др. К главе имеется 50-страничное приложение, где в табличном виде сведены основные результаты анализа. На основании этой главы можно утверждать, что автором построена новая классификация интерметаллидов, основанная на точном компьютерном анализе кристаллических структур и поэтому имеющая достаточно высокий характер объективности и достоверности.

В заключительных разделах формулируются основные результаты и выводы работы.

Полученные в диссертации результаты представляются весьма значительными, прошли серьезную апробацию и опубликованы в ведущих научных журналах в области структурной и физической химии. Некоторые замечания все же необходимо сделать.

Как правило, теоретические разработки ценны тогда, когда основываются на глубоком и тонком восприятии экспериментальных данных. Теоретик призван опираться на опыт своих предшественников с тем, чтобы лучше и глубже понять, какой же вклад в понимание природы он может внести своими теоретическими моделями и разработками. Следовательно, необходимо серьезное знакомство с научной литературой – в данном случае, по кристаллохимии интерметаллидов, где было выявлено большое количество структурных корреляций и обобщений. К сожалению, подобного рода обзор и бережное внимание к работам ученых старших поколений в работе отсутствуют. Особенно это обидно в наше время, когда так хрупка научная преемственность и традиции российской (советской) науки могут быть утеряны. Можно рекомендовать автору более активно и глубоко использовать в своей работе разработки советской кристаллохимической школы (в частности, достижения львовской школы кристаллохимии интерметаллических соединений).

Сделанные замечания не понижают высокой научной ценности проделанной диссертантом работы и не умаляют заслуг А.А. Эссер. Результаты работы опубликованы в ведущих рецензируемых изданиях, рекомендованных ВАК РФ. Научная новизна, актуальность, практическая ценность полученных результатов, обоснованность и достоверность научных положений и выводов этой замечательной работы не вызывают сомнений. Автореферат отражает содержание диссертации, а сама диссертация полностью соответствует специальности 02.00.04 – физическая химия.

Диссертационное исследование Арины Александровны Эссер «Нанокластеры и локальные атомные конфигурации в структуре интерметаллидов» удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Отзыв составлен профессором кафедры кристаллографии СПбГУ профессором доктором геолого-минералогических наук С.К. Филатовым. Диссертация и отзыв рассмотрены и отзыв утвержден на заседании кафедры кристаллографии СПбГУ от 25 ноября 2015 г. (протокол заседания 2015/11).

Доктор геолого-минералогических наук,
Профессор

С.К. Филатов

Секретарь кафедры кристаллографии СПбГУ

Е.Ю. Авдонцева

ФГБОУ ВО СПбГУ
Россия, 199034, Санкт-Петербург,
Университетская наб. д. 7-9.
Эл.почта: spbu@spbu.ru
Тел: +7 (812) 328-20-00

