

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

Интерметаллические соединения в настоящее время являются одними из самых интересных и изучаемых объектов в химии твердого тела, кристаллохимии, физической и неорганической химии. Привлекает исследователей как богатство структурных типов, так и разнообразие физико-химических свойств таких объектов, корреляция между строением и свойствами. Последнее крайне важно не только с фундаментальной точки зрения, но и для создания на основе интерметаллических соединений новых функциональных и конструкционных материалов. Одним из важнейших аспектов с этой точки зрения является надежная и строгая систематизация структур интерметаллидов, установление родства между структурными типами, исследование вариантов структурных переходов.

Диссертационная работа Эссер Арины Александровны посвящена систематизации известных структур интерметаллических соединений на основе структурообразующих элементов – нанокластеров, исследованию локальной и глобальной топологии их связывания в структурах интерметаллидов. Следует отметить, что хотя описание интерметаллидов в терминах структурных единиц – «кластеров» - достаточно распространено в настоящее время (наряду с использованием классических представлений кристаллографии о структурных типах и упаковках), на сегодняшний день систематика такого описания является недостаточно проработанной, отсутствует унифицированный подход к проблеме, да и в целом число описанных при помощи кластерного подхода структур невелико по сравнению с общим числом известных интерметаллических соединений. С этой точки зрения задача разработки и усовершенствования подхода к систематизации интерметаллических структур любой сложности, поставленная в работе, является актуальной.

Для решения этой задачи автором был проведен детальный анализ почти 28000 структур интерметаллических соединений, имеющихся в актуальных базах кристаллографических данных, выделены основные полиоболочечные нанокластеры и создана база данных по топологическим типам 2017 полиоболочечных нанокластеров. В работе определены топологические параметры нанокластерных моделей строения всех имеющихся в базах данных интерметаллидов, Автором предложен новый способ топологической систематики интерметаллидов на основе модели локального связывания нанокластеров. Установлены взаимосвязи между составом металлических нанокластеров, локальной и глобальной топологией их связывания. Кроме того, автором синтезированы три новых интерметаллических соединения, на основании данных структурного анализа описаны их кристаллические структуры, проведен их анализ в терминах нанокластерного подхода.

Автореферат написан ясным языком и четко структурирован, текст хорошо отредактирован. Тем не менее, по тексту автореферата имеются следующие вопросы:

1. Известно, что химическая связь в интерметаллидах может быть разнообразной природы, от относительно слабых металлофильных взаимодействий до локализованных ковалентных. Существуют ли какие-либо особенности или


ограничения нанокластерного подхода в зависимости от типа связи в интерметаллиде? Например, существуют т.н. фазы Цинтля, ионные интерметаллиды, содержащие катионы щелочного металла и полианионы регулярной геометрии, являющиеся истинными полиэдрическими кластерами с ковалентными связями «металл-металл». Не осложняет ли это выбор «нанокластера» для описания?

2. В тексте автореферата нет объяснения причин, по которым были выбраны для синтеза именно системы Au-Mo-Zn и Cu-In-Mn, а также принципы выбора составов.

3. В комментарии к рис.16 в тексте говорится, что связывающие орбитали находятся ниже псевдощели (куда попадает уровень Ферми), а выше – несвязывающие. Это противоречит изображенным на рисунке СОНР. Как минимум для двух типов взаимодействий, Mo-Zn и Zn-Zn, на уровне Ферми наблюдается связывающий характер. Выше же по энергии для всех типов взаимодействий наблюдается антисвязывающий (разрыхляющий) характер.

Высказанные вопросы и замечания не носят принципиального характера и не снижают положительного впечатления от работы. В целом, диссертационная работа А.А. Эссер представляет собой законченное научное исследование, характеризующееся как большим объемом информации фундаментального характера, так и потенциалом для практического использования при прогнозировании строения и свойств новых интерметаллидов. Основное содержание работы изложено в 4-х статьях в высокорейтинговых журналах из списка ВАК и 5-и тезисах докладов на всероссийских и международных конференциях. На основании представленной в автореферате информации можно заключить, что работа «Нанокластеры и локальные атомные конфигурации в структуре интерметаллидов» по научной новизне, актуальности, практической значимости и достоверности соответствует всем требованиям, сформулированным в П.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» ВАК МО РФ, утвержденного постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013, а ее автор, Эссер Арина Александровна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Ведущий научный сотрудник
кафедры неорганической химии
Химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова,
д.х.н.


Кузнецов Алексей Николаевич

119991 Москва, ГСП-1
Ленинские горы, д.1, стр.3
Химический ф-т МГУ имени М.В. Ломоносова
тел. +7(495)9395502
email: alexei@inorg.chem.msu.ru

