

## О Т З Ы В

на автореферат диссертации **Макаровой Ирины Павловны**  
**“Структурные аспекты фазовых переходов в кристаллах-суперпротониках”**,  
представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук  
по специальности 01.04.18 – кристаллография, физика кристаллов

Проблема поиска путей и критериев разработки и реализации эффективных функциональных материалов с контролируемыми и целенаправленно управляемыми свойствами лежит в области пересечения интересов физики кристаллов и физического материаловедения. Решению ряда вопросов в рамках этой проблемы в немалой степени способствовали исследования, выполненные Ириной Павловной Макаровой, которые направлены на изучение особенностей трансформации кристаллической структуры при структурных фазовых переходах, в том числе в супер-протонное состояние, в широком круге кристаллов. Таким образом, результаты, полученные автором, вносят существенный вклад в развитие научного направления “кристаллические материалы с особыми свойствами”. Именно поэтому исследования, выполненные в рамках рассматриваемой диссертации, с полным основанием можно считать актуальными.

Автором четко и понятно сформулированы как цели и задачи исследований, так и положения, выносимые на защиту. Большинство представленных в работе результатов являются оригинальными. Это касается, в частности, выяснения роли диффузии кристаллизационной воды, вызывающей перестройку водородных связей, приводящей к значительному росту проводимости. Кроме того, несомненный интерес представляют данные исследования кинетических явлений, которые позволили установить возможность управления скоростью перестройки кристаллической структуры при фазовом переходе путем замещения тетраэдрического катиона сферическим.

Однако, с моей точки зрения, один из наиболее замечательных аспектов рассматриваемой работы заключается в том, что при анализе различного типа структур значительное внимание уделено вопросам, связанным с учетом анизотропии и ангармонизма тепловых колебаний критических атомов/ионов. Выбранный автором аналитический подход, несомненно, является плодотворным для построения адекватной модели механизма структурных искажений в результате фазовых переходах. В работе показано, что характер ангармоничности колебаний критических атомов может быть различным даже в родственных кристаллах, например в зависимости от катионного состава. Автор анализирует результаты структурных исследований в рамках двух конкурирующих моделей – статического и динамического разупорядочения. В результате

было показано, что суперпротонный фазовый переход в ряде селенатов и сульфатов, сопровождающийся значительным ростом проводимости, связан с изменением разупорядочения позиций атомов кислорода, формирующих картину водородных связей между тетраэдрами.

Автором корректно определен личный вклад в выполненные исследования. Апробация результатов работы, представленных на многочисленных научных конференциях различного профиля, а также список публикаций, выглядят вполне убедительно.

Представленный в работе богатый экспериментальный материал вполне можно было бы проанализировать также, рассматривая соотношение между количественной безразмерной величиной параметра ангармоничности тепловых колебаний атомов и энтропией фазовых переходов  $\Delta S$ . В соответствии с подходом, предложенным В.Г. Ваком [Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков, М., Наука, 1973], существует прямая связь между величиной  $\Delta S$  и отношением среднеквадратичного смещения критических атомов к квадрату межатомного расстояния. Однако высказанное пожелание не следует рассматривать как замечание.

Судя по автореферату, диссертация является серьезным научным исследованием по актуальной теме, выполненным на высоком экспериментальном уровне и позволившим получить новые надежные и важные научные результаты, и удовлетворяет требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, а ее автор, Ирина Павловна Макарова, несомненно, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.18 – кристаллография, физика кристаллов..

Флёрв Игорь Николаевич , доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории кристаллофизики Института физики им. Л.В. Киренского, Федерального исследовательского центра "Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук". 660036, Россия, Красноярск, Академгородок , д. 50, строение 38.  
Адрес электронной почты: flerov@iph.krasn.ru  
Телефон: +7 (391) 249 45 07

Подтверждаю согласие на обработку персональных данных  
28 сентября 2018 г.

Ученый секретарь ИФ СО РАН  
кандидат физико-математических наук



И.Н. Флёрв



А.О. Злотников

