

О Т З Ы В

на автореферат диссертации Смирновой Екатерины Сергеевны
«Структурные особенности монокристаллов мультиферроиков $R_{1-x}Bi_xFe_3(BO_3)_4$,
 $R = Gd, Y, Ho$, в интервале температур 11 – 500 К», представленной на соискание
ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности
01.04.18 – кристаллография, физика кристаллов

Несмотря на хорошую изученность мультиферроиков $RFe_3(BO_3)_4$ типа хантита, выявление связей их полифункциональных свойств с тонкими особенностями строения по-прежнему вызывает научный и практический интерес. Дальнейшие шаги в этом направлении сделаны в диссертационной работе Е.С. Смирновой, выполнившей большое по объему и тщательное исследование кристаллических структур $R_{1-x}Bi_xFe_3(BO_3)_4$ ($R = Gd, Y, Ho$) в широком интервале температур. Эксперимент проведен на современных монокристалльных дифрактометрах с температурными приставками с привлечением методов электронной микроскопии, EDS и EXAFS. На основе полученных данных автору удалось установить частичное замещение ионов РЗЭ примесными ионами Bi^{3+} , вычислить характеристические температуры Дебая и Эйнштейна для $(Y_{0.95}Bi_{0.05})Fe_3(BO_3)_4$ и $(Ho_{0.96}Bi_{0.04})Fe_3(BO_3)_4$, проследить изменение структур вблизи дисторсионных фазовых переходов соединений, сделать определенные выводы об их возможном механизме. Работа грамотно поставлена и выполнена на высоком научно-методическом уровне, данные о составе, строении и фазовых переходах изученных автором фаз представляются новыми и достоверными, а выводы – достаточно обоснованными. Полученные результаты вносят определенный вклад в кристаллохимию фаз типа хантита и могут быть использованы для построения более точных структурно-физических моделей функциональных свойств, что имеет несомненное научное и практическое значение.

Однако, трудно полностью согласиться с утверждением автора, что «смещение положений атомов бора и деформация треугольников BO_3 являются определяющими факторами изменения симметрии кристаллической решетки при структурном фазовом переходе» (с. 5–6). На с. 12–14 говорится, что подобные смещения и деформации происходят и в менее жестких, чем BO_3 -треугольники, координационных полиэдрах других трехвалентных катионов, что также сопровождается снижением их локальной симметрии. Значит, они тоже участвуют в кооперативном механизме перехода от более симметричной геометрии высокотемпературных фаз к более свободной, но искаженной – у низкотемпературных форм. Нельзя также назвать удачным описание структур ферроборатов как состоящих «из слоев атомов Fe и (R,Bi) , чередующихся со слоями треугольников BO_3 ». Напротив, очевиден каркасный мотив структуры, где винтообразные цепочки FeO_6 -октаэдров скреплены между собой призмами $(R,Bi)O_6$ и борат-ионами.

Из других замечаний отметим, что в автореферате отсутствуют таблицы с ключевыми структурными данными, не указаны погрешности в параметрах решеток и межатомных расстояниях, коды или хотя бы число депонированных структур. Осталась неясность в том, насколько однородны по составу выращенные кристаллы ферроборатов, или же автор ограничилась только изучением состава их фрагментов, на которых выполнен рентгеноструктурный анализ. Неудачны выражения «многотемпературных» (с. 4, 11) и «частично замещает кристаллографическую позицию редкоземельного элемента» (с. 4, 8 и др.). В последнем случае ведь замещаются атомы или ионы, а не их позиции.

Отмеченные недочеты носят главным образом дискуссионный или технический характер, и не затрагивают основные результаты диссертации. Представленный научный труд по своему объему, актуальности, новизне, научной и практической значимости отвечает требованиям, предъявляемым ВАК России к кандидатским диссертациям («Положение о порядке присуждения ученых степеней», утвержденное Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 № 842). Считаем, что автор представленной работы – Смирнова Екатерина Сергеевна – несомненно заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.18 – кристаллография, физика кристаллов.

29 сентября 2020 г.

Ведущий научный сотрудник
лаборатории кристаллохимии ИНХ СО РАН,
доктор химических наук, профессор

С.Ф. Солодовников

Главный научный сотрудник, заведующий
лабораторией кристаллохимии ИНХ СО РАН,
доктор физико-математических наук

С.А. Громилов

Солодовников Сергей Фёдорович, тел.: +7 (383) 330-94-66, E-mail: solod@niic.nsc.ru.

Громилов Сергей Александрович, тел.: +7 (383) 330-94-66, E-mail: grom@niic.nsc.ru.

ФГБУН Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН

630090 Россия, г. Новосибирск, просп. Ак. Лаврентьева, д. 3

Мы, Солодовников Сергей Фёдорович и Громилов Сергей Александрович, даём согласие на включение наших персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.

Подписи Солодовникова С.Ф. и Громилова С.А. удостоверяю.

Ученый секретарь ИНХ СО РАН, д.ф.н.



О.А. Герасько