# ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Александра Леонидовича Талиса «Структурные представления некристаллографических симметрийных конструкций в металлах, тетракоординированных соединениях и спиральных биополимерах», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.18 — кристаллография, физика кристаллов.

Развитие методов описания упорядоченных атомных структур является одной из фундаментальных и актуальных задач физики конденсированного состояния. Структура кристаллов характеризуется упаковкой полиэдров, симметрия которой лишь частично отображается пространственной федоровской группой. Неполное описание симметрии структуры вызывает проблемы в описании взаимных превращений структур. Принципиальные ограничения, связанные с использованием федоровских пространственных групп, могут быть сняты при использовании n-мерных (n>3) геометрических конструкций и приемов комбинаторной, алгебраической геометрии для установления более общих симметрийных свойств и генерирования полиэдрических упаковок атомов в E3. В представленной работе впервые поставлена цель развивать подобный подход и установить n-мерные ($3< n \leq 8$) конструкции для описания симметрии тетраэдрических и тетракоординированных структур, допускающих аппроксимацию цепями правильных и объединенных по граням тетраэдров.

С этой целью, для описания плотноупакованных тетраэдрических структур указанного типа использована решетка $E_8$ и политопные 4-мерные конструкции, отображение которых в E3 определяет систему порождающих кластеров тетраэдрических (ПКТ) структур и класс специальных винтовых осей, включающий кристаллографические, квазикристаллографические и нецелочисленные. Выделена структурная единица (тетраблок) и соответствующие ей ПКТ для сборки в $E_3$ тетраэдрических и тетракоординированных структур, приведено теоретико-групповое описание этой единицы. Представлены разнообразные сборки тетраспиралей из тетраблоков и их симметрийные свойства для генерирования плотноупакованных металлических структур и α-спиралей, моделирующих спиральные биополимеры. Отмечено, что взаимные трансформации между ПКТ позволяют смоделировать фазовые превращения в плотноупакованных тетраэдрических интерметаллидных структурах.

Значительное внимание в работе уделено генерированию и анализу симметрийных свойств (в пространстве $E_n$ с $n>3$) упорядоченных тетракоординированных структур типа алмазоподобных и углеводородо-подобных. На основе ПК тетраэдрических структур, установлены порождающие кластеры для этого типа структур и симметрийные условия их выбора, позволяющие их выделить из всего класса тетракоординированных структур. Подчеркивается, что выбор закона объединения ПК, включая "декорированные" кластеры, даст возможность сгенерировать симметрийно-возможные структуры углеводородных цепей, разновидности алмазоподобных структур и дефекты в алмазоподобных структурах.

Автореферат дает возможность оценить одно из основных достоинств этой работы – автор смог продемонстрировать плодотворность предложенного подхода, использующего алгебраическую и комбинаторную геометрию, для описания симметрийных свойств и генерирования широкого круга тетраэдрических и тетракоординированных структур. Были исследованы металлы и интерметаллиды, алмазоподобные структуры, углеводородные цепи (элементы фосфолипидных мембран), $\alpha$-спирали в глобулярных белках, газогидраты. Наиболее интересным приложением развиваемого автором подхода, как представляется, является моделирование атомистического механизма структурно-фазовых превращений.

Результаты, представленные в работе, хорошо апробированы и опубликованы в серии монографий и большом цикле журнальных статей в рецензируемой отечественной и зарубежной печати.

К тексту автореферата возникают следующие вопросы и замечания.

1. Автор подчеркивает, что рассматривает генерирование и симметрийные свойства только структур, которые могут быть аппроксимированы цепями правильных тетраэдров, соединенных по граням, и использует для этого n-мерные политопы, которые допускают разбиение пространства на тетраэдры. А есть ли n-мерные конструкции и какие, которые позволят снять эти ограничения, и сгенерировать другие типы трехмерных структур?
2. При изложении результатов главы 3, к сожалению, не приведены примеры конкретных фазовых превращений в плотноупакованных тетраэдрических интерметаллидных фазах, которые были смоделированы с использованием ПКТ кластеров и их спиральных объединений.
3. В главе 5 излагаются результаты по генерированию алмазоподобных структур, в том числе кристаллических с линейными дефектами. Приведен пример модели краевой дислокации в алмазной решетке. Из текста не совсем ясно, можно ли сгенерировать, используя предлагаемый

автором подход, все системы скольжения, наблюдаемые экспериментально для решетки алмаза?

Не смотря на высказанные вопросы и замечания, основываясь на автореферате и публикациях диссертанта, можно заключить, что диссертационная работа Талиса А. Л. вносит существенный и фундаментальный вклад в развитие подходов алгебраической и комбинаторной геометрии к генерированию и описанию наиболее общих симметрийных свойств тетраэдрических и тетракоординированных структур, которые отвечают большому классу соединений. По новизне, актуальности и фундаментальности полученных результатов диссертационная работа Талиса А.Л. отвечает всем требованиям ВАК РФ и Постановления Правительства РФ от 24.09.2013 №842 (ред. от 01.10.2018, с изм. от 26.05.2020) "О порядке присуждения ученых степеней" (вместе с "Положением о присуждении ученых степеней"), предъявляемым к докторским диссертациям. Автор представленной работы, Талис Александр Леонидович, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.18 — кристаллография, физика кристаллов.

Шалаева Елизавета Викторовна
Доктор химических наук
Ученое звание: старший научный сотрудник
Должность: ведущий научный сотрудник
Организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук (ИХТТ УрО РАН)
Почтовый адрес: 620990, Екатеринбург, ИХТТ УрО РАН, ул. Первомайская, 91, лаборатория квантовой химии и спектроскопии им. проф. А.Л. Ивановского
Телефон: 8(912) 674-81-23
E-mail: shalaeva@ihim.uran.ru

Согласна на обработку персональных данных
Шалаева Е.В.

4.03.2021

Подпись д.х.н., в.н.с. Е.В. Шалаевой удостоверяю

Ученый секретарь ИХТТ УрО РАН

к.х.н. Богданова Е.А