

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Захарова Б.А. «Рентгеноструктурный анализ при переменных давлениях и температурах для изучения превращений в молекулярных кристаллах», представленной на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 01.04.18 – кристаллография, физика кристаллов.

Молекулярные кристаллы входят в состав многих современных функциональных материалов, которые используют в оптоэлектронике, фотонике, катализе и электрокатализе, протонных проводниках, фотосенсибилизаторах, при хранении и разделении газов, в создании новых фармацевтических субстанций и носителей для их доставки, и во многих других приложениях. Обеспечение стабильности свойств новых материалов при меняющихся внешних условиях требует фундаментальных знаний об их внутреннем строении, а такие знания должны опираться на надежные экспериментальные данные. В диссертации Б.А. Захарова первостепенное внимание уделяется как раз процедуре получения таких экспериментальных данных для молекулярных кристаллов непосредственно при меняющихся температуре и давлении, и поэтому **практическая значимость** данной работы очевидна. Несомненной представляется и **актуальность** выбранной темы, если принять во внимание, что все дифракционные эксперименты приводили к получению монокристалльных наборов интенсивностей, что позволяет наиболее точно характеризовать любые структурные изменения. И в этом смысле результаты Б.А. Захарова могут служить ориентиром для многочисленных исследователей, которые пытаются решать аналогичные задачи, работая с поликристаллическими образцами в нанометровом диапазоне.

Среди результатов Б.А. Захарова многие получены впервые, что свидетельствует об их **научной новизне**. Так для соединения $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{NO}_2]\text{Br}_2$ при 6,9 ГПа обнаружена ранее неизвестная фаза высокого давления; для соединения $\text{Y}_2(\text{C}_2\text{O}_4)_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ впервые обнаружено и объяснено явление дегидратации под давлением; а для 1,2,4,5-тетрабромбензола удалось впервые сопоставить структурные изменения, связанные с изменениями температуры и давления, с фазовым переходом при нагревании, сопровождающимся макроскопическим механическим откликом, или «прыжком» кристалла. Причем «прыжок» кристалла происходил через некоторое время после термически индуцированного фазового перехода, чему было предложено возможное объяснение. Впервые на монокристаллах различных соединений изучено влияние передающей среды, исходной полиморфной модификации, наличия затравки и протокола варьирования давления на происходящие структурные трансформации. Важными представляются результаты проведения дифракционных экспериментов на различных дифрактометрах, обсуждаемые в шестой главе, из которых следует, что технология детектирования и последующая обработка дифракционных данных влияют на получаемые количественные характеристики в гораздо большей степени, чем величина интенсивности падающего излучения.

К автореферату Б.А. Захарова есть два стилистических замечания:

- 1) на с. 6 сформулирована цель работы, и сформулирована она, на мой взгляд, не совсем удачно, так как затрудняет понимание того, на чем фокусировался автор в своем диссертационном исследовании – на разработке общей экспериментальной методики проведения таких монокристалльных измерений, или на интерпретации результатов этих измерений для конкретных соединений;
- 2) соискатель неоднократно использует слово «оптимизация» в применении к плотности упаковки, системе водородных связей, а также к межмолекулярным взаимодействиям, не раскрывая сути этой оптимизации - в чем она состоит?

Несмотря на высказанные замечания и опираясь на изложенный в автореферате материал считаю, что диссертационная работа Б.А. Захарова по своей актуальности, научной и практической значимости, достоверности впервые полученных результатов отвечает всем требованиям ВАК РФ и Постановления Правительства РФ от 24.09.2013 N 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, а ее автор Б.А. Захаров заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 01.04.18 – кристаллография, физика кристаллов.

Чернышев Владимир Васильевич
Доктор физико-математических наук
Должность: ведущий научный сотрудник
Организация: химический факультет Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»,
Почтовый адрес: 119991 ГСП-1, Москва, Ленинские Горы, дом 1, строение 3
Тел. 8-495-9393654
Эл. почта: vladimir@struct.chem.msu.ru

Согласен на обработку персональных данных.

ВЗ
✓
02.07.2020

Подпись д.ф.-м.н., вед. науч. сотр. В.В. Чернышева удостоверяю

