

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации

**ЗАХАРОВА Бориса Александровича**

**«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

В настоящее время многие органические молекулярные кристаллы признаны перспективными материалами для изготовления функциональных элементов различных электронных, электрооптических и электромеханических устройств, тогда как разработка новых лекарственных форм традиционно является одним из приоритетных направлений развития современной медицины и фармакологии. В связи с этим, рентгеноструктурный анализ органических кристаллов, в том числе при различных температурах и давлениях, является одной из наиболее востребованных задач кристаллографии, что в полной мере определяет **актуальность диссертационной работы Захарова Б.А.**

Низкая симметрия молекулярных кристаллов, большое количество атомов в элементарной ячейке, преимущественно легкие, слаборассеивающие атомы в составе, чувствительность к рентгеновскому излучению высокой интенсивности – все эти факторы существенно затрудняют, а иногда и делают невозможной расшифровку структур и детектирование слабых искажений молекулярных фрагментов под действием давления или температуры. Поэтому систематические исследования взаимосвязи отклика кристалла на внешнее воздействие с его структурными превращениями, проведенные Захаровым Б.А. представляют **значительный научный и практический интерес.**

Захаровым Б.А. развит подход к исследованию структурных превращений молекулярных кристаллов при варьировании температуры или давления методом монокристалльного рентгеноструктурного анализа и получен ряд новых результатов, среди которых следует особо отметить следующие:

1. Автором впервые систематически исследованы такие факторы, влияющие на твердофазные превращения под давлением, как передающая среда, исходная полиморфная модификация, наличие затравки и протокол варьирования давления. Учет этих факторов критически важен при интерпретации результатов экспериментов.

2. Выявлено влияние дифракционного оборудования и стратегии обработки экспериментальных данных на качество структурных моделей, выработаны соответствующие практические рекомендации по проведению таких измерений.

3. Для ряда молекулярных кристаллов получены новые структурные данные, которые впервые сопоставлены со структурными изменениями, наблюдающимися в результате фазовых переходов и химических реакций, в том числе для таких специфических, как те, при которых наблюдается отложенный макроскопический механический отклик кристалла. Автором предложено объяснение этого эффекта.

4. Полученные структурные данные позволили выявить новые закономерности, характерные для молекулярных кристаллов. В частности, впервые продемонстрирована связь структурных изменений в отсутствие фазовых переходов с оптимизацией сети водородных связей, а также обнаружены и охарактеризованы неизвестные ранее кристаллические фазы, образующиеся при варьировании внешних условий.

Представленная работа содержит **принципиально новые научные результаты**, имеющие существенное значение как для развития кристаллографии, физики кристаллов и химии твердого тела, так и с точки зрения возможных практических применений. Автореферат написан связно и понятно, оформлен соответствующим образом. Содержание автореферата соответствует специальности, по которой диссертация представлена к защите, он в достаточной мере информативен и дает полное представление о работе. Все положения, выносимые на защиту, подкрепляются полученными автором результатами, которые прошли достойную апробацию – они опубликованы в виде монографии и в 22 статьях в ведущих международных кристаллографических журналах, а также доложены на 19 авторитетных всероссийских и международных конференциях.

По изложенному в автореферате материалу можно заключить, что диссертационная работа Б.А. Захарова по своей актуальности, достоверности полученных результатов, научной новизне и практической значимости 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, Борис Александрович Захаров, заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 01.04.18 – кристаллография, физика кристаллов.

Шур Владимир Яковлевич  
доктор физ.-мат. наук, профессор  
Главный научный сотрудник,  
директор Уральского ЦКП «Современные нанотехнологии»,  
Института естественных наук и математики, Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»,  
Адрес: 620000, г. Екатеринбург, ул. Ленина 51  
Телефон: (343) 389-95-68  
E-mail: [vladimir.shur@urfu.ru](mailto:vladimir.shur@urfu.ru)

Я, Шур Владимир Яковлевич, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой объединенного совета Д 002.114.01, и их дальнейшую обработку.

04 августа 2020 г.

Зеленовский Павел Сергеевич  
кандидат физ.-мат. наук, доцент  
Старший научный сотрудник  
лаборатории наноразмерных сегнетоэлектрических материалов,  
доцент кафедры физики конденсированного состояния и наноразмерных систем,  
Института естественных наук и математики, Федерального государственного  
автономного образовательного учреждения высшего образования «Уральский  
федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»,  
Адрес: 620000, г. Екатеринбург, ул. Ленина 51  
Телефон: (343) 389-95-68  
E-mail: [zelenovskiy@urfu.ru](mailto:zelenovskiy@urfu.ru)

Я, Зеленовский Павел Сергеевич, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой объединенного совета Д 002.114.01, и их дальнейшую обработку.

04 августа 2020 г.

Подписи д.ф.-м.н., профессора Шура В.Я. и к.ф.-м.н., доцента Зеленовского П.С.  
заверяю.

Ученый секретарь  
Ученого совета Института  
естественных наук и математики



Памятных Л.А.