

Отзыв

На автореферат диссертации ЧЕРНЯТЬЕВОЙ Анастасии Петровны “Кристаллохимия ряда природных и синтетических фосфатов и сульфатов со смешанными анионными радикалами”, представленной на соискание ученой степени кандидата геолого-минералогических наук по специальности 25.00.05 – минералогия, кристаллография.

Диссертационная работа Чернятьевой А.П. посвящена исследованию структур природных минералов – сульфатов и фосфатов, – а также синтетических диортофосфатов переходных металлов. Возможность структурных адаптаций при изменении состава данных соединений приводит к реализации различных структурных типов и, как следствие, огромному количеству природных минералов, список которых пополняется год от года. Синтетические возможности химии ещё больше расширяют перечень подобных соединений, часть из которых находит и практическое применение в качестве матриц для иммобилизации радионуклидов.

В качестве объектов исследований были выбраны природные фосфаты и сульфаты щелочных/щелочноземельных и переходных металлов, а также их синтетические аналоги. Выполнен большой объем работы: синтезированы пять новых соединений, определены их структуры, а также структуры ряда природных минералов. Сложность данного исследования заключается, в первую очередь, в наличии в минералах кристаллизационной воды и/или гидроксильных групп, определение и локализация которых в структурном анализе является непростой задачей. Установление же системы водородных связей в структуре вендидаита показывает, что автору под силу решать такие сложные задачи.

Следует также отметить, что представленная работа выполнена практически полностью самой Чернятьевой А.П., что говорит о ней как о хорошо подготовленном специалисте. Результаты данной работы опубликованы в шести статьях в международных и российских рецензируемых научных журналах и доложены на множестве конференций, как российских, так и международных. Остается добавить, что проведенные исследования, хотя и не имеют ярко выраженного прикладного характера, позволяют использовать полученные результаты для разработки материалов для атомной промышленности.

В качестве замечаний по автореферату следует отметить следующие.

1. Основное замечание связано с терминологией. Использование термина “радикал” в применении к атомным или ионным группировкам начинается с Антуана Лавуазье и закрепляется в 30-х годах XX века. В химии это определение относится к атомам или атомным группировкам с неспаренным электроном. Использование этого термина при описании полиатомных анионов может быть оправдано с исторической точки зрения, но вызывает непонимание у химиков. Также неудачным является термин “полимеризуется” (страница 10) при описании структуры гервасита.

2. Практически отсутствует описание методик монокристалльных экспериментов. В ряде случаев отсутствие описаний оказывается существенным. Известно, что обезвоженные алюмокалиевые квасцы на воздухе активно сорбируют воду. В автореферате не указано, какие меры предосторожности принимались по предохранению кристалла $KAl(SO_4)_2$ от гидратации.

3. В Таблицах 1 и 2 (результаты структурных уточнений) необходимо указать величины остаточных пиков электронной плотности. В таких сложных структурах именно эти величины указывают на полноту расшифровки структуры.

4. Рисунки 10 и 11 следовало бы привести в одном стиле и формате. Это позволило бы наглядно оценить различие α и β модификаций $CsCuPO_4$.

5. Из рисунка 13 следует, что содержание щелочных металлов в $Rb_2CuP_2O_7$ в полтора раза выше, чем в родственном $CsNaCuP_2O_7$. Никаких объяснений в тексте не найдено.

6. Вызывают сомнение данные по числу формульных единиц в таблице 2. Указанное для $CsNaCuP_2O_7$ значение $Z=1$ приводит к 63 \AA^3 на атом и плотности 0.86 г/см^3 . Даже для $Rb_2CuP_2O_7$ ($Z=2$) эти величины выглядят аномально (33 \AA^3 и 1.71 г/см^3 соответственно). Если это не ошибки, такие аномальные случаи требуют обязательного пояснения в тексте.

В целом, достоверность полученных результатов не вызывает сомнений. Работа выполнена на высоком научном уровне, а её автор, ЧЕРНЯТЬЕВА Анастасия Петровна, заслуживает присуждения степени кандидата геолого-минералогических наук.

Член-корр. РАН, профессор
Химического Факультета МГУ, д.х.н.,

Антипов Е.В.

Старший научный сотрудник
Химического Факультета МГУ, к.х.н.,

Миронов А.В.



Антипов Евгений Викторович – 119992, Москва, Ленинские Горы, д.1, стр.3; химический факультет Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова; профессор; +7(495)9393375; antipov@icr.chem.msu.ru

Миронов Андрей Вениаминович – 119992, Москва, Ленинские Горы, д.1, стр.3; химический факультет Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова; старший научный сотрудник; +7(495)9395244; avmironov@icr.chem.msu.ru