

ОТЗЫВ НА АВТОРЕФЕРАТ

диссертации Гореловой Людмилы Александровны «Кристаллохимия ряда природных и синтетических боросиликатов и силикатов бария и кальция», представленную на соискание ученой степени кандидата геолого-минералогических наук по специальности 25.00.05 - минералогия, кристаллография.

Кристаллохимия боросиликатов – одна из самых «изящных» в топологическом аспекте среди всех без исключений классов природных неорганических соединений. Широкое применение боросиликатов в технике и электронике обуславливает актуальность рецензируемого диссертационного исследования. Научная новизна диссертации заключается в расшифровке новых кристаллических структур, обнаружению полиморфных переходов в изучаемых соединениях, определении коэффициентов термического расширения и механизмов термических деформаций. Интерес к тематике данной работы настроил рецензента на скрупулезное изучение автореферата, что привело, безусловно, к появлению вопросов и замечаний.

Замечания по автореферату логично разделить на две группы: принципиальные замечания по существу и замечания по оформлению автореферата.

Замечания по существу работы.

1. Термин «шарнирный механизм» не настолько очевиден, чтобы его вводить непосредственно в защищаемые положения (3-ья страница автореферата) без предварительного объяснения.

2. Автор утверждает (стр. 8), что уменьшение объема элементарной ячейки $\text{Ba}_3\text{B}_6\text{Si}_2\text{O}_{16}$ «может быть связано с перераспределением катионов В / Si по позициям». Рецензенту это не понятно. Хотелось бы увидеть количественную модель (или хотя бы полуколичественное объяснение)

такой возможной взаимосвязи.

3. В тексте автореферата говорится, что две тетраэдрические позиции из трех в структуре $\text{Ba}_3\text{V}_6\text{Si}_2\text{O}_{16}$ являются смешанными, и лишь позиция $T3$ – заселена исключительно бором. Хотелось получить, во-первых, объяснение этого эффекта, а во-вторых, понять, насколько $T4$ -полиэдр правомочно называть VO_3 треугольником (ведь в случае кремния он назван тетраэдром). Логично было бы и в рисунке 2 тетраэдры подписать как $T1$ и $T2$.

4. Непонятно содержание рис. 11 (даже если абстрагироваться от недопустимо низкого разрешения графиков). Английские подписи осей совершенно непонятны и не объясняются в тексте. Какая метка на графике соответствует какому соединению – не подписано. Если этот рисунок не автора, а Шеннона, то необходимо было привести ссылку на первоисточник в подрисуночной подписи.

5. Рецензент категорически не согласен с диссертантом, который утверждает, что положение о том, что «повышение температуры подобно понижению давления или замещению меньших атомов большими» было сформулировано Филатовым в 1973 году. При всем уважении к С.К. Филатову, совершенно очевидно, что этот тезис был сформулирован впервые намного раньше.

6. Рецензенту не понятен вывод 5 работы. Что такое «сложность» структуры? Что за единицы измерения «бит на ячейку»? Если оценка проводилась на основе методики автора или его коллег, то напрашивается хотя бы минимальное объяснение этой методики в тексте! Непонятно почему для одних структур точность определения «сложности» невысока, а для говлита – на три порядка выше.

Замечания по оформлению работы.

1. Рецензент не совсем понял фразу автора (стр. 7): «...за совместную работу в области динамической кристаллохимии – обсуждение планов и результатов работы. Что такое «динамическая кристаллохимия»? Допустим,

тире можно заменить на запятую. Но вопрос о термине останется все равно.

2. Таблица 1. Данные для окаямаита приведены при комнатной температуре, что оговорено сноской особо. Для остальных соединений температура, к сожалению, не указана вовсе.

3. Рисунок 4 очень низкого качества. В «авторефератном» исполнении, вероятно, его проще было бы вообще не приводить, чем приводить в таком виде. Ось абсцисс абсолютно нечитаема. Непонятна и подпись к оси ординат. Что такое $T^{1/2}$? На графике подписаны только пики неизвестно откуда появившейся платины (10%), из сноски выясняется, что образец состоит еще из волластонита (8%) и кристобалита (1%), хотя в тексте реферата рисунок называется «уточнение структуры НТ-окаяалита». Названия минералов на рисунке 4 почему то подписаны на английском языке, хотя язык, на котором планирует защищаться диссертант – русский.

4. Непонятна пространственная группа тетрагональной модификации НТ-окаяалита ($P-42_1m$, как написано на странице 11, $P42_1m$, как указано в рис. 5 или все-таки $P 2_1m$?).

5. Непонятно, зачем часть текста в подписи к таблице 2 приведена курсивом.

6. Рисунок 10. Рецензенту опять совершенно непонятна мотивация автора, отдающего неоправданные предпочтения английским словам, сокращениям и буквам. Почему бы в тексте русской работы тетраэдры, концевые атомы которых направлены вверх обозначить русской буквой «в»; вниз – «н», а не английскими «u» и «d», соответственно? Заметим, что на рисунке, приведенном в автореферате, разница между сплошными и штрихпунктирными линиями практически неразличима, что затрудняет распознавание этих тетраэдров.

7. Зачем вводятся обозначения O_{br} и O_t (стр. 19), если эти сокращения далее по тексту автореферата нигде не используются?

Приведенные замечания не умаляют общего положительного

впечатления о работе. Несмотря на указанные недостатки, можно сделать вывод, что диссертация Гореловой Л.А. является вполне законченным самостоятельным научным исследованием. В работе Гореловой Л.А. присутствует значительная доля научной новизны, подтвержденной представленными в списке литературы публикациями автора, в том числе в журналах из перечня периодических изданий, рекомендуемого ВАК.

Диссертация полностью соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата наук, а её автор, Горелова Людмила Александровна заслуживает присуждения ему учёной степени кандидата геолого-минералогических наук по специальности 25.00.05 – минералогия, кристаллография.

Рецензент – доктор химических наук,
заведующий кафедрой кристаллографии
и кристаллохимии геологического
факультета МГУ имени
М.В.Ломоносова, профессор РАН



Подпись Еремина Н.Н. заверяю
канцелярий геологического ф-та
М.Г. Вебер

Еремин Николай
Николаевич
25 мая 2017 г.

Данные о рецензенте:

Доктор химических наук (2009) по специальности 25.00.05 -
Минералогия, кристаллография.

Контактные данные: 119992, Москва, Ленинские горы 1А,
Геологический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, заведующий
кафедрой кристаллографии и кристаллохимии.

e-mail: neremin@geol.msu.ru
neremin@mail.ru