

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации П.Н. Золотарева «Структурные дескрипторы и взаимосвязи между строением и некоторыми физическими свойствами молекулярных кристаллов с водородными связями», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности «Физическая химия – 02.00.04».

Диссертационная работы. П.Н. Золотарева актуальна своей связью с десятками тысяч реальных структур с целью выяснения закономерностей упаковок, способа локального связывания и глобальной топологии, нахождения водородных связей и спайности молекулярных кристаллов. Надо сказать, что анализ закономерностей упаковок в структурах всегда отставал от анализа стереохимического из-за отсутствия соответствующего программного обеспечения. С появлением комплекса для анализа топологии расположения молекул в кристаллах появилась возможность анализировать большие массивы структурных данных и сортировать упаковки по топологическим типам, среди которых уже найдены встречающиеся наиболее часто. Появилась возможность выхода на некоторые физические свойства кристаллов. И работа Павла Николаевича Золотарева одна из первых на этом пути. Особую ценность представляет оценка анизотропии межмолекулярных связей, определяющей технологически важные свойства кристаллических материалов (прочность, упругость, спайность). Предложены количественные параметры, опирающиеся на модельные оценки энергий межмолекулярных взаимодействий и дающие интегральные оценки этих характеристик (дескрипторы X и A).

В качестве замечания: хотелось бы знать, сколько действительно прецизионных работ было в выборке данных, использованных автором? Ведь получение прецизионных данных требует особого эксперимента (стр. 5).

Работа П.Н. Золотарева по своим научным задачам и полученным результатам удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациями физико-химического профиля.

Результаты работы весьма подробно опубликованы в авторитетных научных журналах и доложены на Международных и Российских конференциях.

Автореферат свидетельствует о том, что диссертация П.Н. Золотарева соответствует критериям, установленным п.9 «Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года, №842».

У нас нет сомнений, что Павел Николаевич Золотарев по своему профессиональному уровню и по вкладу в кристаллохимию и кристаллографию соответствует уровню кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, и работа будет положительно оценена Ученым советом.

Согласны на обработку персональных данных.

10 сентября 2018 года

Нина Васильевна Подберезская
д.х.н., старший научный сотрудник,
Ведущий научный сотрудник
ФГБУН Института неорганической химии
им. А.В.Николаева СО РАН
по специальности «Физическая химия – 02.00.04»
e-mail podberez@niic.nsc.ru

Подб

Н.В.Подберезская

Станислав Васильевич Борисов
д.ф.-м.н., профессор,
Главный научный сотрудник
ФГБУН Института неорганической химии
им. А.В.Николаева СО РАН
по специальности «Кристаллография, кристаллофизика – 01.04.18»
e-mail borisov@niic.nsc.ru

Бор

С.В. Борисов

Адрес для переписки:

630090 Новосибирск-90,
Проспект акад. Лаврентьева, 3,
ИНХ СО РАН

Подпись *Н. В. Подберезку*
заверяю *Г. Гер*
Ученый секретарь ИНХ
" 10 " 09 2018 г.

