

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Золотарева Павла Николаевича
«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
02.00.04 — физическая химия

Диссертационная работа Павла Николаевича выполнена в русле исследований, проводимых профессором В.А.Блатовым и его сотрудниками на протяжении многих лет. Опираясь на разработанные ими алгоритмы геометрико-топологического анализа больших, в десятки тысяч, выборок кристаллических структур органических соединений, соискатель проводит классификацию системы межмолекулярных водородных связей с привлечением разработанной Г.Дезираджу концепции супрамолекулярных синтонов, переосмысленной в рамках топологической кристаллохимии. Статистический анализ встречаемости тех или иных локальных топологий систем водородных связей позволяет автору выявить взаимосвязи локальной и глобальной топологии и выйти на уровень предсказания последней, исходя из строения органической молекулы. По сути, соискатель предлагает свой вариант ответа на чрезвычайно актуальный вопрос современной кристаллохимии — предсказание кристаллической структуры органического вещества, пусть даже и для частного случая, когда кристаллы не содержат молекул растворителя.

Особая ценность данной диссертационной работы, на мой взгляд, заключается в том, что соискатель не останавливается на этой стадии, а делает следующий шаг — переходит к предсказанию таких макроскопических свойств кристаллов, как плоскости спайности, а также предлагает свое объяснение гибкости молекулярных кристаллов. Для этого ему приходится выйти за рамки геометрико-топологического подхода и привлечь метод PIXEL (А.Гавезотти), а также квантово-химические расчеты. Более того, соискатель не останавливается и на этом — для проверки своих прогнозов он ставит эксперименты по выращиванию кристаллов и определению их механических свойств. Таким образом, мы видим перед собой яркий пример органичного сочетания компьютерного анализа больших массивов данных и эксперимента в рамках одной кандидатской работы.

Мои замечания касаются предлагаемых автором структурных дескрипторов, характеризующих анизотропию прочности межмолекулярных взаимодействий. Прежде всего неясно, зачем вводился критерий AI . В автореферате приведен лишь один пример его использования (стр.21), который к тому же лишь доказывает, что данный дескриптор *не объясняет*, почему одни кристаллы гибкие, а другие — хрупкие. Из этого можно сделать вывод, что он оказался неэффективен, а были ли примеры обратного? Для второго дескриптора (параметр X) автор почти всегда (например, в таблице 2) приводит лишь одно значение, для одной кристаллографической плоскости. Но, насколько я понял, само по себе значение этого параметра неинформативно — нужно сравнивать величины X для различных плоскостей. Следует также иметь в виду, что кристаллографических плоскостей в кристалле, строго говоря, бесконечно много. Какие из них соискатель предлагает выбрать (и выбирает) для сравнения? Какими величинами индексов hkl он ограничивается и почему? Наконец, для β -аланина в тексте автореферата (стр.18) соискатель, сравнивая величины X для граней 001, 100 и 111, утверждает, что раскалывание кристалла в направлении $\{111\}$ обусловлено более высоким значением

$X(111) = 0.685$. Однако в подписи к рис.11(г) приводится еще более высокое значение $X(010) = 0.902$. Как это согласуется с текстом?

В работе также встречаются не совсем корректные термины, такие как «орторомбический кристалл» (дословный перевод с английского, в русскоязычной литературе принят термин «ромбический»), «прецизионность использованных рентгеноструктурных методов определения кристаллической структуры» (термин «прецизионный» в контексте рентгеноструктурного анализа обычно указывает на исследования распределения электронной плотности в кристаллах).

Указанные недостатки никоим образом не умаляют актуальности, новизны, научной и практической значимости работы, полностью удовлетворяющей требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (с изменениями от 21 апреля 2016 г. №335). Соискатель безусловно заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 — физическая химия.

Вировец Александр Викторович



Alexander V. Virovets

Prof. Dr. M. Scheer
tät Regensburg
norganische Chemie
Regensburg
Germany

Доктор химических наук по специальности
02.00.04 – физическая химия

Кафедра профессора доктора М. Шеера,
Институт неорганической химии,
Университет Регенсбурга,
ул. Университетская, 31, г. Регенсбург, 93053,
Федеративная Республика Германия
тел. +49-941-943-4779, факс +49-941-943-4439
email: avvirovets@yahoo.com

Doktor habilitatus

Lehrstuhl Prof. Dr. M. Scheer,
Institut für Anorganische Chemie,
Universität Regensburg
Universitätsstr. 31, 93053 Regensburg,
Deutschland
tel. +49-941-943-4779, fax +49-941-943-4439
email: avvirovets@yahoo.com

Я, Вировец Александр Викторович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку