

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Голошумовой Алины Александровны «Новые кристаллы стронцийсодержащих галогенидов: поиск, выращивание и исследование их структуры и функциональных свойств», представленной на соискание учёной степени кандидата геолого-минералогических наук по специальности 25.00.05 – минералогия, кристаллография.

Диссертация А.А. Голошумовой посвящена синтезу новых стронцийсодержащих галогенидов, их комплексному исследованию с привлечением порошковых и монокристалльных рентгendifракционных методик, адсорбционной/люминесцентной спектроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния, газовой хромато-масс-спектроскопии, оптической микроскопии, поляризационно-оптических методов. Качество полученных образцов не вызывает сомнений, и все эксперименты выполнены на высочайшем уровне.

Несомненным достоинством работы является обнаружение того факта, что внедрение трехвалентных ионов редкоземельных элементов в матрицу SrI_2 позволяет сократить время затухания люминесценции до 20-60 нс, что является рекордно низким по сравнению со временем затухания 1200 нс в широко используемом кристалле $\text{SrI}_2:\text{Eu}^{2+}$.

Исследование системы $\text{SrB}_2\text{-PbBr}_2$ позволило получить довольно крупные монокристаллы с химической формулой SrPb_3Br_8 , структура которых до этого времени была неизвестна. Высокая плотность соединения и хорошие оптические характеристики позволяют рассматривать новый материал как потенциальный сцинтиллятор для регистрации гамма-излучения.

Особое внимание заслуживает обнаруженный в кристалле SrMgF_4 фазовый переход второго рода $P2_1 \leftrightarrow Cmc2_1$ при нагреве вблизи 480 К. Физические свойства этого соединения, и его структура исследуются учёными с 80-х годов, однако фазовый переход обнаружен лишь автором этой диссертационной работы. Это стало возможным благодаря тщательному, систематическому исследованию кристалла, с использованием всех доступных экспериментальных методик, что положительно характеризует Алину Александровну как учёного.

В качестве замечаний, не умаляющих научной и практической значимости работы, можно отметить следующее:

1. Автор пишет на стр.11 автореферата о том, что положение всех пиков на рентгенограмме SrPb_3Br_8 сильно смещены в сторону меньших углов, что указывает на увеличение параметров элементарной ячейки. Однако, стоит отметить что существует еще один параметр сильно влияющий на положение рефлексов – это смещение поверхности образца из нулевой плоскости дифрактометра. Смещения зависят от упаковки образца, и многих других факторов, и могут принимать значения от -0.1 до 0.1° по углу 2θ . Учесть такие смещения рефлексов, позволяет полнопрофильное уточнение методом Ритвельда. Полученные параметры и объем ячейки в результате уточнения являются надёжными и их уже можно сравнивать с соответствующими параметрами других соединений, делать выводы. В данном случае структура была подтверждена монокристалльной съемкой и нет оснований полагать, что ошибка была совершена. Однако, эти факты стоит учитывать в дальнейшей работе чтобы избежать ошибок.

2. На стр.12 автореферата написано, что координационные полиэдры ионов Sr^{2+} и Pb^{2+} в соединении SrPb_3Br_8 представляют собой одношапочные тетрагональные призмы. Однако,

на рис.9 видно, что основания этой «тетрагональной призмы» повёрнуты друг относительно друга на угол $\sim 45^\circ$. Эта фигура имеет другое название – квадратная антипризма, поэтому полиэдр можно считать одношапочной квадратной антипризмой. Более детальное исследование полиэдра PbBr_9 в соединении PbBr_2 из базы данных обнаруживает его сходство с полиэдрами SrBr_9 и PbBr_9 в соединении SrPb_3Br_8 , а также то, что эти полиэдры на самом деле ближе к трёхшапочной тригональной призме. Она является широко распространённой в координационных соединениях, и именно так и надо характеризовать все эти полиэдры в исследуемых соединениях.

3. Стоило указать, что, несмотря на смещения ионов Sr^{2+} и Pb^{2+} в соединении SrPb_3Br_8 по сравнению с ионами Pb^{2+} в соединении PbBr_2 , и небольшие деформации параметров ячеек, все же эти две структуры являются изоструктурными. Это позволяет группировать их в один структурный тип. Депонирование изоструктурных соединений не запрещается в структурном банке данных ICSD, и является полезной информацией.

4. Структура комнатной фазы $P2_1$ соединения SrMgF_4 была решена из монокристалла ранее (N. Ishizawa, K. Suda, B.E. Etschmann, T. Oya, N. Kodama. Acta Cryst C 57 (2001), pp.784-786), однако упоминания в автореферате об этом исследовании нет. Более того стоило упомянуть о публикациях, в которых предполагается, что это соединение имеет пространственную группу $P2_1/m$ и даже $Cmcm$.

5. Опечатки:

- стр. 6 автореферата, предложение «...на тетрагональную с симметрией mmm ...» неверно. Симметрия mmm соответствует ромбической сингонии, а не тетрагональной.

- стр.12 автореферата, предложение «...результаты были направлены в ICSDDB.» следует заменить на «...результаты были направлены в ICSD.», так как неорганическая база данных имеет аббревиатуру ICSD.

- в списке литературы: «... Zhushuai Lin, Alina A. Goloshumova, ...» должно быть «... Zheshuai Lin, Alina A. Goloshumova, ...»

Научная и практическая значимость проведенных исследований не вызывает сомнений. Результаты диссертационной работы опубликованы в российских и зарубежных рецензируемых журналах и представлены на конференциях. Считаю, что диссертационная работа полностью удовлетворяет требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор, Голошумова Алина Александровна, заслуживает присуждения ей учёной степени кандидата геолого-минералогических наук по специальности 25.00.05 – минералогия, кристаллография.

Старший научный сотрудник
лаборатории Кристаллофизики
ИФ СО РАН им. Л.В. Киренского,
кандидат физ.-мат. наук

Россия, 660036 г. Красноярск,
Академгородок д.50, строение 38
E-mail: [mmolokeev@gmail.com](mailto:mamolokeev@gmail.com)



Молокеев Максим Сергеевич

28 сентября 2015 г.