

ОТЗЫВ

На автореферат диссертации **Панкрушиной Елизаветы Алексеевны** «Особенности физики минералов с тетраэдрическими группами (по данным терморамановской *in situ* спектроскопии и первопринципных расчетов)», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 25.00.05 - «Минералогия, кристаллография»

Исследования колебательных свойств минералов с тетраэдрическими атомными TO_4 -группами широко используются при изучении особенностей состава, структуры и свойств природных и синтетических материалов. Моды внутренних колебаний этих групп, обусловленные их деформацией, чувствительны к вариациям факторов, «внешних» по отношению к молекулярной группе – химического состава минерала или температуры (давления). Высокая локальность и чувствительность рамановской спектроскопии позволяет проводить изучение динамических свойств вещества *in situ* при изменении различных внешних условий.

Актуальной задачей таких исследований является как экспериментальные измерения динамики решетки минералов и синтетических материалов с тетраэдрическими TO_4 -группами, так и развитие и апробация алгоритмов обработки больших массивов спектроскопических данных и *ab initio* расчеты и моделирование свойств этих веществ. Именно решению такой задачи посвящена работа Е. А. Панкрушиной.

Научная ценность данного исследования состоит в том, что оно развивает новый алгоритм параметризации рамановских спектров, позволяющий проводить обработку больших массивов данных, в том числе полученных при изменении внешних факторов (температуры, давления, координаты в гетерогенном зерне минерала), и делает его перспективным для определения критических значений этих факторов, соответствующих преобразованиям структуры и состава исследуемых веществ. Предложенный алгоритм, в основу которого положен ряд статистических подходов обработки спектральных данных, апробирован на модельных примерах и экспериментальных результатах по рамановскому рассеянию света для кварца, циркона, титанита и гипса. Для кубанита впервые выполнены неэмпирические расчеты электронного строения и фононного спектра, позволившие предсказать ряд его электронных свойств и тип атомных колебаний FeS_4 - и CuS_4 -тетраэдров.

Предложенный подход к анализу большого количества выполненных экспериментов в значительной степени способствовали тому, что настоящая работа

содержит значительный объём новых данных по физике и кристаллохимии ряда минералов с тетраэдрическими PO_4^- , SiO_4^- , SO_4^- , WO_4^- , MoO_4^- , FeS_4^- и CuS_4^- -атомными группами. Впервые получены и интерпретированы рамановские спектры синтетических материалов состава $\text{Sr}_{1-3x}\text{Bi}_{2x}\text{MoO}_4$ и кубанита. Для ряда соединений (SrMoO_4 и CaMoO_4 , апатит) впервые показано влияние различных параметров на величину фонон-фононного взаимодействия внутренних колебаний MoO_4 и PO_4 – тетраэдров.

Практическая значимость работы Е. А. Панкрушиной определяется созданием и регистрацией в Роспатенте базы данных терморамановской *in situ* спектроскопии в интервале температур 80-870 К для ряда минералов с тетраэдрическими TO_4^- -группами (титанита, апатита и др.), содержащая информацию о динамике решетки и колебательных свойствах и предназначенная для анализа полиморфных переходов, дегидратации и структурных преобразований веществ (сдвигов и поворотов тетраэдров). Кроме того, созданы и зарегистрированы в Роспатенте программные продукты для экспресс-параметризации больших массивов данных (для вычисления статистических параметров для характеристики серий спектров при изменении некоторого внешнего фактора, в частности, температуры наблюдения), которые могут быть использованы и для решения ряда других задач в различных видах спектроскопии и спектрометрии. Установлено, что соединение $\text{Sr}_{1-3x}\text{Bi}_{2x}\text{MoO}_4$ ($x=0.2$) при 870 К проявляет ионную проводимость, а на основе данных по электронной структуре этого соединения рекомендовано использовать его как перспективный фотокатализатор.

По результатам исследований, полученным автором, опубликованы 3 статьи в реферируемых научных журналах, 1 монография, 3 РИД – 2 программы для ЭВМ и 1 база данных, тезисы 6 докладов.

При ознакомлении с авторефератом возник вопрос:

Использовался ли предложенный алгоритм параметризации спектров, в основу которого положен ряд статистических подходов обработки спектральных данных, ранее для обработки каких-либо спектров (в частности, рамановских) и что побудило автора его использовать? В чем его преимущество перед обычным методом анализа отдельных линий? Ведь как пишет автор, «параметры skew и kurt не соответствуют каким-либо физическим характеристикам...».

В целом работа полностью (по моему мнению, даже в избытке) соответствует требованиям, предъявляемых к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, является завершённой научно-квалификационной работой. Настоящая работа

демонстрирует, что ее автор - Елизавета Алексеевна Панкрушина владеет не только навыками экспериментатора, но сложными статистическими алгоритмами обработки полученных данных, а также способна выполнять *ab initio* квантово-химические расчеты при моделировании электронного строения и физико-химических свойств для интерпретации эксперимента и предсказания свойств исследуемых материалов. Несомненно, что автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 25.00.05- «Минералогия, кристаллография».

Старший научный сотрудник лаборатории
оптики металлов ФГБУН Институт
физики металлов имени М.Н. Михеева
УрО РАН (ИФМ УрО РАН)
Кандидат физико-математических наук,
по специальности 01.04.07
"Физика конденсированного состояния".



Поносов Юрий Сергеевич

« 25 » февраля 2022 г.

Почтовый адрес:
620108, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, д. 18
Тел.: +7 (343) 378-36-84
Эл. почта: ponosov@imp.uran.ru

