

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Саянкиной Ксении Анатольевны
«Кристаллогидраты комплексных фторидов циркония(IV): Синтез, строение
и структурные превращения при термодеструкции», представленной на
соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности
1.4.4. Физическая химия

Диссертационная работа посвящена изучению химии, строения и свойств координационных фторидов циркония, обладающих рядом ценных функциональных свойств, что позволяет использовать их в качестве ионных проводников, сегнетоэлектриков, люминофоров и т.д. Фундаментальные исследования закономерностей образования аквафторидокомплексных соединений циркония(IV), установление факторов, влияющих на их строение, изучение твердофазных превращений кристаллических веществ при изменениях температуры (полиморфные фазовые переходы, образование и распад химических соединений), а также превращения с изменением химического состава вещества при изменении температуры (дегидратация и десольватация соединений) полностью соответствуют современным тенденциям развития науки и техники и определяют актуальность настоящей работы.

Соискателем проведена большая работа, синтезировано 9 новых комплексных соединений Zr(IV) и впервые определены кристаллические структуры 20 фторидоцирконатов, в трех из которых найдены новые структурные мотивы. Впервые проведено комплексное исследование нового типа фторидоцирконата $[N(CH_3)_4]_2ZrF_6 \cdot (H_2O \cdot HF)$, сольватированного аддуктом $H_2O \cdot HF$, а также десольватированной формы соединения $[N(CH_3)_4]_2ZrF_6$ и доказан факт существования в твердой фазе изолированных молекул H_2O и HF , связанных сильной водородной связью в аддукт ($H_2O \cdot HF$). Получены и интерпретированы результаты термического анализа, ИК- и ЯМР-исследований всех синтезированных соединений. На основании совокупности полученных в рамках настоящего исследования данных впервые изучены и охарактеризованы структурные трансформации в рядах фторидоцирконатов, связанные с изменением гидратного числа, с заменой одного внешнесферного катиона на другой катион, отличный по заряду или размеру, и обратимые полиморфные фазовые переходы при изменении температуры.

Вместе с тем при ознакомлении с авторефератом возникает ряд вопросов:

- Насколько точно определено содержание гидратной воды различного типа в исследуемых соединениях. Очевидно, что содержание воды будет зависеть не только от температуры, но и от влажности окружающей среды. Из текста автореферата не ясно, как контролировался состав соединений?

- В тексте на стр. 18 сказано об изотропных реориентациях “либо Zr-полиэдров..., либо отдельных ионов F^- в них”. Не ясно, что подразумевается под реориентацией отдельного иона?

- На рис. 11(a) и (б), обозначения соединений XVII и XVIII должны быть заменены на XVIII и XIX, соответственно.

Вышесказанные замечания не являются принципиальными и не снижают высокий уровень работы. Достоверность полученных результатов обеспечена применением совокупности взаимодополняющих физико-химических методов исследования: рентгеноструктурного анализа, порошковой рентгеновской дифракции, рентгенофазового

анализа, дифференциального термического анализа, дифференциальной сканирующей калориметрии, ИК- спектроскопии, ЯМР- спектроскопии и элементного анализа. Сформулированные научные положения, выносимые на защиту, основаны на большом количестве полученных результатов и являются научно обоснованными. Выводы полностью соответствуют целям и задачам диссертационного исследования.

Полученные результаты расширяют знания о кристаллохимии комплексных фторидов циркония(IV), а установленная взаимосвязь состава со структурой и свойствами в рядах таких соединений может служить основой для дизайна новых кристаллических структур фторидоцирконатов с заданными физико-химическими свойствами. По своей актуальности, новизне, практической значимости представленная диссертация соответствует всем требованиям, установленным Положением о порядке присуждения степеней ВАК, а сама соискатель – Саянкина Ксения Анатольевна, безусловно заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Даю согласие на обработку персональных данных.

Доктор химических наук

Н.Ф. Уваров

Уваров Николай Фавстович
Главный научный сотрудник,
ФГБУН Института химии твердого тела
и механохимии СО РАН,
630090, г. Новосибирск,
ул. Кутателадзе, 18
uvarov@solid.nsc.ru

“Подпись Н.Ф. Уварова заверяю:”

Ученый секретарь
ФГБУН Института химии твердого тела
и механохимии СО РАН,
Доктор химических наук

Т.П. Шахтшнейдер

05.09.2022 г.

