

УТВЕРЖДАЮ

И.о. директора Федерального
государственного бюджетного учреждения
науки Институт неорганической химии им.
А.В. Николаева Сибирского отделения
Российской академии наук РАН, д.х.н.,
профессор



Д.Н. Дыбцев

О Т З Ы В

ведущей организации на диссертационную работу Залого Александра Николаевича «Автоматизация метода полнопрофильного анализа поликристаллов с использованием генетических алгоритмов», представляемую к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.01 – приборы и методы экспериментальной физики

Диссертационная работа А.Н. Залого тематически вытекает из общего направления работ его руководителя – д.ф.-мн., проф. И.С. Якимова, направленных на рентгенографическое изучение поликристаллических фаз неорганических соединений.

Актуальность темы исследования связана с нерешенностью проблемы нахождения приемлемой модели структуры на первом этапе проведения рентгеноструктурного анализа (РСтА) поликристаллической фазы. Вторая часть такого анализа – полнопрофильное уточнение – достаточно хорошо проработана. Поиск стартовой модели для неизвестной фазы – достаточно сложная процедура, которая сейчас решается с помощью ряда вычислительных методов на быстрых компьютерах. Каждый из методов имеет свои ограничения, поэтому разработка новых подходов несомненно представляется актуальной.

Достоверность и обоснованность результатов исследования не вызывают сомнений. Об этом говорят кристаллохимические данные исследования тестовых образцов.

Оценка содержания диссертации.

Диссертационная работа А.Н. Залого состоит из введения, обзора литературы (гл. 1), описания предлагаемого алгоритма моделирования структуры (гл. 2), результатов исследования (гл. 3), выводов и основных результатов работы, списка цитируемой литературы (151 источник) и приложения. Общий объем работы – 149 страниц текста с 50 рисунками и 29 таблицами.

Выбранная тема и задачи исследования сформулированы автором во введении и подкреплены литературным обзором, где описаны основные этапы проведения рентгеноструктурного анализа (РСтА) поликристаллических фаз и сформулированы перспективы развития. Особое внимание уделено методам определения кристаллических структур в прямом пространстве: поиск по сетке, Монте-Карло, имитации отжига, эволюционных и генетических алгоритмов и гибридные подходы. В итоге сделан вывод, что именно гибридные подходы, сочетающие прямые методы и методы в прямом пространстве, наиболее перспективны, даже при использовании лабораторных дифрактометров.

Вторая глава диссертации посвящена описанию авторского метода определения модели структуры – метода мультипопуляционного параллельного генетического алгоритма в прямом пространстве. Программа написана на языке C++ в версиях для многоядерных ПК (от 4-х ядер) и для суперкомпьютерного кластера на базе библиотеки распараллеливания вычислений MPICH. Обсуждены результаты исследования сходимости МПГА. Автор провел определенную работу по изучению перспектив использования параллельных вычислений на суперкомпьютерах. Тестирование проведено на ряде известных кристаллических структур неорганических соединений в сравнении с современными программами FOX и DASH.

В третьей главе описан процесс и результаты определения кристаллических структур комплексных соединений с помощью программы, разработанной автором.

Выводы и основные результаты работы соответствуют цели и поставленным задачам.

Научная новизна диссертационной работы связана с тем, что предложен оригинальный метод поиска модели и полнопрофильного уточнения кристаллических структур по данным дифрактометрии поликристаллов.

Практическая значимость. Создана доступная для общего пользования программа для определения кристаллических структур неорганических соединений по данным порошковой дифракции (в том числе и на суперкомпьютерных кластерах)

Замечания. При всех достоинствах работы нельзя не отметить и ряд недостатков. В основном они относятся к оформлению. Отсутствует список используемых сокращений, а они начинаются уже в оглавлении. Излишнее использование генетических терминов (размер популяции, элитизм, турнирный отбор, мутация атомных координат и пр.), в большинстве случаев можно было использовать более привычные термины. Отсутствуют ссылки на оригинальные статьи и современные базы структурных данных (например, табл. 5). В списке цитируемой литературы наблюдается разноречивость стилей и отсутствуют названия статей.

Из более существенных замечаний, выделим следующие:

- 1) четко не сформулированы ограничения предлагаемой программы (симметрия, соотношение числа рефлексов и уточняемых параметров, наличие текстуры, анизотропия ширины рефлексов и др.);
- 2) в автореферате дано достаточно подробное описание синтеза $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]\text{Br}_3$, но отсутствуют данные элементного анализа. Вместе с тем, в ходе уточнения структуры был предложен другой состав этой фазы $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]\text{Br}_{2.4}\text{Cl}_{0.6}$.

Указанные недостатки, относящиеся главным образом к подаче и интерпретации материала, не снижают значимость основных результатов работы. Выводы работы соответствуют защищаемым положениям, автореферат и опубликованные работы правильно и полностью отражают главное содержание диссертации. Диссертант показал уверенное владение материалом и грамотно интерпретировал результаты проведенных исследований, что характеризует его как квалифицированного специалиста.

Результаты представленной работы могут быть использованы в образовательной и научно-исследовательской работе в ИОНХ РАН (г. Москва), ИГМ СО РАН, ИНХ СО РАН и ИХТТМ СО РАН (г. Новосибирск), ИХТТ УрО РАН (г. Екатеринбург), на химфаках и геофаках госуниверситетов Москвы, Санкт-Петербурга, Новосибирска, Екатеринбурга, Иркутска, в других научных, отраслевых и учебных учреждениях, деятельность которых связана с развитием метода рентгеноструктурного анализа поликристаллов.

Общий вывод. Анализ диссертационной работы А.Н. Залого позволяет сделать заключение, что она носит целостный, законченный характер. Диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, а полученные результаты имеют существенное значение для развития метода рентгеноструктурного анализа поликристаллических фаз. Они опубликованы в 22 публикациях, в том числе 11 – в Российских журналах, рекомендованных ВАК. Работа Александра Николаевича Залого отвечает требованиям пп. 9-14 (раздел II) «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (утверждено постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013), а ее автор заслуживает присвоения звания кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.01 – приборы и методы экспериментальной физики

Отзыв ведущей организации о диссертации А.Н. Залога составил:

Главный научный сотрудник

Зав. лабораторией кристаллохимии ИНХ СО РАН,

доктор физико-математических наук

С.А. Громилов

Подпись С.А. Громилова заверяю.

Ученый секретарь ИНХ СО РАН, д.х.н.

/О.А. Герасько/

Контактная информация:

Громилов Сергей Александрович

доктор физико-математических наук,

02.00.04 – Физическая химия



630090, Новосибирск,

пр. Лаврентьева, 3, ИНХ СО РАН

Телефон 330-94-66

grom@niic.nsc.ru

Отзыв рассмотрен и одобрен на заседании отдела Структурной химии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук 27 февраля 2017 г., протокол №1.

Секретарь семинара

к.ф.-м.н.

С.В. Трубина

СВЕДЕНИЯ О ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Наименование организации:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН)

Место нахождения:

г. Новосибирск

Почтовый адрес и контактные данные:

630090, г. Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 3.

Телефон: (383) 330-94-90, Отдел кадров (383) 330-79-49

Факс: (383) 330-94-89

E-mail: niic@niic.nsc.ru

Сайт: <http://www.niic.nsc.ru>

Список публикаций работников ведущей организации по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет:

1. Adonin S.A., Sokolov M.N., Fedin V.P. "Polynuclear halide complexes of Bi(III): From structural diversity to the new properties" // *Coord. Chem. Rev.* 2016. V. 312. P. 1–21.
2. Mädl E., Balázs G., Peresypkina E.V., Scheer M. «Unexpected reactivity of $[\text{Cp}^{\text{***}}\text{Ni}(\eta^3\text{-P}_3)]$ towards main group nucleophiles and by reduction» // *Angew. Chem. Int. Ed.* 2016. V.55, N27. P.7702–7707.
3. Rummel E.-M., Mastroilli P., Todisco Dr. S., Latronico M., Balázs G., Virovets A.V., Scheer M. «Homoleptic Phosphaalkyne Complexes of Silver(I)» // *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 2016. V.55. P. 13301–13305.
4. Seitz A.E., Eckhardt M., Erlebach A., Peresypkina E.V., Sierka M., Scheer M. «The pnictogen-silicon analogues of benzene» // *JACS.* 2016. V.138. P.10433–10436.
5. Arleth N., Gamer M.T., Köppe R., Konchenko S.N., Fleischmann M., Scheer M., Roesky P.W. "Molecular Polyarsenides of the Rare-Earth Elements" // *Angew. Chem. Int. Ed.* 2016. V. 55. P. 1557-1560.
6. Basova T., Hassan A., Durmuş M., Gürek A.G., Ahsen V. «Liquid crystalline metal phthalocyanines: structural organization on the substrate surface» // *Coord. Chem. Rev.* 2016. V. 310. P. 131-153.
7. Abramova G., Schefer J., Aliouane N., Boehm M., Petrakovskiy G., Vorotynov A., Gorev M., Bovina A., Sokolov V. «Single-crystal and powder neutron diffraction study of the $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ solid solution» // *J. Alloys Comp.* 2015. V. 632. P. 563-567.
8. Peresypkina E.V., Samsonenko D.G., Vostrikova K.E. "Heterobimetallic coordination polymers involving 3d metal complexes and heavier transition metals cyanometallates" // *J. Solid State Chem.* 2015. V. 224. P. 107-114.
9. Гельфонд Н.В., Крисюк В.В., Доровских С.И., Кальный Д.Б., Максимовский Е.А., Шубин Ю.В., Трубин С.В., Морозова Н.Б. «Структура платиносодержащих покрытий, полученных методом химического осаждения из газовой фазы» // *ЖСХ.* 2015. Т. 56, № 6. С. 1270-1275.

10. Анюшин А.В., Соколов М.Н., Вировец А.В., Федин В.П. «Кристаллическая структура $K[Pd(P(CH_2OH)_3)Cl_3]$ » // Журн. структурн. химии. 2015. Т. 56, № 2. С. 393-395.
11. Yelisseyev A.P., Xingxing Jiang, Isaenko L.I., Lei Kang, Lei Bai, Zhushuai Lin, Goloshumova A.A., Lobanov S.I., Naumov D.Y. Structures and optical properties of two phases of $SrMgF_4$ // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2015. – V. 17. - P. 500-508.
12. Абрамов П.А., А.В. Вировец, М.Н. Соколов «СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА $[Cr^*3Ir_3S_2]Cl\{(H_2O)(HSO_4)(H_2SO_4)\} \cdot CHCl_3$ » // Журн. структ. химии 2014 - Suppl. Issue. - С. S260-S263
13. Адонин С.А., Абрамов П.А., Усков С.И. «Кристаллическая структура комплексов Ir(III) с 1,10-фенантролином $K[Ir(phen)Cl_4] \cdot H_2O$ и $(Me_4N)[Ir(phen)Cl_4]$ » // Журн. структ. химии. 2014. Т. 55, № 3. С. 538-543.
14. Artemkina S.B., Podlipskaya T.Yu., Bulachenko A.I., Komonov A.I., Mironov Yu.V., Fedorov V.E. "Preparation and characterization of colloidal dispersions of layered niobium chalcogenides" // Colloid. Surf. A-Physicochem. Eng. Asp. 2014. V. 461. P. 30-39.
15. Gavryushkin P.N., Bakakin V.V., Bolotina N.B., Shatskiy A.F., Seryotkin Yu.V., Litasov K.D. «Synthesis and Crystal Structure of New Carbonate $Ca_3Na_2(CO_3)_4$ Homeotypic with Orthoborates $M_3Ln_2(BO_3)_4$ (M = Ca, Sr, and Ba).» // Cryst. Growth Des. 2014. V. 14. P. 4610–4616.

Ученый секретарь, д.х.н.



О.А. Герасько