

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«Национальный исследовательский  
ядерный университет «МИФИ»

Северский технологический институт –  
филиал федерального государственного  
автономного образовательного учреждения  
высшего образования  
«Национальный исследовательский  
ядерный университет «МИФИ»  
(СТИ НИЯУ МИФИ)

просп. Коммунистический, д. 65, г. Северск,  
Томская область, 636036  
тел. (3823) 780-201, факс (3823) 780-221  
http://www.ssti.ru E-mail: ssti@mephi.ru

16.05.2023, № 242

На № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_

В Отдел ученых степеней  
Самарского университета  
Е.А. Стенькиной

443086, г. Самара,  
ул. Московское шоссе, д. 34  
Самарский университет

### Отзыв

на автореферат диссертации Савченкова А.В.

по теме «Новые методы кристаллохимического анализа в рамках стерео-  
атомной модели строения кристаллов», представленной на соискание ученой  
степени доктора химических наук по специальности 1.4.1 – Неорганическая  
химия

Диссертационная работа Савченкова А.В. посвящена актуальной теме – разработке новых и совершенствованию существующих методов, инструментов и понятий для анализа кристаллических структур в рамках одной из самых мощных и перспективных моделей – стереоатомной модели строения кристаллов, опирающейся на разбиение Вороного–Дирихле и позволяющей с единых позиций анализировать как химические связи, так и внутри- или межмолекулярные невалентные взаимодействия.

Для обеспечения возможности целенаправленного получения функциональных материалов необходимо установление взаимосвязей между составом, строением и свойствами химических веществ. Чтобы такие взаимосвязи были наиболее полными и точными, необходимо, чтобы все три составляющие (состав, строение и свойства) можно было характеризовать количественно и объективно. Состав соединения описывается количественно и объективно по определению. Описание физико-химических свойств веществ напрямую зависит от текущего уровня экспериментального оборудования, который в настоящее время в большинстве случаев позволяет получать количественные характеристики свойств с достаточной точностью и объективностью. Строение веществ также описывается достаточно точно и объективно с точки зрения пространственного расположения атомов в объеме вещества. Однако описание химических взаимодействий между атомами, которые в основном и определяют результирующие свойства веществ, является более сложной и

Входящий № 206-3800  
Дата 23 МАЙ 2023 1  
Самарский университет

неоднозначной проблемой, окончательно не решенной на сегодняшний день, что требует проведения дальнейших исследований.

Полученные автором результаты являются новыми, а выводы и рекомендации, сформулированные в диссертации, представляют научную и практическую ценность.

Научную новизну представляет то, что

- разработаны новые и усовершенствованы некоторые существовавшие методы, инструменты и понятия для проведения кристаллохимического анализа;

- впервые было показано, что конформационные полиморфы характеризуются уникальными сочетаниями внутримолекулярных невалентных контактов, специфика которых зависит от природы взаимодействующих атомов, а также ранга и числа реализующихся граней молекулярных полиэдров Вороного–Дирихле;

- разработана концепция антижидкости и обнаружен новый супрамолекулярный синтон,

- предложены кристаллохимические характеристики для выявления наличия  $5f$ -взаимодействий между атомами актинидов и для оценки нелинейно-оптических свойств карбоксилатов уранила;

- впервые синтезированы 42 актинидсодержащих соединения, изучены их строение и некоторые свойства, информация о которых ранее отсутствовала в международных банках структурных данных или в литературных источниках.

Практическая значимость работы заключается в том, что

- получение количественных и объективных данных о межатомных взаимодействиях, в том числе невалентных, в кристаллических структурах позволяет ставить и решать принципиально новые задачи химии, особенно в части анализа больших данных;

- полученная информация может использоваться для последующего интеллектуального анализа данных, что открывает перспективы для дальнейших применений структурных характеристик в различных областях науки;

- полученные результаты будут способствовать развитию методов получения веществ и материалов с заданными физико-химическими свойствами, что всегда являлось и продолжает являться важной целью химической науки;

- изученные урансодержащие соединения могут представлять потенциальный интерес с точки зрения радиэкологии;

- полученные результаты могут быть использованы в учебном процессе по дисциплинам «Кристаллохимия», «Неорганическая химия» и профильным спецкурсам.

Достоверность полученных результатов и сформулированных автором положений и выводов не вызывает сомнений. Она подтверждается применением комплекса современных физико-химических методов исследования и обработки результатов.

Основные результаты диссертационной работы отражены в 27 статьях в российских и иностранных журналах, включённых в Перечень рецензируемых научных изданий, рекомендованных ВАК РФ, а также в 12 материалах авторитетных всероссийских и международных конференций. Это свидетельствует о высоком уровне апробации диссертационной работы. В публикациях отражены основные научные результаты исследований Савченкова А.В., вынесенные на защиту.

По диссертации имеются замечания:

1. По какой причине экспериментальные данные по нелинейно-оптическим свойствам на рис. 2 аппроксимируются именно линейной зависимостью, хотя с первого взгляда кажется, что зависимость может быть иной?

2. Насколько надёжно определяется наличие невалентных контактов с низкими парциальными вкладами, приведенных на рис. 12, 13? Ведь если подобными контактами можно пренебречь, то выводы автора по этим данным становятся необоснованными.

Указанные замечания не снижают общей положительной оценки диссертации, её научной и практической значимости.

Представленная к защите диссертация Савченкова А.В. является законченной научно-квалификационной работой, выполненной на высоком научном уровне. Диссертационная работа имеет внутреннее единство, что подтверждается наличием внутреннего плана исследования, логичностью изложения, концептуальностью и взаимосвязями выводов, и содержит совокупность достоверных научных результатов, положений и выводов, полученных и предложенных лично автором. В работе на основании выполненных автором исследований решена научная проблема, имеющая важное значение для отрасли химических наук. По новизне результатов, практической и теоретической значимости поставленных и решенных задач она соответствует требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» Министерства образования и науки Российской Федерации, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук, её автор Савченков Антон Владимирович заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.1 – Неорганическая химия.

Доктор технических наук, профессор

Александр Николаевич  
Жиганов

16 мая 2023 г.

Подпись Жиганова А.Н. подтверждает

Руководитель,  
кандидат физико-математических наук, доцент



С.А. Карпов

*Жиганов Александр Николаевич, доктор технических наук, профессор кафедры технической физики, Северский технологический институт – филиал федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»*

Адрес организации: 636036, Томская область, г. Северск, проспект Коммунистический, д. 65, E-mail: [ssti@mephi.ru](mailto:ssti@mephi.ru), тел. (3823) 78-02-01, <http://www.ssti.ru/>