

ОТЗЫВ

научного руководителя на диссертационную работу Попова Ильи Сергеевича «Влияние дефектов на полиморфизм и электронные свойства бинарных сульфидов и оксидов металлов», представленную к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия (химические науки)

Попов Илья Сергеевич (1991 г.р.) окончил с отличием Курганский государственный университет в 2014 г., выполнив дипломную работу на кафедре физической и прикладной химии того же ВУЗ с присвоением специальности «Химик». В 2014-2018 г. соискатель обучался в очной аспирантуре ИХТТ УрО РАН и был успешно аттестован, сдав все экзамены на «отлично» и защитив научно-квалификационную работу. В ходе создания диссертационной работы И.С. Попов овладел современными пакетами программ для квантовохимического моделирования и самостоятельно освоил современные среды программирования, что помимо прочего оказалось полезным для технической реализации проектов других исследователей. Он показал себя вдумчивым и добросовестным исследователем, тщательно планирующим настольные эксперименты. Осуществляя свою научную деятельность, он проявлял самостоятельность как на этапах постановки и решения научной задачи, так и в анализе и обобщении наблюдаемых результатов.

Диссертационная работа Ильи Сергеевича Попова посвящена теоретическому исследованию взаимосвязей между дефектностью кристаллической решётки и полиморфизмом неорганических соединений. Открытие наноразмерных объектов и развитие представлений об их природе вывели материаловедение на новый уровень, побуждая взглянуть по-другому на происхождение многих свойств и процессов, имеющих место даже в классических материалах. Сопутствующий прогресс в вычислительных возможностях позволил сделать моделирование ещё одним полезным инструментом физической химии, как для анализа, так и прогноза многих феноменов. На примере представительного ряда соединений с разным составом и разным типом кристаллической решётки И.С. Попов рассматривает сдвиг полиморфического равновесия в зависимости от размерности решётки вплоть до нанометровой шкалы и её дефектности. С использованием квантовохимических методов разного уровня соискатель выявляет огромную роль, которую могут играть точечные и протяжённые дефекты в термодинамической стабилизации новых или нехарактерных для макрокристаллического состояния типов кристаллических решёток бинарных соединений. На мой взгляд, представленная работа будет интересна для специалистов не только в области физической, но и структурной химии. Полученные автором результаты вызвали определённый интерес у коллег, занимающихся синтезом нанопорошков сульфидов и оксидов, поэтому его деятельность была

поддержана в рамках нескольких проектов РНФ и РФФИ прикладной направленности, а также стипендией Правительства РФ в 2016-2017 г.г.

Материалы диссертации представлены лично соискателем в устных докладах на 7 конференциях и опубликованы им, как первым автором, в 7 статьях в профильных рецензируемых журналах, входящих одновременно в перечень ВАК РФ и в международные базы данных.

Считаю, что представленная И.С. Поповым диссертационная работа отвечает всем требованиям ВАК, предъявляемых к диссертациям на соискание учёной степени кандидата химических наук и соответствует специальности 1.4.4. Физическая химия (химические науки), а её автор заслуживает присуждения степени кандидата химических наук.

Ведущий научный сотрудник лаборатории квантовой химии и спектроскопии
Института химии твердого тела Уральского отделения РАН,

кандидат химических наук

02.00.04 – Физическая химия

ул. Первомайская, 91, 620108 г. Екатеринбург, Россия

тел. +7 343 3745331, enyashin@ihim.uran.ru

Еняшин Андрей Николаевич

Подпись Еняшина А.Н. заверяю.

Ученый секретарь

Института химии твердого тела УрО РАН, к.х.н.

Богданова Екатерина Анатольевна

15.09.2021

