

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Попова Ильи Сергеевича «Влияние дефектов на полиморфизм и электронные свойства бинарных сульфидов и оксидов металлов», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия (химические науки)

В диссертационной работе И.С. Попова рассматривается актуальная проблема – влияние дефектов на полиморфизм и электронные свойства соединений. Исследуются закономерности полиморфного равновесия бинарных сульфидов и оксидов металлов в зависимости от размерности их кристаллической решетки и наличия структурных дефектов. При этом используется *ab initio* моделирование, интенсивно развивающееся в настоящее время, применяемое в большинстве работ, как чисто теоретических, так и содержащих эксперимент.

Отмечу, что в работе проведено моделирование нестехиометрических соединений, что является сложной задачей для *ab initio* подхода и выполнение её говорит о высокой квалификации исследователя.

Расчеты проведены в рамках теории функционала плотности (DFT), успешно применяемой для подобных целей, с использованием хорошо опробованного программного обеспечения (SIESTA и др.)

Можно отметить большой объем работы. Выводы работы хорошо сформулированы и показывают значимость полученных результатов как для дальнейших исследований, так и для разработки новых материалов на основе пленок и наночастиц SnS, TiO, MoS₂.

Результаты работы опубликованы в 7-ми рецензируемых журналах, российских и зарубежных, в том числе высокорейтинговых, а также представлены на международных конференциях.

Работа выполнена на высоком уровне и подтверждает высокую квалификацию автора в области *ab initio* расчетов.

В качестве замечаний к тексту автореферата могу высказать следующее: в тексте автореферата не приведены названия используемых DFT функционалов, не обсуждается их вид (LDA, GGA, гибридные, ...). Также не рассматривается погрешность вычисления энергии в рамках используемых моделей.

Сформулированные к автореферату замечания не снижают высокой оценки работы.

Считаю, что диссертационная работа полностью удовлетворяет требованиям п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением

Правительства РФ от 24.09.2013 г №842, а ее автор Попов Илья Сергеевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

кандидат физико-математических наук, доцент,
доцент кафедры физики конденсированного состояния
и наноразмерных систем,
Институт естественных наук и математики,
ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

Чернышев Владимир Артурович

Дата: 30 ноября 2021 г.

620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19

Тел.: +7 (343) 3754444

e-mail: Vladimir.Chernyshev@urfu.ru



Подпись к.ф.-м.н., доцента ФГАОУ ВО «Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н.Ельцина» Чернышева В.А. заверяю.