

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).

Допирование и инженерия дефектов в кристаллических решетках часто позволяют улучшить эксплуатационные характеристики или придать качественно новые полезные свойства материалам, в том числе материалам на основе халькогенидов металлов. Эти инструменты структурного дизайна применимы как в случае массивных кристаллов, так и наноразмерных, при этом оказываемый ими эффект может зависеть от размера частиц. Выявление закономерностей влияния указанных выше факторов на структурные и электронные свойства оксидов и сульфидов металлов является необходимым условием для разработки направленных методов получения соответствующих материалов с заданными свойствами. Именно эти аспекты стали предметом изучения в диссертационной работе Попова И.С., что несомненно свидетельствует о ее актуальности и практической значимости.

Поставленные в работе задачи успешно решены с использованием передовых квантовохимических методов моделирования в рамках теории функционала электронной плотности, примененных для протяженных кристаллических структур и кластеров с различным числом атомов. Полученные характеристики моделей с различными видами дефектов в подрешетках металла и халькогена позволили надежно сопоставить свойства материалов заданного состава и дефектности с разным размером частиц. Эти исследования были дополнены изучением кинетической устойчивости и морфологических трансформаций частиц методами молекулярной динамики.

Среди важных и интересных результатов, полученных в работе, хотелось бы отметить следующие. Для оксида титана было показано, что вакансии оказывают стабилизирующее действие на структуру его наноразмерных частиц. Факторами, способствующими сдвигу полиморфного равновесия в случае сульфида олова, как было найдено, могут являться вакансии в подрешетке металла, а в случае сульфида цинка примесные дефекты в решетке. Тщательный сравнительный анализ нанопластин дисульфидов молибдена, ниобия и рения, имеющих различные размеры и структуры боковых граней, позволил получить новые данные об условиях, обеспечивающих стабилизацию в этих пластинах неустойчивых полиморфов. Как было показано автором, в зависимости от строения края, в подобных нанопластинах реализуются различные типы электронной проводимости. Полученные в работе результаты представляют несомненную ценность для исследований в смежных областях, в частности, наноэлектронике и катализе.

Замечаний по сути работы не имеется. В качестве погрешности изложения можно отметить, что автор не приводит в автореферате размеры модельных частиц, ограничиваясь указанием числа атомов в частице. Данная погрешность не меняет общее сугубо положительное впечатление о данной работе.

Результаты диссертационной работы изложены в 7 статьях в профильных журналах, входящих в перечень ВАК и индексируемых в отечественных и международных базах

цитирования, а также в 16 тезисах докладов на российских и международных научных конференциях.

Считаю, что диссертационная работа представляет собой законченное научное исследование и удовлетворяет требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842 с изменениями от 20 марта 2021 г. № 426, а ее автор Попов Илья Сергеевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Кандидат химических наук (1.4.8. – Химия
элементоорганических соединений),
старший научный сотрудник лаборатории
рентгеноструктурных исследований,
ФГБУН Институт элементоорганических
соединений им. А.Н. Несмеянова РАН

А.С. Голубь

Голубь Александр Семенович

16.11.2021

Адрес: 119991, ГСП-1, г. Москва, В-334, ул. Вавилова, 28

Тел.: +7 499 135-92-02

E-mail: golub@ineos.ac.ru

Подпись Голубя А.С. заверяю

Начальник отдела кадров ИНЭОС РАН



Овченкова И.С.