

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 автореферате диссертационной работы Попова И.С. представлены теоретические результаты исследования электронного строения и природы полиморфизма в зависимости от дефектов в бинарных сульфидах и оксидах металлов. Рассчитывались идеальные и дефектные структуры π -SnS, MoS₂, NbS₂, ReS₂, ZnS и TiO. Представленное исследование является актуальным, т.к. природа возникновения полиморфизма и механизмы полиморфных переходов, в принципе, известны, но детальной картины, как все происходит, и что определяет устойчивость в каждом конкретном случае, не существует и требует тщательных исследований. Особенно это касается полиморфных состояний для соединений, которые рассматриваются или используются на практике, т.к. любой термодинамический фактор, а также и присутствие различных дефектов, и их концентрация, может привести к изменению не только структуры таких соединений, но и их свойств. Для исследования автор применяет современные методы анализа электронного строения на самом высоком теоретическом уровне, который достигнут в настоящее время в квантовой химии (DFT-теория функционала плотности, DFTB – метод, основанный на DFT, является быстрым и эффективным методом квантово-механического моделирования и MD – метод молекулярной динамики). Автору удалось показать, что вакансии в подрешетке Sn в SnS приводят к дестабилизации наиболее устойчивой в нормальных условиях α -фазы SnS и стабилизируют π -фазу SnS; обосновать гипотезу о стабилизации фазы сфалерита ZnS присутствием примесных дефектов; показать, что наноразмерные слоистые дисульфиды MoS₂, NbS₂ и ReS₂ стабильны в форме полиморфов, нехарактерных для данных соединений в макрокристаллическом состоянии, и механизм такой фазовой стабильности обусловлен переносом заряда с краев во внутреннюю область наночастиц; для TiO выявлена роль размера поверхности на стабильность состояния. Достоверность защищаемых положений и выводов достаточно обоснована и подтверждается экспериментальными данными. Работа представляет собой цельное и направленное исследование. Основные результаты работы с достаточной полнотой опубликованы в 7 рецензируемых отечественных и зарубежных журналах, доложены на престижных научных конференциях и симпозиумах.

К работе имеется следующий вопрос:

1. Утверждения, что кристаллические структуры устойчивы, основываются не только на энергетических расчетах или на кинетических результатах метода MD, но и требуют отсутствие мнимых колебаний в фононных спектрах. Делал ли автор такие расчеты?

Заданный вопрос не влияет на качество выполненной работы и задается для дискуссии.

С учетом сказанного считаем, что диссертационная работа Попова Ильи Сергеевича по своей актуальности, объему проведенных исследований, практической значимости и научной новизне в целом соответствует требованиям пункта 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением правительства РФ от 24.09.2013 №842 с изменениями от 20 марта 2021 г. №426, а ее автор заслуживает присуждения искомой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия (химические науки).

Козлова Светлана Геннадьевна,

Доктор физико-математических наук,

заведующий лабораторией физической химии конденсированных сред.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева (ИНХ СО РАН),
630090, Россия, г. Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, д.3,
Тел. 8(393)3307531, электронная почта: sgk@niic.nsc.ru

*Я согласна на включение персональных данных в документы, связанные с работой
диссертационного совета, и их дальнейшую обработку. 22.11.2021.г*

Федоров Владимир Ефимович

Доктор химических наук, профессор
главный научный сотрудник

лаборатории синтеза кластерных соединений и материалов

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева (ИНХ СО РАН),

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

Тел. 8-9139333873, электронная почта: fed@niic.nsc.ru

*Я согласен на включение персональных данных в документы, связанные с работой
диссертационного совета, и их дальнейшую обработку. 22.11.2021.г*

Подписи Козловой С.Г. и Федорова В.Е. заверяю
Ученый секретарь ИНХ СО РАН, д.х.н.



Герасько О.А.