

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

Вопросы целенаправленного получения, стабилизации заданных полиморфных модификаций твердофазных (оксидных, сульфидных и др.) объектов является актуальной задачей в связи с возможностью широкого практического использования этих материалов в различных областях науки и техники. Помимо главных термодинамических факторов, таких как температура, давление, которые определяют существование полиморфных модификаций, влияют на их стабильность способны дефектная структура оксидов или сульфидов (вакансии, примесные атомы), а также размерный эффект в нанометровом диапазоне. Одним из подходов, позволяющих прогнозировать относительную устойчивость полиморфных модификаций в определенных условиях, является использование для этой цели квантово-химических методов моделирования, в частности, в рамках теории функционала электронной плотности (DFT) и теории функционала электронной плотности в приближении сильной связи (DFTB). В ходе выполнения рассматриваемой работы такие исследования проведены относительно сульфидов цинка, дисульфидов олова, молибдена, ниобия, рения, монооксида титана. Поставленные задачи успешно решены. Выполненная работа представляется добротным, достаточно интересным, самостоятельно выполненным научным трудом. Достоверность полученных автором расчетных данных, обоснованность применения использованных методов подтверждена проверкой их соответствия экспериментальным результатам.

Результаты исследований, полученные в рамках диссертационной работы, обсуждены на ряде российских и международных конференций, включая зарубежные, опубликованы в виде трудов конференций, в автореферате приведены сведения о 16 таких трудах. Содержание исследований отражено в 7 статьях. Автореферат хорошо оформлен, написан ясным научным языком.

При прочтении автореферата возникли следующие вопросы и замечания:

1. На стр. 3 автор утверждает, что изменение кристаллической структуры слабо влияет на химические свойства соединений. С другой стороны, на стр. 11 говорится об усилении каталитических свойств дисульфида молибдена при наличии его 1Т фазы. Не является ли это противоречием, тем более, что известно, например, различное воздействие той или иной кристаллографической плоскости каталитических материалов на селективность протекающих реакций?
2. Насколько правомерно вести речь о термодинамическом равновесии в полиморфных превращениях, имея в виду наноразмерные частицы, края нанопластин, тонкие пленки и другие нанообъекты, которые сами по себе трудно назвать рав-

новесными образованиями? Или речь идет главным образом о кинетической стабильности?

3. Есть ли необходимость при получении расчетных данных учитывать зависимость кристаллографических параметров материалов непосредственно от размера частиц, которая, как известно, максимальным образом проявляется для наноразмерных объектов?

Работа удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатской диссертации, установленным п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации 24 сентября 2013 г. № 842 (с изменениями от 20 марта 2021 г. № 426), соответствует паспорту специальности, а ее автор, Попов Илья Сергеевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. физическая химия (химические науки).

Остроушко Александр Александрович

Доктор химических наук (специальность 02.00.04 - физическая химия)

Профессор

Заведующий отделом химического материаловедения, главный научный сотрудник НИИ физики и прикладной математики, профессор кафедры физической и неорганической химии Института естественных наук и математики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

Почтовый адрес: 620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19

Телефон: +7-(343) 251-79-27

E-mail: alexander.ostroushko@urfu.ru

15 ноября 2021 г.

