

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Попова Ильи Сергеевича
«Влияние дефектов на полиморфизм и электронные свойства бинарных
сульфидов и оксидов металлов», представленную на соискание учёной
степени кандидата химических наук по специальности

1.4.4. Физическая химия (химические науки)

Наноструктурный уровень организации вещества известен давно (например, ультрадисперсные частицы), но его детальное изучение современными экспериментальными и теоретическими методами стало возможно с конца 1990-х–начала 2000-х гг. Отчасти это связано с открытием наночастиц углерода – фуллеренов, нанотрубок и графена, отчасти – с развитием новых методов исследования вещества. Ведущую роль в прогнозировании устойчивости и ключевых электронных свойств наноразмерных кластеров и ассоциатов играют методы вычислительной химии, среди которых методы теории функционала плотности зарекомендовали себя в положительном ключе в плане воспроизведения известных экспериментальных данных и надёжностью прогнозных оценок (в сочетании с разумными затратами времени и компьютерных ресурсов).

Диссертационное исследование И. С. Попова, посвящённое изучению оксидов и сульфидов металлов (SnS, ZnS, TiO, MoS₂, NbS₂, ReS₂) методом теории функционала плотности, лежит в русле современных тенденций физической химии неорганических соединений. В работе изучена термодинамическая стабильность, влияние вакансий и примесей азота/кислорода на устойчивость и ключевые структурные параметры соединений, их механические свойства. Работа представляет собой систематическое исследование, результаты которого могут найти применение в материаловедении и неорганической химии. С фундаментальной точки зрения, представляются важными корреляции между размерами и устойчивостью треугольных монопластинок сульфидов Mo, Nb и Re.

По автореферату имеется **замечание**, связанное с описанием результатов молекулярно-динамического моделирования дефектного сфалерита/вюрцита (С. 18, второй абзац сверху). Автор описывает эволюцию дефектов только словесно, используя при этом неудачные выражения («Молекула NH₃ попеременно связывается с одним из атомов Zn...», «Однако далее NH₃ рекомбинирует (?) и не распадается вновь», «Модель 2 Таблицы 2 (сфалерит) подвержена распаду NH₃...»). В этой части работы не хватает схемы химических превращений. Указанное замечание не снижает научной ценности работы, которая, надеюсь, получит продолжение.


По диссертационному исследованию имеются **рекомендации** в контексте современных вычислительных работ в области неорганических материалов и минералов:

1. Изучая оксиды и сульфиды металлов, автор не отходит далеко от их «привычной» стехиометрии. Вместе с тем, в круг объектов молекулярно-динамического моделирования с целью выявления устойчивых структур, на мой взгляд, стоило включить бинарные соединения с избытком металла или халькогена. Например, в работе Lepeshkin *et al.*, *J. Phys. Chem. Lett.* **2019**, *10*, 102–106; <https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.8b03510> при изучении кремнезёма было обнаружено, что наряду с классическими соединениями состава (SiO₂)_x устойчивы нанокластеры с избытком Si либо O.

2. Один из подходов к математическому описанию химического строения минералов использует в качестве базового дескриптора информационную энтропию. В России этот подход развивается группой С.В. Кривовичева [Krivovichev, *Mineral. Mag.* **2013**, *77*, 275–326; <http://dx.doi.org/10.1180/minmag.2013.077.3.05>]. Рассмотрение полиморфов, изученных в представленной работе, в рамках информационно-теоретического подхода может быть использовано для их цифровой классификации в иерархии кристаллических соединений и минералов, а также теоретических оценок в контексте задач копирования наносистем и вопросов хранения информации [Бальмаков, *УФН* **1999**, *169*, 1273–1280; <https://doi.org/10.3367/UFNr.0169.199911f.1273>].

Считаю, что диссертационная работа представляет собой законченное научное исследование и удовлетворяет требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. №842 с изменениями от 20.03.2021 г. №426, а её автор Попов Илья Сергеевич заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Доктор химических наук
(специальность 1.4.4. Физическая химия),
директор Института нефтехимии и катализа
Уфимского федерального исследовательского
центра Российской академии наук (ИНК УФИЦ РАН),
главный научный сотрудник
лаборатории математической химии
ИНК УФИЦ РАН



Институт нефтехимии и катализа – обособленное структурное подразделение
Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского
федерального исследовательского центра Российской академии наук. Адрес: 450075 г. Уфа,
просп. Октября, д. 141. Тел.: +7 (347) 284 27 50. E-mail: mk@anrb.ru, sabirovdsh@mail.ru

Подпись
ЗАВЕРЯЮ

УЧЁНЫЙ СЕКРЕТАРЬ
К. Х. Н.

Сабиров Д.Ш.
Карамзина

ИНКУФИЦРАН
Д.С. КАРАМЗИНА

