

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Попова Ильи Сергеевича «Влияние дефектов на полиморфизм и электронные свойства бинарных сульфидов и оксидов металлов» по специальности 1.4.4 – Физическая химия

В диссертационной работе Попова И.С. представлен детальный анализ причин установления полиморфного равновесия для ряда сульфидов и оксидов таких металлов как Sn, Ti, Mo, Nd, Re, Zn. Актуальность работы обусловлена тенденцией к постепенному переходу к изучению свойств материалов, начинающихся не с синтеза, а моделирования целевого соединения и его свойств с целью оценки целесообразности его изучения с точки зрения желаемых характеристик. Прогнозирование возникновения полиморфизма, а также оценка подходов к урегулированию полиморфного равновесия являются важным этапом предшествующей синтезу оценки свойств материала, поэтому актуальность работы Попова И. С. не вызывает сомнений.

В ходе работы автором выполнено моделирование структуры ряда соединений с использованием проверенных подходов, включающих в себя расчёты с использованием функционала электронной плотности и молекулярной динамики. Достоверность выполненных расчётов подтверждается использованием неоднократно апробированных программных пакетов и сопоставлением некоторых полученных результатов с имеющимися в литературе экспериментальными данными.

В ходе ознакомления с текстом автореферата возникли следующие вопросы и замечания:

1. Исследованные в работе сульфиды (в частности, ZnS и MoS<sub>2</sub>) довольно широко представлены в литературе и изучаются с точки зрения их люминесцентных и каталитических свойств. Имеются ли экспериментальные данные об их строении, полученные, например, с использованием спектроскопических методов, и проводил ли автор сравнение полученных им результатов с имеющимися экспериментальными данными?

Указанные замечания не снижают общей ценности диссертационной работы и не влияют на теоретические и практические результаты диссертации. Замечания носят рекомендательный характер и могут быть учтены автором при подготовке доклада, представляемого к защите.

Исходя из представленных в автореферате сведений, диссертационная работа Попова И. С. «Влияние дефектов на полиморфизм и электронные свойства бинарных сульфидов и оксидов металлов» соответствует требованиям п. 9 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 года № 842, а её автор, Попов Илья Сергеевич, заслуживает присуждения степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Старший научный сотрудник центра компетенций «Полимерные материалы»  
ФГБОУ ВО «Вятский государственный университет»,  
кандидат химических наук,

Саетова Наиля Саетовна



«25» ноября 2021 года

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего  
образования «Вятский государственный университет» (ФГБОУ ВО ВятГУ), 610000, г.  
Киров, ул. Московская, д. 36.  
тел. +7 (8332) 742-690  
эл. почта: n.sаетова@yandex.ru