

ОТЗЫВ

На автореферат диссертации Попова Ильи Сергеевича «Влияние дефектов на полиморфизм и электронные свойства бинарных сульфидов и оксидов металлов», представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Работа И.С.Попова посвящена изучению влияния некоторых видов дефектов – вакансий и наноразмерного состояния материала на кристаллическую и электронную структуру некоторых сульфидов и монооксида титана. Большинство исследованных материалов играет важную роль в современных технологиях и является объектом пристального изучения как теоретическими, так и экспериментальными методами. Достоинством работы, на мой взгляд, является демонстрация того факта, что такие разные дефекты как поверхность и вакансии в подрешётках металла и халькогена могут играть примерно одинаковую роль. Мне представляется, что углубить такой подход можно было бы, рассмотрев равновесие между этими дефектами в духе модели Я.Б.Пинеса, связывающей равновесную концентрацию вакансий и форму поверхности кристалла. Вероятно, такому погружению мешает стиль работы – она скорее похожа на сборник новелл, чем на роман, посвящённый последовательному и углублённому изучению одного объекта. Однако, новеллы, как жанр, имеют право на жизнь. Поэтому я считаю работу И.С.Попова достойной присуждения искомой степени. Автор продемонстрировал мастерское владение расчётными методами на самых разных объектах и в отношении разных дефектов – вакансий в обеих подрешётках, поверхности, дефектов замещения, показал мастерство в изучении влияния упорядочения дефектов на устойчивость конкретных кристаллических форм.

Актуальность такой работы связана с широким исследованием материалов, представленных в работе И.С.Попова.

Научная значимость определяется тем, что в работе стёрты многие «белые пятна» в исследовании влияния дефектов различной природы на стабильность конкретных кристаллических форм сульфидов и монооксида титана.

Достоверность результатов вытекает из совпадения результатов оптимизации рассмотренных моделей с экспериментальными данными.

В то же время, признавая право на жизнь жанра «научных новелл», я остаюсь поклонником жанра «научного романа» и предпочёл бы видеть углублённое исследование меньшего числа объектов, но с большим вниманием к ним. Так, в работе содержится много ответов на вопрос «как»? Как влияют вакансии на устойчивость TiO, как влияют вакансии в подрешётке олова на устойчивость разных структур и т.п. Но я не встретил ответов на вопрос «почему так происходит»? На мой взгляд, ответ на этот вопрос придаёт результатам предсказательную силу и позволяет сформулировать закономерности. Конечно, обобщение данных, полученных для разных систем, также может породить новые закономерности. Однако, этого в работе И.С.Попова я не увидел. Поэтому «новеллообразный» стиль работы И.С.Попова я бы считал скорее её недостатком.

Кроме того, у меня осталось впечатление недосказанности в области изучения формы наночастиц, нарезанных из нанослоёв дихалькогенидов переходных металлов. Я бы по своему опыту, ожидал реконструкции границ наночастиц. Нечто подобное выполнено как изучение температурной устойчивости структуры наночастиц, однако, это отражает скорее роль энтропии в устойчивости формы. Я бы ожидал искажения межатомных расстояний на границе наночастицы, связанные с различием окружения атома. Это энтальпийный вклад в свободную энергию. Такого рода искажения могут породить локализованные электронные состояния, способные существенно исказить и общую плотность электронных состояний и существенно повлиять на устойчивость форм и размеров наночастиц.

Однако, такие вопросы и замечания относятся к той категории, которые возникают всегда при ознакомлении с большой научной работой.

Хочу отметить, что автор продемонстрировал высокую теоретическую квалификацию. Результаты докладывались на международных семинарах и конференциях и опубликованы.

Считаю, что диссертационная работа представляет 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 марта 2021 г. № 426, а её автор Попов Илья Сергеевич заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

17.11.2021 г.

Доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Лаборатории электрических явлений Института Физики Металлов УрО РАН.

А.Н.Титов

Подпись А.Н.Титова удостоверяю

ФИО: Титов Александр Натанович

Учёная степень: доктор физико-математических наук

Специальность: 01.04.07 – физика твёрдого тела

Почтовый адрес: 620137, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18

Телефон: +7(343) 374-02-30

Адрес электронной почты: antitov@mail.ru

Название организации: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук

Должность: главный научный сотрудник

