

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Политова Бориса Вадимовича «Разработка и исследование перспективных материалов на основе молибдатов переходных металлов», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.15 – химия твердого тела (физико-математические науки).

В диссертации Политова Бориса Вадимовича изложены результаты теоретического и экспериментального исследования ряда молибдатов переходных металлов, являющихся перспективными материалами для энергетических электрохимических устройств.

Автором проведены систематические и разносторонние теоретические расчеты свойств исследуемых материалов. Анализировалась кристаллическая и электронная структура, магнитные свойства, энергетика образования дефектов. Проведены глубокие исследования термодинамической стабильности данных материалов, теоретические результаты сопоставлены с полученными из эксперимента данными. Исследовалась зависимость нестехиометрии от внешних условий. Продемонстрировано влияние изменений кристаллической структуры и химического состава на функциональные свойства исследуемых материалов, сформулирована методология целенаправленной модификации свойств путем изменения состава.

Работа представляет собой обширное, глубокое и систематическое исследование, сочетающее различные теоретические подходы и эксперимент. Полученные автором выводы имеют высокую практическую и теоретическую значимость – ее результаты позволяют как целенаправленно модифицировать эксплуатационные свойства исследуемых материалов, так дают разностороннюю информацию о деталях их структуры и электронного строения, термодинамических свойств.

Работа выполнена на высоком методическом уровне, автор демонстрирует владение литературными данными, исследования проведены с использованием современных методов, а выносимые на защиту положения обоснованы.

Однако есть незначительные замечания к изложенной в автореферате информации:

1. В автореферате не достаточно обоснован метод выбора тех или иных значений параметра Хаббарда U_{eff} . И хотя полученные расчетные данные хорошо согласуются с экспериментом, хотелось бы понимать, как именно было выбрано то или иное значение данного параметра для конкретных атомов.

2. В автореферате не указано, рассматривалось ли влияние взаимного расположения вакансий на их взаимодействие.

Эти замечания не являются существенными, и не умаляют достоинств работы Политова Бориса Вадимовича, выполненной на высоком методическом уровне, и которая, вне всякого сомнения, представляет собой значимое для развития знаний о свойствах сложных оксидов научное исследование.

Данная работа является научно-квалификационной работой, удовлетворяющей требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года №842 а ее автор, Политов Борис Вадимович, заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.15 – химия твердого тела (физико-математические науки).

21.02.2023

Старший научный сотрудник
Института химии твердого тела
и механохимии СО РАН
кандидат химических наук

Гайнутдинов Игорь Имильевич

630128, г.Новосибирск, ул. Кутателадзе 18.
тел. (383) 332-40-02 факс (383) 332-28-47
e-mail: ur1742@gmail.com

Подпись Гайнутдинова И.И. заверяю

Ученый секретарь
ИХТТМ СО РАН
д.х.н.



Т.П. Шахтшнейдер