

О Т З Ы В

научного руководителя на диссертационную работу Тимофеева Вячеслава Сергеевича «Теоретическое исследование физико-химических свойств кристаллов X_2NA ($X = \text{Mg}, \text{Ca}, A = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) со структурой антихалькопирита», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 - физическая химия.

Тимофеев Вячеслав Сергеевич в 2022 г. окончил с отличием магистратуру Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский государственный университет» (КемГУ) по направлению 03.04.02 «Физика» направленность «Компьютерное моделирование материалов и процессов» и с сентября 2022 г. продолжил обучение в очной аспирантуре КемГУ по направлению 1.3.8. «Физика конденсированного состояния». С 2022 г. и по настоящее время Тимофеев В.С. также работает в должности ассистента кафедры общей и экспериментальной физики КемГУ.

Интерес к научно-исследовательской работе в области теоретического изучения электронных свойств и соответствующих характеристик твердых тел на основе применения современных вычислительных методов Тимофеев В.С. проявил уже на ранних этапах обучения и к моменту поступления в аспирантуру имел хороший практический опыт решения указанных задач, связанных с необходимостью проведения значительной по объему вычислительной работы, каждый этап который требует как обоснованного выбора параметров расчета, так и постоянного контроля за качеством получаемых результатов.

Тимофеев Вячеслав Сергеевич показал себя как заинтересованный и грамотный исследователь, способный к самостоятельному решению поставленных задач.

Диссертационная работа Тимофеева В.С. посвящена систематическому исследованию физико-химических свойств группы перспективных соединений типа X_2NA ($X = \text{Mg}, \text{Ca}, A = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) со структурой антихалькопирита и их связи с существующими подобными системами, имеющими структуру типа анти- LiFeO_2 .

Основные задачи диссертационного исследования включают определение и анализ структурных параметров кристаллов X_2NA , электронных характеристик, колебательных свойств, а также исследование путей перехода от структуры антихалькопирита к структуре типа анти- LiFeO_2 с оценкой соответствующих энергетических параметров.

Решение первой группы задач, в ходе которого также был сделан обоснованный выбор вычислительной схемы, показало, что исследуемые соединения могут быть стабилизированы в структуре антихалькопирита. На этой основе далее исследованы электронные характеристики X_2NA , что включает анализ зонной структуры и состава электронных состояний, оптических свойств, описание особенностей и характера химической связи с использова-

нием карт распределения электронной плотности, функций электронной локализации, а также вычисленных на этом этапе максимально локализованных функций Ванье. Это позволило, помимо качественных выводов о преимущественно ионном типе химической связи, также сделать и количественную оценку степени ионности, которая для исследуемой группы соединений составила порядка 77%, что можно рассматривать, как один из наиболее важных результатов этой части диссертационной работы.

В разделе работы, посвященной исследованию колебательных свойств X_2NA со структурой антихалькопирита получены фононные спектры, тензоры эффективных зарядов, упругие постоянные, что позволило детализировать выводы о стабильности исследуемых соединений, а также термодинамические характеристики.

В заключительной главе диссертации рассматриваются аналогичные по составу и близкие по структуре реальные соединения X_2NA со структурой типа анти- $LiFeO_2$ и их связь с кристаллами в структуре антихалькопирита. Показано, что возможен структурный переход между гипотетическими и реальными структурами, построен его оптимальный путь и на этой основе получены оценки для энергий активации прямого и обратного перехода, что является наиболее интересным результатом, полученным в диссертации.

Работа является завершенным научным исследованием, которое выполнено на высоком научном уровне, изложено ясным и понятным языком, а его результаты отражены в журналах и материалах российских и международных конференций.

Диссертационная работа Тимофеева В.С. соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям «Положением о порядке присуждения ученых степеней» (пункты 9-11, 13, 14), утвержденном постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 г. (в действующей редакции), а ее автор, Тимофеев Вячеслав Сергеевич, заслуживает присвоения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 - физическая химия.

Научный руководитель

доктор физико-математических наук, профессор,
заведующий кафедрой теоретической физики
Института Фундаментальных Наук
Федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего образования
«Кемеровский государственный университет» (КемГУ)
« 13 » марта 2026 г.

650000, г. Кемерово, ул. Красная 6
тел. (3842) 58-31-95
e-mail: gordi@kemsu.ru

Гордиенко Алексей Болеславович

