

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации

Тимофеева Вячеслава Сергеевича

«Теоретическое исследование физико-химических свойств соединений

X_2NA ($X = \text{Mg, Ca}$; $A = \text{F, Cl, Br, I}$) со структурой антихалькопирита»

по специальности 1.4.4. Физическая химия

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Актуальность темы диссертации. Полупроводниковый класс – «инверсия» исследуемых В.С. Тимофеевым структур – включает два типа халькопиритов, $A^1B^3C_2^6$ и $A^2B^4C_2^5$, которые, в свою очередь, являются тройными аналогами кристаллов со структурой цинковой обманки A^2B^6 и A^3B^5 соответственно. В соединениях со структурой халькопирита содержится два сорта катионов, тетраэдрически окруженных анионами одного сорта. В.С. Тимофеевым и его предшественниками сделано предположение о возможности существования нового класса полупроводников, антихалькопиритов, в решетке которых, напротив, имеется два сорта анионов, окруженных катионами одного сорта. Несмотря на то, что на практике совершенных объемных кристаллов с такой структурой на настоящее время не получено, данный класс материалов обладает перспективными свойствами и, по крайней мере, некоторые соединения такого типа, вполне вероятно могут быть выращены из расплава стандартными методами. В состав исследуемых кристаллов входят анионы с высокой и катионы с низкой электроотрицательностью, что может приводить к их широкой области прозрачности и перспективности для применений в нелинейной оптике видимого, ИК и терагерцового диапазонов. В этой связи тема диссертационного исследования Тимофеева Вячеслава Сергеевича, в котором решается задача численного моделирования основных свойств электронной и фононной подсистем антихалькопиритов X_2NA ($X = \text{Mg, Ca}$; $A = \text{F, Cl, Br, I}$) представляются **актуальной**.

Научная новизна основных результатов диссертационной работы обусловлена неизученностью объекта исследования. Все основные расчетные результаты, электронные и фононные спектры, оптимизированные параметры решеток, модули упругости и др., не были получены ранее.

Обоснованность и достоверность научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации, обуславливается использованием современных и широко апробированных при решении аналогичных задач пакетов программ, взаимным согласием результатов расчетов, проведенных при использовании различных обменно-корреляционных функционалов, согласием с результатами, известными для родственных материалов, например, Be_2NA ($A = \text{F, Cl, Br, I}$).

Практическая ценность полученных в диссертации В. С. Тимофеева результатов заключается в полученных закономерностях изменения свойств соединений X_2NA ($X = \text{Mg, Ca}$; $A = \text{F, Cl, Br, I}$) со структурой антихалькопирита с увеличением доли ионности

(электроотрицательности) аниона седьмой группы. Это позволяет экспериментаторам целенаправленно ставить задачи по разработке технологии выращивания кристаллов, перспективных для конкретных приложений в нелинейной оптике, фотовольтаике и электронике.

Научная значимость полученных результатов также связана с установленными закономерностями изменения структурных, механических, электронных и фононных свойств антихалькопиритов X_2NA ($X = \text{Mg, Ca}$; $A = \text{F, Cl, Br, I}$). Они, как и параметры, использованные при вычислениях, будут полезны при постановке теоретических расчетов, в том числе другими методами, подобных структур.

Результаты, полученные В.С. Тимофеевым и представленные в диссертации, прошли апробацию на ряде профильных научных семинаров и конференций. По результатам исследований опубликовано 10 работ, в том числе 4 статьи в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук. Впечатляет количество выполненных типов расчетов: это и фононные спектры и спектры электронных состояний с разрешением по вкладам сортов атомов, и расчеты методом проталкивания эластичной ленты в вариантах NEB и SSNEB, расчеты диэлектрических функций и зарядов по Борну, модулей упругости, максимально локализованных функций Ванье и др. Выполненные расчеты и их описание, представленное в автореферате, демонстрируют высокую научную квалификацию соискателя, владение методами теории твердого тела и вычислительной квантовой химии. Автореферат написан аккуратно и позволяет получить адекватное представление о содержании диссертации. Замечены только две незначительные опечатки: «посвящен истории» при описании содержания второго раздела первой главы на стр. 7 и «182 наименований работ» на стр. 7.

К условным недостаткам проведенного исследования можно отнести то, что расчеты выполнены с использованием «стандартных» PBE-функционалов, не гибридных, без доли точного обмена Фока, что позволило бы получить более реалистичные значения ширины запрещенной зоны и др. Это, вероятно, объясняется доступностью вычислительных ресурсов и более узким спектром типов расчетов с гибридными функционалами, доступных в использованном программном пакете.

Таким образом, на основании изучения автореферата диссертации можно заключить, что диссертационная работа Тимофеева В. С. является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи нахождения новых алмазоподобных соединений с перспективными характеристиками, имеющей существенное значение для физической химии полупроводников. По актуальности, новизне, теоретической и практической значимости, объему проведенных исследований и уровню описания и анализа полученных результатов диссертационная работа «Теоретическое исследование физико-химических свойств соединений X_2NA ($X = \text{Mg, Ca}$; $A = \text{F, Cl, Br, I}$) со структурой антихалькопирита» **полностью соответствует**

требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям «Положением о порядке присуждения ученых степеней» (пункты 9, 10, 11, 13), утвержденном постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 (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.

Информация о лице, составившем отзыв:

ведущий научный сотрудник научной лаборатории терагерцовых исследований Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36; (3822) 52-98-52; rector@tsu.ru; www.tsu.ru), доктор физико-математических наук (1.3.11. Физика полупроводников)



Саркисов Сергей Юрьевич

Я, Саркисов Сергей Юрьевич, даю согласие на обработку моих персональных данных, связанную с защитой диссертации и оформлением аттестационного дела В.С. Тимофеева



Саркисов Сергей Юрьевич

25.05.2026

Подпись С. Ю. Саркисова удостоверяю

Ученый секретарь ученого совета ТГУ
кандидат экономических наук



Т.Ю. Осипова