

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. Проблема инжиниринга новых кристаллических структур с заданными свойствами, востребованными в фотонике, полупроводниковой электронике, сенсорике и др., не теряет своей актуальности. Современные методы квантовой химии и уровень вычислительной техники позволяют решать все более сложные задачи, все более точно воспроизводить свойства периодических и аморфных структур. Можно сказать, что многие теоретически исследованные структуры еще только ожидают экспериментальной реализации с необходимым совершенством. В диссертационной работе Тимофеева Вячеслава Сергеевича решается задача теоретического изучения нового, потенциально перспективного класса полупроводниковых кристаллов – антихалькопиритов. Можно отметить, что родственный класс – халькопиритов – изучается довольно давно, многие структуры этого класса также сначала были изучены теоретическими методами и, в итоге, нашли множество применений, от нелинейной оптики до спинтроники. В этой связи тема диссертации В.С. Тимофеева и решение поставленных в ней задач представляются **актуальными**.

Научная новизна темы диссертационной работы и полученных в ней результатов не вызывает сомнений, так как расчеты выполнены для ранее неизученных структур, многие из которых к настоящему времени не были получены экспериментально. Для соединений X_2NA ($X = \text{Mg, Ca}$; $A = \text{F, Cl, Br, I}$) впервые рассчитаны электронные зонные спектры, фононные спектры, модули упругости, а также оценены энергетические барьеры для перехода их решеток в структуры типа анти- LiFeO_2 .

Обоснованность и достоверность научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации, обусловливается использованием надежных пакетов программ (Quantum ESPRESSO) и теоретических подходов, непротиворечием представлениям о свойствах алмазоподобных ионно-ковалентных структур, в том числе воспроизводимых посредством их квантовохимического моделирования с применением методов теории функционала плотности, качественным согласием с результатами, известными для родственных материалов.

Практическая ценность полученных в диссертационной работе В. С. Тимофеева результатов связана с нахождением новых динамически стабильных фаз среди соединений с химической формулой X_2NA ($X = \text{Mg, Ca}$; $A = \text{F, Cl, Br, I}$) и расчетом их свойств, на основании чего возможно выделить перспективные для практического выращивания.

Например, предсказанное соединение MgNCl_2 по данным расчета с PBE-функционалом имеет ширину запрещенной зоны около 2 эВ, что, вероятно, соответствует реальному ее значению на уровне не менее 3 эВ, заметное двулучепреломление, и может быть интересно для применений в нелинейной оптике и фотовольтаике, как, например, широкозонный халькопирит CuAlS_2 .

Научная значимость полученных результатов обусловлена рассчитанными и экспериментально определенными свойствами соединений $X_2\text{NA}$ ($X = \text{Mg}, \text{Ca}$; $A = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) в структурах антихалькопирита: структурными и механическими свойствами, особенностями электронных и фононных спектров. Они будут полезны при теоретических исследованиях и анализе экспериментальных результатов, полученных для родственных структур.

Таким образом, в диссертационной работе В.С. Тимофеева действительно получен ряд результатов, неизвестных ранее и вносящих существенный вклад в развитие представлений об алмазоподобных полупроводниках. 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. Выполненные расчеты, разнообразные, с применением различных теоретических методов и подходов, а также их описание, представленное в автореферате, являются свидетельством высокой научной квалификации соискателя. Автореферат оформлен на необходимо уровне, написан четким языком и адекватно описывает содержание диссертации и основные полученные результаты.

По результатам изучения материала, представленного в автореферате, можно сформулировать следующий вопрос к соискателю: в результате моделирования с применением обобщенного метода SSNEB получено, что для ряда структур энергетический барьер для перехода в структуру анти- LiFeO_2 ниже, чем для обратного. Значит ли это, что для этих структур решетка анти- LiFeO_2 все-таки является термодинамически более выгодной?

В целом, из анализа представленного в автореферате материала следует, 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 $X_2\text{NA}$ ($X = \text{Mg}, \text{Ca}$; $A = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) 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:

директор научно-образовательного центра «Наноэлектроника» 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 (01.04.10. Физика полупроводников), профессор

Брудный Валентин Натанович

Я, Брудный Валентин Натанович, даю согласие на обработку моих персональных данных, связанную с защитой диссертации и оформлением аттестационного дела В.С. Тимофеева

Брудный Валентин Натанович

25.05.2026

Подпись В. Н. Брудного удостоверяю

Ученый секретарь ученого совета ТГУ
кандидат экономических наук



Т.Ю. Осипова