

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Тимофеева Вячеслава Сергеевича «Теоретическое исследование физико-химических свойств соединений 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 (Специальность 1.4.4. - Физическая химия).

Диссертационная работа В. С. Тимофеева посвящена первопринципному исследованию тройных алмазоподобных полупроводников, относящихся к структурному типу антихалькопирита. Актуальность темы не вызывает сомнений, поскольку поиск и прогнозирование свойств новых материалов для оптоэлектроники и фотовольтаики является приоритетной задачей современного материаловедения. Общеизвестно, что применение методов компьютерного моделирования на основе теории функционала плотности (ТФП) позволяет существенно снизить затраты на дорогостоящий и потенциально опасный экспериментальный поиск новых кристаллических веществ, особенно при работе с токсичными веществами. Выбранный автором класс соединений X_2NA ранее был изучен крайне слабо, а их систематическое теоретическое описание в структуре антихалькопирита, выделенной в отдельный тип лишь в 2014 году, произведено впервые. Это определяет высокую научную новизну и значимость работы.

К основным преимуществам и наиболее значимым результатам, судя по автореферату, можно отнести следующие:

1. Автором проведен комплексный расчет ключевых физико-химических параметров для двух рядов соединений. Получены данные для кристаллической и зонной структур, фононных спектров, упругих, диэлектрических и оптических свойств.
2. В работе определена совокупность динамически и механически стабильных соединений в избранном классе кристаллов. В частности, установлена динамическая неустойчивость ряда кристаллов Ca_2NA в отличие от стабильных Mg_2NA , что является прямым руководством для экспериментаторов.
3. Отдельного внимания заслуживает анализ твердофазного перехода между структурой антихалькопирита и структурой анти- LiFeO_2 с помощью метода упругой ленты. Расчет энергетических барьеров (например, 2.97 эВ для Mg_2NF) дает количественное представление о вероятности существования соединений в каждой из указанных модификаций.
4. Использование современных методов, таких как максимально локализованные функции Ванье и функция электронной локализации (ФЭЛ), позволило доказать преимущественно ионный характер химической связи с малой долей ковалентности, что дополнительно подтверждено расчетом механических характеристик (соотношение G/B).

Несмотря на высокий уровень работы, при прочтении автореферата возникли следующие замечания, не снижающие общей положительной оценки:

1. В автореферате указано, что расчет проводился в трех приближениях (PZ, PW, PBE), но изложение дальнейших результатов (таблицы, графики) приводится только для приближения PBE. Вполне можно было представить в тексте, насколько велики отличия, например, постоянных решетки или ширины запрещенной зоны, полученных при использовании разных функционалов, и документально обосновать выбор PBE как основного приближения.
2. В таблице 1 (стр. 8) приведены значения координаты x позиции Уайкоффа 8d, которая в явном виде почти не комментируется в тексте автореферата. Было бы полезно пояснить, как вариация данного параметра влияет на искажение тетраэдров и, соответственно, на свойства соединений при движении по ряду галогенов.
3. При описании представленных на рисунках 5 и 6 фононных спектров автор отмечает наличие мнимых частот у Ca_2NA , справедливо указывая на их динамическую неустойчивость в гармоническом приближении. Однако, поскольку

для всех соединений Ca_2NA найдена положительная определенность матрицы упругих констант, остается неясность относительно возможности их метастабильного существования при учете ангармонических эффектов.

4. При рассмотрении оптических свойств почеркнута эффективность Mg_2NF для поглощения ИК и видимого света, но из автореферата не ясно, учитывалась ли при расчете спектральной зависимости коэффициента поглощения поправка на ширину запрещенной зоны, поскольку известно, что функционал РВЕ склонен к ее занижению, что вполне может повлиять на положение края поглощения.

Отмечу, что сделанные замечания носят дискуссионный или уточняющий характер. Судя по автореферату, диссертационная работа Тимофеева В. С. является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи поиска новых соединений с заданными или прогнозируемыми характеристиками, имеющей существенное значение для физической химии полупроводников, и материалов на их основе. По актуальности, новизне, теоретической и практической значимости, объему проведенных исследований и уровню обсуждения полученных результатов диссертационная работа «Теоретическое исследование физико-химических свойств соединений X_2NA ($\text{X} = \text{Mg}, \text{Ca}$; $\text{A} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) 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:

заведующий лабораторией оптических материалов и структур Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук (630090, Россия, г. Новосибирск, пр. ак. Лаврентьева, 13, тел. (383) 330-90-55, e-mail: ifp@isp.nsc.ru, <https://www.isp.nsc.ru>), кандидат физико-математических наук (01.04.07 – Физика конденсированного состояния), доцент

Атучин Виктор Валерьевич

Я, Атучин Виктор Валерьевич, даю согласие на обработку моих персональных данных, связанную с защитой диссертации и оформлением аттестационного дела В.С. Тимофеева

Атучин Виктор Валерьевич

«27» мая 2026 г.

Подпись В.В. Атучина удостоверяю

Ученый секретарь ИФП СО РАН
кандидат физико-математических наук



С.А. Аржанникова