

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.315.09,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«КЕМЕРОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ,
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от «30» июня 2026 г. № 20

О присуждении Тимофееву Вячеславу Сергеевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Теоретическое исследование физико-химических свойств кристаллов X_2NA ($X = \text{Mg, Ca}$; $A = \text{F, Cl, Br, I}$) со структурой антихалькопирита» по специальности 1.4.4. Физическая химия принята к защите 16 апреля 2026 г. (протокол заседания № 16) диссертационным советом 24.2.315.09, созданным на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 650000, г. Кемерово, ул. Красная, 6, действующим на основании приказа Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 818/нк от 20 апреля 2023 года.

Соискатель Тимофеев Вячеслав Сергеевич, 24 июня 1998 года рождения, в 2022 году окончил с отличием магистратуру Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский государственный университет» по направлению 03.04.02 «Физика». С сентября 2022 г. продолжил обучение в очной аспирантуре Кемеровского государственного университета по направлению 1.3.8. «Физика конденсированного состояния».

С 2022 г. и по настоящее время работает в должности ассистента кафедры общей и экспериментальной физики института фундаментальных наук федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре теоретической физики института фундаментальных наук федерального государственного бюджетного образовательного учреждения «Кемеровский государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Гордиенко Алексей Болеславович, заведующий кафедрой теоретической физики института фундаментальных наук федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский государственный университет».

Официальные оппоненты:

Полетаев Геннадий Михайлович, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова», научное управление, ведущий научный сотрудник;

Дугинова Екатерина Борисовна, кандидат физико-математических наук, доцент, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева», кафедра физики, доцент;

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт химии твердого тела и механохимии» Сибирского отделения Российской академии наук (ИХТТМ СО РАН), г. Новосибирск, в своем положительном отзыве, подписанном старшим научным сотрудником группы «Теоретической и вычислительной химии твердого тела», кандидатом химических наук Гайнутдиновым Игорем Имильевичем и утвержденным Немудрым Александром Петровичем, директором ИХТТМ СО РАН членом-корреспондентом РАН, доктором химических наук, указала, что:

диссертационная работа Тимофеева Вячеслава Сергеевича «Теоретическое исследование физико-химических свойств соединений X_2NA ($X = Mg, Ca$; $A = F, Cl, Br, I$) со структурой антихалькопирита», представленная на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук, является завершённой научно-квалификационной работой, выполненной на высоком научном уровне. По актуальности, научной новизне, объёму проработанности данных, теоретической и практической значимости диссертационная работа удовлетворяет требованиям п. 9-14 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842 (с изменениями и дополнениями), а её автор, Тимофеев Вячеслав Сергеевич, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

По теме диссертации соискателем опубликовано 10 научных работ общим объемом 3,83 п.л. (вклад автора — 1,93 п.л.), в том числе в рецензируемых научных изданиях, входящих в Перечень ВАК РФ — 4 работы с общим объемом 3,01 п.л. (личный вклад автора диссертации — 1,33 п.л.). Сведения об опубликованных по теме диссертации научных работах указаны соискателем достоверно.

Наиболее значительные публикации Тимофеева В.С. по теме диссертации:

1. Гордиенко, А. Б. Электронная структура и динамика решетки соединений Be_2NA ($A = F, Cl, Br, I$) со структурой антихалькопирита / А. Б. Гордиенко, Ю. М. Басалаев, В. С. Тимофеев // Физика твердого тела. — 2023. — № 1 (65). — С. 76–82. DOI: 10.21883/FTT.2023.01.53926.495.

2. Тимофеев, В. С. Исследование структуры и особенностей химической связи тройных соединений бериллия Be_2NA ($A = F, Cl, Br, I$) с использованием функций Ванье / В. С. Тимофеев, А. Б. Гордиенко, Ю. М. Басалаев // Известия вузов. Физика. — 2024. — № 2 (67). — С. 124–127. DOI: 10.17223/00213411/67/2/14.

3. Тимофеев, В. С. Первопринципное исследование структуры и химической связи группы гипотетических соединений Mg_2NA ($A = F, Cl, Br, I$) с решеткой антихалькопирита / В. С. Тимофеев, А. Б. Гордиенко // Журнал структурной химии. — 2024. — № 6 (65). — С. 127724. DOI: 10.26902/JSC_id127724.

4. Тимофеев, В. С. DFT-исследование динамики решетки и фазовых переходов соединений Mg_2NA ($A = F, Cl, Br, I$) в структурах антихалькопирита и анти- $LiFeO_2$ / В. С. Тимофеев, А. Б. Гордиенко // Журнал структурной химии. — 2025. — № 8 (66). — С. 149776. DOI: 10.26902/JSC_id149776.

На автореферат поступили отзывы от:

— **Кульковой Светланы Евгеньевны**, доктора физико-математических наук, главного научного сотрудника и **Бакулина Александра Викторовича**, доктора физико-математических наук, старшего научного сотрудник лаборатории физики нелинейных сред федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук». Отзыв положительный, имеется замечание: из автореферата не ясно какой метод был использован, а именно, ультромягких псевдопотенциалов или метод проекционных присоединенных волн? Кроме того, автореферат содержит стилистические ошибки, в частности «посвящен историю изучения», «отмечается на перспективность», стр. 7 и др.

— **Агучина Виктора Валерьевича**, кандидата физико-математических наук, заведующего лабораторией оптических материалов и структур Федерального

государственного бюджетного учреждения науки Института физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук. Отзыв положительный, имеются замечания:

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 нестабильность 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 подчеркнута 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 PBE склонен к ее занижению, что вполне может повлиять на положение края поглощения.

— **Брудного Валентина Натановича**, доктора физико-математических наук, директора научно-образовательного центра «Нанoeлектроника» Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет». Отзыв положительный, имеется замечание:

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?

— **Саркисова Сергея Юрьевича**, доктора физико-математических наук, ведущего научного сотрудника научной лаборатории терагерцовых исследований Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет». Отзыв положительный, имеется замечание:

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.

— **Мариновой Софьи Андреевны**, кандидата физико-математических наук, доцента кафедры физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский государственный аграрный университет – МСХА имени К.А.Тимирязева». Отзыв положительный, имеется замечание:

представленные в автореферате значения ширины запрещенной зоны получены в рамках приближения PBE. Было бы целесообразно указать в тексте автореферата

результаты, полученные для других приближений, или же уточнить, почему выбрано именно это.

— **Браташа Георгия Сергеевича**, кандидата химических наук, доцента кафедры химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский государственный аграрный университет – МСХА имени К.А.Тимирязева». Отзыв положительный, имеются замечания:

1. Чем применим выбор программного пакета Quantum ESPRESSO и программы VESTA для проведения исследования?

2. С помощью каких методов доказано наличие ионной химической связи в соединении X_2NA ($X=Mg, Ca$; $A=F, Cl, Br, I$)?

Все отзывы оканчиваются выводом, что соискатель заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия. Во всех отзывах отмечается соответствие работы требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям «Положением о порядке присуждения ученых степеней» (пункты 9-11, 13, 14), утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (в действующей редакции).

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что Полетаев Геннадий Михайлович является ведущим специалистом в области компьютерного моделирования физико-химических свойств твердых тел; Дугинова Екатерина Борисовна является признанным специалистом и соавтором цикла работ, посвященных электронной структуре соединений с решеткой халькопирита; Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения Российской академии наук» ведет обширные исследования в области физико-химических свойств новых материалов и твердофазных превращений.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

Предложена оригинальная научная гипотеза о существовании ряда соединений галогенид-нитридов щелочноземельных металлов, кристаллизующихся в структуре антихалькопирита.

доказаны:

для всех представленных соединений X_2NA ($X = Mg, Ca$; $A = F, Cl, Br, I$) структура антихалькопирита является устойчивой;

динамическая стабильность кристаллов Mg_2NA ($A = F, Cl, Br, I$) и механическая стабильность кристаллов X_2NA ($X = Mg, Ca$; $A = F, Cl, Br, I$), кристаллизующихся в структуре антихалькопирита на основе анализа фононных спектров и упругих констант;

возможность твердофазного перехода из структуры антихалькопирита в структуру типа анти- $LiFeO_2$ для динамически стабильных кристаллов Mg_2NF .

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

применительно к проблематике диссертации результативно использованы расчетные методы теории функционала плотности для расширения знаний о кристаллах X_2NA ($X = Mg, Ca$; $A = F, Cl, Br, I$), включая их кристаллическую и электронную структуру, оптические, упругие и тепловые свойства;

изложены аргументы в пользу возможности реализации для тройных соединений галогенид-нитридов щелочноземельных металлов алмазоподобной структуры антихалькопирита;

изучены на теоретическом уровне условия перехода структуры антихалькопирита в структуру анти- $LiFeO_2$ для изокатионных рядов тройных алмазоподобных кристаллов X_2NA ($X = Mg, Ca$; $A = F, Cl, Br, I$).

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

— определены значения энергии активации твердофазного перехода между структурами антихалькопирита и анти-LiFeO₂ для кристалла Mg₂NF, что позволяет оценить температурный диапазон стабильности и условия синтеза целевой фазы;

— представлен спектр физико-химических параметров, который позволяет прогнозировать применимость соединений X₂NA (X = Mg, Ca; A = F, Cl, Br, I) в структуре антихалькопирита в оптоэлектронике и устройствах нелинейной оптики.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

теория реализована с использованием проверенных и хорошо зарекомендовавших себя методов теории функционала плотности и первопринципных расчетов, реализованных в программном пакете Quantum ESPRESSO;

идея базируется на анализе и обобщении литературных данных по исследованию структур халькопирита и антихалькопирита.

использовано сравнение полученных результатов с литературными данными для соединений, кристаллизующихся в структуре антихалькопирита (Cu₂BrCl, Zn₂SeTe, Sn₂GeSi, Ag₂BrCl, Ga₂SbP и Ge₂SiC), а также с экспериментальными данными для кристаллов Mg₂NF и Ca₂NF в структуре анти-LiFeO₂.

установлено качественное согласие авторских результатов с литературными данными по изменению свойств родственных соединений при изокатионном и изоанионном замещении.

Личный вклад соискателя состоит в изучении и анализе литературных данных по теме работы, планировании численного эксперимента, проведении всех DFT-расчетов и анализе полученных данных, подготовке публикаций по выполненной работе. Выбор направления исследований, формулировка задач, обсуждение результатов, анализ и интерпретация полученных данных проводились совместно с научным руководителем. В статьях, опубликованных в соавторстве, автору принадлежат результаты, сформулированные в основных положениях, выносимых на защиту, и выводах работы.

В ходе защиты диссертации были высказаны следующие критические замечания:

1. Автором рассчитаны заниженные величины запрещенной зоны энергий, нетипичные для кристаллов с ионной связью.
2. Утверждение соискателя о применимости исследуемых соединений в оптоэлектронике недостаточно обосновано, поскольку базируется только на величине ширины запрещенной зоны.
3. Динамическая стабильность ряда исследованных соединений ставится под сомнение из-за присутствия мнимых мод акустических колебаний

Соискатель Тимофеев В.С. ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы и привел собственную аргументацию по высказанным замечаниям:

1. Особенность использованного функционала PBE заключается в занижении ширины запрещенной зоны, которые получаются меньше экспериментальных на 30-50%, однако он хорошо подходит для расчета параметров кристаллической решетки.
2. Данное исследование является первым этапом изучения новых соединений, их практическая применимость в оптоэлектронике носит преимущественно прогностический характер.
3. Согласно литературным данным, учет ангармонических поправок при расчете колебательных спектров, как правило, приводит к исчезновению мнимых частот.

На заседании «30» июня 2026 года диссертационный совет принял решение присудить Тимофееву В.С. ученую степень кандидата физико-математических наук за решение научной задачи, имеющей важное значение для развития физической химии твердого тела, а именно: теоретическое исследование физико-химических свойств группы кристаллов X₂NA (X = Mg, Ca; A = F, Cl, Br, I) со структурой антихалькопирита и их взаимосвязи с реальными структурами, включая идентификацию стабильных соединений, определение

типа химической связи, расчета колебательных, упругих, диэлектрических и оптических характеристик, а также значений энергии активации твердофазного перехода между структурами антихалькопирита и анти-LiFeO₂.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 14 человек, из них 14 докторов наук по специальности 1.4.4. Физическая химия, участвовавших в заседании, из 15 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 14, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель диссертационного совета
д.ф.-м.н., профессор
Ученый секретарь диссертационного
совета
д.ф.-м.н., профессор



 Каленский Александр Васильевич

 Звеков Александр Андреевич

Дата оформления заключения 1 июля 2026 года.