

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

экспертной комиссии диссертационного совета 24.2.315.09 на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский государственный университет» по предварительному рассмотрению диссертации **Тимофеева Вячеслава Сергеевича** на тему: **«Теоретическое исследование физико-химических свойств соединений X_2NA ($X = \text{Mg, Ca}$; $A = \text{F, Cl, Br, I}$) со структурой антихалькопирита»**, представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Экспертная комиссия диссертационного совета 24.2.315.09 на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский государственный университет» в составе: **Ларичев Тимофей Альбертович**, доктор химических наук, профессор (председатель); члены комиссии: **Корабельников Дмитрий Васильевич**, доктор физико-математических наук, доцент; **Федоров Игорь Александрович**, доктор физико-математических наук, доцент; **Звеков Александр Андреевич**, доктор физико-математических наук, профессор; созданная в соответствии с п. 31 Положения о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук, утвержденного приказом Минобрнауки России от 10 ноября 2017 г. № 1093 (в действующей редакции), на основании ознакомления с диссертацией **Тимофеева Вячеслава Сергеевича** на тему: **«Теоретическое исследование физико-химических свойств соединений X_2NA ($X = \text{Mg, Ca}$; $A = \text{F, Cl, Br, I}$) со структурой антихалькопирита»**, выполненной на кафедре теоретической физики Института фундаментальных наук федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский государственный университет» и состоявшегося обсуждения приняла **следующее заключение:**

1. Соискатель ученой степени кандидата физико-математических наук Тимофеев В.С. соответствует требованиям п. 3 Положения о присуждении ученых степеней (утв. Постановлением Правительства России от 24.02.2013 г. №842 в действующей редакции), необходимым для допуска его диссертации к защите.

2. Тема и содержание диссертации соответствуют паспорту научной специальности 1.4.4 – Физическая химия в части развития модельных представлений о структуре новых фаз и возникающих на их основе физико-химических свойствах кристаллов галогенид-нитридов щелочноземельных металлов: п. 11 **«Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных сред и белковом окружении»**; п. 12 **«Физико-химические основы процессов химической технологии и синтеза новых материалов»**; п. 2. **«Экспериментальное определение термодинамических свойств веществ, расчет термодинамических функций простых и сложных систем, в том числе на основе методов статистической термодинамики, изучение термодинамических аспектов фазовых превращений и фазовых переходов»** и отрасли наук «физико-математические науки», так как

работа базируется на теоретическом моделировании с использованием методов квантовой химии, а предметом изучения выступают физико-химические свойства исследуемых соединений.

Направления исследований, представленных в диссертационной работе Тимофеева В.С., представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия, соответствуют профилю диссертационного совета 24.2.315.09, созданного на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский государственный университет».

3. По теме диссертации опубликовано 10 научных работ, которые полностью отражают основное содержание диссертации, в том числе 4 статьи в российских и международных журналах, входящих 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, и 6 тезисов докладов. Общий объем публикаций по теме диссертации составляет 3,83 п.л., в том числе вклад соискателя - 1,93 п.л. Диссертация удовлетворяет требованиям, установленным пунктами 11 и 13 Положения о присуждении ученых степеней (утв. Постановлением Правительства России от 24.02.2013 г. №842 в действующей редакции).

4. Текст диссертации представляет собой самостоятельную научно-квалификационную работу, в которой содержится решение научной задачи, имеющей значение для развития физической химии: исследованы физико-химические свойства двух изокатионных рядов тройных алмазоподобных соединений X_2NA ($X = \text{Mg, Ca; } A = \text{F, Cl, Br, I}$) со структурой антихалькопирита. Текст диссертации обладает внутренним единством, свидетельствует о личном вкладе автора диссертации в науку и не содержит заимствованного материала без ссылки на автора и источник заимствования. Не содержит результатов научных работ, выполненных в соавторстве, без ссылок на соавторов. В ходе проверки системой «Антиплагиат» (от 02.04.2026) доля оригинального текста составила 95,25% текста диссертации и 4,75 % – самоцитирование работ соискателя. Диссертация удовлетворяет требованиям, установленным пунктами 9, 10 и 14 Положения о присуждении ученых степеней (утв. Постановлением Правительства России от 24.02.2013 г. №842 в действующей редакции).

5. В диссертационной работе содержатся новые научные результаты и положения, выдвигаемые для публичной защиты, результативно использованы расчетные методы теории функционала плотности, адаптированные для кристаллических твердых тел, для расширения знаний о смешанных кристаллах типа X_2NA ($X = \text{Mg, Ca; } A = \text{F, Cl, Br, I}$), включая их электронную структуру, оптические, упругие и тепловые свойства; оценена устойчивость данных соединений в структуре антихалькопирита, исходя из которой может быть сделан вывод о принципиальной возможности синтеза устойчивых представителей данной группы веществ, а также возможность получения их в структуре анти- LiFeO_2 через лабильную структуру антихалькопирита; развиты теоретические представления о химической связи и устойчивости кристаллических решеток галогенид-нитридов щелочноземельных металлов, а также возможных механизмах их трансформации в устойчивые кристаллографические системы.

6. Текст диссертации, представленный к предварительному рассмотрению, идентичен тексту диссертации, размещенному на сайте федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский государственный университет».

Комиссия рекомендует:

1. Принять диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия **Тимофеева Вячеслава Сергеевича** на тему: **«Теоретическое исследование физико-химических свойств соединений X_2NA ($X = Mg, Ca; A = F, Cl, Br, I$) со структурой антихалькопирита»** к защите в диссертационный совет 24.2.315.09 на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский государственный университет».
2. Рассмотреть в качестве официальных оппонентов из числа компетентных в соответствующей отрасли науки ученых, имеющих публикации в соответствующей области исследований:

Полетаева Геннадия Михайловича, доктора физико-математических наук, профессора, ведущего научного сотрудника научного управления Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова», г. Барнаул, являющегося признанным специалистом в области моделирования физико-химических свойств конденсированных веществ.

Дугинову Екатерину Борисовну, кандидата физико-математических наук, доцента, доцента кафедры физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева», г. Кемерово, известную своими работами в области применения методов квантовой химии для расчета электронной структуры, упругих и тепловых свойств полупроводниковых соединений, включая соли со сложными анионами.

3. Рассмотреть в качестве ведущей организации **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки "Институт химии твердого тела и механохимии" Сибирского отделения Российской Академии Наук (ИХТТМ СО РАН)**, г. Новосибирск. Выбор ведущей организации обусловлен ее обширными исследованиями и публикациями в области физической химии твердых тел, в том числе в области синтеза и квантово-химического моделирования структуры и физико-химических свойств кристаллических твердых тел.

Председатель экспертной комиссии:

доктор химических наук, профессор

Ларичев Т.А.

Члены экспертной комиссии:

доктор физико-математических наук, доцент

Корабельников Д.В.

доктор физико-математических наук, доцент

Федоров И.А.

доктор физико-математических наук, профессор

Звеков А.А.

ФГБОУ ВО «КемГУ»
Отдел кадров УРП

ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ.

И.И. Смирнов

должность

подпись

«16» 04

2016



Федорова И.А., Звекова А.А.