

## ОТЗЫВ

**На автореферат диссертационной работы Тимофеева Вячеслава Сергеевича на тему «Теоретическое исследование физико-химических свойств соединений  $X_2NA$  ( $X=Mg, Ca$ ;  $A=F, Cl, Br, I$ ) со структурой антихалькопирита», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия**

В настоящее время полупроводниковые соединения на основе новых химических веществ представляют собой предмет пристального исследования ученых в сфере материаловедения. Свойства веществ определяются составом и строением, и взаимным влиянием атомов в молекулах. Создание веществ с заданным строением и свойствами – основная задача физической химии. Однако, эксперименты по синтезу новых соединений требуют больших экономических затрат. Поэтому теоретическое моделирование позволяет решать задачи по изучению свойств кристаллических веществ и оптимизировать их синтез.

В данном исследовании изучены тройные кристаллы со структурой антихалькопирита (структурно похожей на халькопирит), которые являются актуальными объектами для разработки новых материалов для функциональных устройств, используемых в различных отраслях народного хозяйства.

Цель научной работы Тимофеева Вячеслава Сергеевича заключалась в систематическом исследовании физико-химических свойств двух изокатионных рядов тройных алмазоподобных соединений  $X_2NA$  ( $X=Mg, Ca$ ;  $A=F, Cl, Br, I$ ) со структурой антихалькопирита с привлечением методов компьютерного моделирования, основанными на теории функционала плотности. В научной новизне автором отмечается, что впервые теоретически исследованы алмазоподобные кристаллы, которые относятся к структурному типу антихалькопирита с расчетом параметров кристаллической и электронной структуры. Исследование проведено на высоком научном уровне, отличается новизной, достоверностью и обоснованностью сделанного по научной работе заключения, теоретической значимостью. По диссертационной работе имеется 10 публикаций, среди которых 4 статьи в журналах, рекомендованных ВАК РФ.

Замечания и вопросы по автореферату диссертации:

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

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

Считаю, что диссертационная работа Тимофеева Вячеслава Сергеевича на тему «Теоретическое исследование физико-химических свойств соединений  $X_2NA$  ( $X=Mg, Ca$ ;  $A=F, Cl, Br, I$ ) со структурой антихалькопирита» является научно-квалифицированной 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 Тимофеева В.С. полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям «Положение о порядке присуждения ученых степеней» (пункты 9, 10, 11, 13), утвержденном постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 г. (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.

Отзыв подготовлен:

Браташ Георгий Сергеевич,

Кандидат химических наук (02.00.03. Органическая химия),

доцент кафедры химии

ФГБОУ ВО РГАУ-МСХА имени К.А. Тимирязева

*Браташ*



ОТДЕЛ ЗАПЕЧАТКИ  
УЧРЕДИТЕЛЯ СЛУЖБЫ КАДРОВОЙ  
РАБОТЫ И ПРИЕМА  
ПЕРСОНАЛА  
С.В. ДОГУТОВ  
202 г.

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

«РОССИЙСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ АГРАРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ –

МСХА имени К.А. ТИМИРЯЗЕВА»

(ФГБОУ ВО РГАУ-МСХА имени К.А. Тимирязева). ПОЧТОВЫЙ АДРЕС: 127434  
Г.МОСКВА, УЛ. ТИМИРЯЗЕВСКАЯ 49.

ТЕЛ. 8(499)976-32-16, E-MAIL.: [g.bratash@rgau-msha.ru](mailto:g.bratash@rgau-msha.ru)