

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», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия.

Изучение свойств новых химических соединений с заданными параметрами и свойствами остается в центре внимания как экспериментаторов, так и теоретиков. Поскольку экспериментальный поиск новых соединений требует больших затрат, связанных как с расходами на синтез материалов, так и на приборную базу, а также опасен при работе с токсичными веществами, то теоретическое моделирование помогает быстрее исследовать свойства кристаллов и оптимизировать их синтез. Тройные алмазоподобные кристаллы со структурой антихалькопирита привлекают особое внимание, поскольку перспективны для применения в оптоэлектронике, фотовольтаике и устройствах нелинейной оптики.

Кристаллы со структурой антихалькопирита имеют схожую с халькопиритом структуру с переставленной катионной подрешеткой. Изучение подобных материалов помогает расширить семейство алмазоподобных полупроводников, что открывает перспективы для разработки на их основе новых материалов для функциональных устройств. В этой связи **актуальность** тематики диссертационной работы Тимофеева В.С., направленной на систематическое исследование физико-химических свойств двух изокатионных рядов тройных алмазоподобных соединений со структурой антихалькопирита X_2NA , не вызывает сомнений.

В данной работе для расчетов электронной структуры материалов используются методы в рамках теории функционала электронной плотности, реализованные программным пакетом Quantum ESPRESSO. В диссертационной работе было показано, что для всех кристаллов состава X_2NA ($X = \text{Mg}, \text{Ca}$; $A = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) с решеткой антихалькопирита существует равновесная кристаллическая структура, и согласно расчетам они относятся к полупроводникам. В работе была оценена ширина запрещенной зоны, которая составляет 1.3 – 2.1 эВ. В результате анализа фононных спектров была подтверждена динамическая стабильность таких соединений, если $X = \text{Mg}$, и, напротив, соединения с Ca имеют мнимые частоты, что свидетельствует об их нестабильности. Большинство результатов были получены диссертантом впервые и имеют научную и практическую значимость.

В качестве замечания можно отметить, что 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.

Текст автореферата написан хорошим научным языком, а его структура является логичной и обоснованной. Выводы подтверждаются полученными результатами, они согласованы и не содержат внутренних противоречий.

Результаты, полученные Тимофеевым В.С., представляются достоверными, поскольку использовались современные хорошо апробированные теоретические методы изучения твердых тел. Полученные результаты неоднократно докладывались на международных и всероссийских конференциях. По материалам диссертации опубликовано 4 статьи в рецензируемых научных журналах.

На основании автореферата, 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 проблемы, объему и научному уровню, новизне, достоверности и научной ценности полученных результатов, обоснованности выводов и положений, выносимых на защиту, представленная диссертационная работа «Теоретическое исследование физико-химических свойств соединений X_2NA ($X = \text{Mg, Ca}$; $A = \text{F, Cl, Br, I}$) 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.

Даем согласие на включение персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.

доктор физико-математических наук
(1.3.8. (01.04.07) Физика конденсированного состояния),
профессор,
главный научный сотрудник
лаборатории физики нелинейных сред



Кулькова Светлана Евгеньевна

доктор физико-математических наук
(1.3.8. Физика конденсированного состояния),
старший научный сотрудник
лаборатории физики нелинейных сред



Бакулин Александр Викторович

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения им. Б.Е. Лангмюра Сибирского отделения Российской академии наук (ИФПМ СО РАН)
Адрес: просп. Академический, д. 2/4, г. Томск, 634055
E-mail: kulkova@ispms.ru, bakulin@ispms.ru



«01.06.2026» УЧЕНЫЙ
СТАРША ИФПМ СО РАН
О. МАТОЛЫГИНА

