

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

Современная индустрия высоких технологий испытывает острую потребность в новых полупроводниковых материалах с управляемыми физико-химическими параметрами для нужд оптоэлектроники, фотовольтаики и нелинейной оптики. Диссертационное исследование В. С. Тимофеева посвящено комплексному теоретическому анализу малоизученного класса тройных алмазоподобных соединений группы X_2NA со структурой антихалькопирита.

Работа представляет собой законченный цикл квантово-химических исследований, выполненных на высоком методологическом уровне с использованием теории функционала плотности (DFT). К наиболее значимым элементам научной новизны можно отнести следующие результаты:

- впервые определены равновесные параметры тетрагональной решетки группы соединений X_2NA ($X = \text{Mg}, \text{Ca}$; $A = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) со структурой антихалькопирита»;
- на основе расчета зонной структуры и плотности электронных состояний доказан полупроводниковый характер соединений, а также проведена оценка типа химической связи на основании распределения электронной плотности;
- рассчитаны фононные спектры и упругие константы систем. Установлено, что соединения ряда Mg_2NA обладают полной динамической и механической устойчивостью в структуре антихалькопирита;
- с помощью современных методов интерполяции минимального энергетического пути (NEB и G-SSNEB) теоретически обоснована и количественно описана (с расчетом энергий активации) возможность твердофазного перехода неустойчивых фаз антихалькопирита в кристаллическую структуру типа анти- LiFeO_2 для соединений Mg_2NF и Ca_2NF .

Практическая ценность работы заключается в формировании фундаментальной базы физико-химических констант (диэлектрические, оптические, механические и термодинамические свойства), которая может

служить надежным ориентиром для направленного лабораторного синтеза функциональных материалов.

Высоко оценивая общий уровень диссертационного исследования, необходимо высказать следующее дискуссионное замечание:

представленные в автореферате значения ширины запрещенной зоны получены в рамках приближения РВЕ. Было бы целесообразно указать в тексте автореферата результаты, полученные для других приближений, или же уточнить, почему выбрано именно это.

Высказанное замечание не затрагивает принципиальных положений работы и не влияет на общую исключительно положительную оценку диссертации.

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 ($X = Mg, Ca; A = F, Cl, Br, I$) 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.

Кандидат физико-математических наук,
доцент кафедры физики
ФГБОУ ВО РГАУ-МСХА
им. К.А. Тимирязева



Маринова Софья Андреевна

Адрес: 127434, г. Москва,
ул. Тимирязевская, д. 49.

Контактный телефон: +7-913-437-26-62
e-mail: marinova@rgau-msha.ru

