

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Фатеева Сергея Анатольевича

«Низкоразмерные перовскитоподобные галогеноп्लомбаты с компактными органическими катионами: ключевые кристаллохимические особенности и оптические свойства» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.21 - «Химия твердого тела»

Диссертация Фатеева Сергея Анатольевича посвящена актуальной теме - теоретическому анализу и экспериментальному определению структурных особенностей перовскитоподобных галогеноп्लомбатов с целевыми оптическими свойствами.

Большое структурное разнообразие гибридных галогеноп्लомбатов обуславливают широкий диапазон их оптоэлектронных свойств, что открывает возможности дизайна новых полупроводниковых материалов с заданными характеристиками и существенно расширяет области их практического использования в различных фотоэлектрических, светоизлучающих и детектирующих устройствах. Однако для направленного синтеза соединений с заданными свойствами требуется выявление фундаментальных корреляций состав-структура-свойства. Для решения этих задач в работе разработан комплексный подход, основанный на теоретическом анализе кристаллических структур перовскитоподобных галогеноп्लомбатов с использованием новых структурных дескрипторов, синтезе и рентгеноструктурном анализе монокристаллов перовскитоподобных галогеноп्लомбатов с компактными органическими катионами, квантово-химическом моделировании их зонной структуры и экспериментальном исследовании фотофизических характеристик.

Использование такого комплексного подхода обуславливает достоверность сделанных выводов работы. Положения выносимые на защиту представляется обоснованными, а полученные результаты представляют безусловный практический интерес для специалистов в области неорганической химии и химии твердого тела. Актуальность и достоверность работы подтверждается тем, что ее результаты опубликованы в четырех статьях в ведущем научном журнале Chemistry of Materials.

К автореферату имеются следующие замечания:

1. Автор сообщает (стр. 14-15) о выделении трех полиморфных модификаций FA_2PbBr_4 , различающихся симметрией и параметрами кристаллической решетки, а также имеющих различную плотность. По сопоставлению расчетной «рентгеновской» плотности делается вывод об относительной стабильности полиморфов. Однако, в таблице 1 данные по расчетной плотности, параметрам элементарной ячейки и числу формульных единиц (Z) не соответствуют друг другу. Так для фазы m- FA_2PbBr_4 объем ячейки указан $1271.7\text{\AA}^3$, однако исходя из указанных параметров a, b, c, α , β , γ объем ячейки составляет $1235\text{\AA}^3$. Кроме того,

число Z формульных единиц FA_2PbBr_4 для фаз t -, m - и γ - для указанных плотностей должно составлять 4, 4 и 12 соответственно, в то время как в таблице 1 указано $Z = 2, 4$ и 4 .

2. В тексте автореферата значительное внимание уделяется результатам расчета зонной структуры соединений методом DFT (рис. 8 и 14), однако описание методики DFT моделирования и обоснованности ее применения в автореферате отсутствуют. В полном тексте диссертации имеется методический раздел «**3.3.4. Расчёты электронной структуры методом функционала плотности (DFT)**» который состоит всего из 4 строк буквально:

«Для расчета электронной структуры исследованных соединений использовали модуль DMol3 из программного пакета Materials Studio [99], [100]. В этой программе метод DFT реализован на базе атомных функций. Электронная структура для большинства соединений рассчитывалась с использованием базиса DNP+ с учётом спин-орбитального взаимодействия. » Столь краткое изложение методики выполнения расчетов не дает возможности судить о корректности их проведения. В частности остается неясным достаточен ли базисный набор DNP+. Для результатов расчетов зонной структуры и плотности состояний в автореферате и тексте диссертации не указан функционал плотности.

Высказанные замечания не умаляют ценности представленной работы. По актуальности, новизне и обоснованности выводов диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова к диссертационным работам. Содержание автореферата соответствует паспорту специальности 02.00.21- «Химия твердого тела» по химическим наукам, а также критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, а также оформлена в соответствии с приложениями №5, 6 Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова. Таким образом, соискатель Фатеев Сергей Анатольевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.21 - «Химия твердого тела».

Старший научный сотрудник кафедры неорганической химии,
Химического факультета МГУ имени М.В.Ломоносова
кандидат химических наук
Цымбаренко Дмитрий Михайлович