

Отзыв на автореферат диссертации Попова Ильи Сергеевича на тему  
«Влияние дефектов на полиморфизм и электронные свойства бинарных сульфидов и оксидов металлов»,  
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия (химические науки)

Возможность регулирования свойств материалов варьированием состава на атомарном уровне находится в центре внимания современной науки. В решении этой задачи существенное место занимает молекулярное моделирование. Поставленные в рассматриваемой диссертационной работе задачи и примененные методы их решения, безусловно, современны, что доказывает ее актуальность.

В работе получены данные, восполняющие, в ряде случаев пробелы в экспериментальных и модельных исследованиях. Их обобщение, наряду с данными других исследований, способствует установлению общих закономерностей в области физической химии наночастиц.

Практическая значимость данной работы, как и любого исследования в области моделирования, состоит в сокращении цикла реального лабораторного эксперимента, прогнозирования и понимания его результатов.

Полученные результаты достоверны, большая часть их получена автором впервые. Материал в автореферате изложен грамотно и лаконично.

Диссертация соответствует специальности 1.4.4. Физическая химия (химические науки).

Несмотря на отмеченные выше положительные стороны работы, по содержанию автореферата имеется ряд вопросов и замечаний, которые связаны, в основном, с тем, что в автореферате практически не освещены вопросы методики.

1. Нет обоснования выбора объектов исследования. На первый взгляд, он не является систематичным.

2. Расчетные программы, на которые ссылается автор, наверное, предполагают некоторые выборы вариантов расчета, которые могут влиять на результаты. Так ли это? Если да, то как данная особенность учитывалась?

3. Какой функционал или функционалы использованы в методах DFT и DFTB?

4. Как задавалась исходная (до самосогласования) электронная плотность?

5. Учитывались ли все электроны или только валентные (другими словами, какой базис применен)?

6. Что означает полная оптимизация геометрии? Могла ли меняться при оптимизации координация атомов? После введения вакансий проводилась ли снова оптимизация и могли ли при этом вакансии менять свое положение в подрешетке? Как проверялось сохранение решетки и подрешеток после оптимизации?

7. Обнаруживают ли «при более детальных расчетах методом DFTB» предсказываемое теорией кристаллического поля изменение типа расщепления  $d$  – уровней атомов титана. Если это имеет место быть, то кривая плотности электронных состояний должна измениться качественно.

Надеемся, что в диссертации этим вопросам уделено должное внимание, и они будут сняты.

Считаем, что диссертационная работа «Влияние дефектов на полиморфизм и электронные свойства бинарных сульфидов и оксидов металлов» представляет собой

