

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Кирсанова Алексея Юрьевича «Имитационное моделирование процесса гидрохимического осаждения плёнок твёрдых растворов халькогенидов металлов», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Создание научных основ синтеза тонких плёнок халькогенидов металлов и их твёрдых растворов с нужными структурой, составом, морфологией, воспроизводимым набором электрофизических свойств является одной из важных проблем физической химии коллоидных растворов труднорастворимых халькогенидов р-, d-металлов как в теоретическом, так и в прикладном аспектах. Её постановка актуальна, а решение будет способствовать созданию новых, более эффективных материалов, - сенсоров, преобразователей света для энергетики, металлургии, радиоэлектроники, экологии.

Диссертант выбрал метод имитационного моделирования для достижения целей своего исследования – создания имитационных моделей гидрохимического роста плёнок твёрдых растворов двойных сульфидов и селенидов металлов и синтеза исследуемых объектов для подтверждения адекватности моделей. Согласно принятому подходу, изучаемая гидрохимическая система заменена моделью (уравнение коагуляции М.Смолуховского), требование к которой единственное: она должна с остаточной точностью описывающей реальную систему. Выбранное уравнение является частным случаем уравнения плотности распределения вероятностей Фоккера–Планка, детально проанализированного в отношении механизмов кристаллизации в работах И.Мелихова (*И.В. Мелихов. Физико-химическая эволюция твердого вещества. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2006. 309с. ISBN 5-94774-338-8*). Основным субъектом моделирования уравнениями Фоккера–Планка являются эмпирические, или модельные функции распределения растущих частиц по размерам в процессе роста зерна, плёнки, кристалла. Диссертант впервые выполнил имитационное моделирование роста неравновесных кристаллов на начальных стадиях с помощью численного решения уравнения М.Смолуховского в программе VASP. Достоинством диссертационной работы является продемонстрированное великолепное для теоретического метода согласие результатов определения элементного состава неравновесных плёнок в системах CdS-PbS, Ag<sub>2</sub>S- PbS, SnS-PbS с расчётом по модели (различие с расчётом по составу – не более 10-15 отн. %!). Все задачи диссертационного исследования выполнены, опубликованы в рецензируемых периодических изданиях и осуждались на конференциях. Недостатком автореферата является

отсутствие каких-либо сведений об алгоритмах вычислений и электронной структуре растущих кристаллов, полученных с помощью программы VASP.

Вопросы: 1 – сравнение результатов расчёта и эксперимента дано автором для кристаллических частиц сульфидов, например, табл.1, с.13 автореферата. Являясь крайне неравновесными твёрдыми растворами, микрочастицы плёнки могут не создавать периодических структур; есть ли данные локального (желательно, с разрешением 10-100 нм) элементного анализа плёнок, подтверждающие выводы рентгенофазового анализа? 2. По словам диссертанта, система CdS-PbS образует крайне ограниченную область твёрдых растворов. Каковы, если получены, расчётные эффективные заряды атомов в плёнках твёрдых растворов с содержанием до 20% CdS, являются для эти плёнки полупроводниками, их оптическая ширина щели?

Работа выполнена на современном экспериментальном уровне, сочетает применение физико-химических методов анализа с элементами компьютерного моделирования гетерогенных равновесий.

Считаю, что работа Кирсанова Алексея Юрьевича «Имитационное моделирование процесса гидрохимического осаждения плёнок твёрдых растворов халькогенидов металлов», соответствует шифру и наименованию специальности по паспорту ВАК – 02.00.04, физическая химия, представляемой отрасли науки и отвечает требованиям п.9 «Положения о присуждении учёных степеней» (Постановление Правительства Российской Федерации от 24.09.2013, №842) как научно-квалификационная работа, содержащая решение задачи, имеющие существенное значение для развития физико-математических основ физической химии. Её автор Кирсанов Алексей Юрьевич заслуживает присуждения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по 02.00.04 – физическая химия, физико-математические науки.

Заведующий лабораторией  
физико-химических методов анализа  
ФГБУН Института химии твёрдого тела УрО  
РАН, доктор химических наук

Поляков Евгений  
Валентинович

«21» ноября 2016 г.

Подпись Е.В. Полякова заверяю,  
Учёный секретарь ИХТТ УрО РАН,  
доктор химических  
наук

Денисова Татьяна Александровна

Адрес организации: 620990, Екатеринбург, улица Первомайская, дом 91,  
телефон 8(343) 374-48-14, [polyakov@ihim.uran.ru](mailto:polyakov@ihim.uran.ru)