

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Курмангалеева Кайрата Сансыбаевича на тему: «Моделирование электронной структуры и сенсорных свойств наноструктурированных смешанных оксидов», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Работа Курмангалеева Кайрата Сансыбаевича посвящена описанию сенсорного эффекта в одно- и двухкомпонентных наноразмерных системах на основе распределения электронной плотности в полупроводниковых наночастицах. Заметная часть работы связана с расчетами параметров физико-химических процессов на поверхности наночастиц. Так, в рамках теории функционала плотности рассчитаны адсорбционные характеристики и частоты валентных колебаний атомов в адсорбированной молекуле кислорода на поверхности оксида индия (011). Также показано, что введение в модель механизма перетекания атомов кислорода, обусловленного присутствием на поверхности наночастиц  $\text{In}_2\text{O}_3$  мелких нанокластеров  $\text{CeO}_2$ , приводит к увеличению сенсорного отклика и смещению его в область меньших температур.

Автореферат диссертации написан со знанием предмета, прослеживается последовательность и логичность изложения, иллюстративный материал способствует пониманию полученных результатов, однако, при чтении возникли некоторые вопросы и замечания:

1. Важную роль в сенсорных процессах на оксидных поверхностях играют дефекты, например, кислородные вакансии. Полезно было бы рассмотреть вакансии в разных зарядовых состояниях. Такое рассмотрение позволило бы рассчитать энергию перехода между различными зарядовыми состояниями кислородного дефекта.
2. При рабочих температурах сенсора в области 350 °С на поверхности наноструктур имеется адсорбат в виде заряженной формы кислорода  $\text{O}^-$ . Есть ли какие-нибудь соображения, как устроить такую адсорбированную форму на модельной поверхности, чтобы можно было изучить реакцию  $\text{O}^-$  с  $\text{H}_2$ , например, вычислить энергию активации.

Приведенные замечания не снижают высокую оценку работы. Материал, содержащийся в автореферате, свидетельствует о достоверности выводов, сделанных в работе. Работы по диссертации опубликованы в авторитетных научных журналах из списка ВАК РФ. Она прошла хорошую апробацию на представительных научных конференциях. Автореферат достаточно полно отражает содержание диссертации. Работа Курмангалеева

К.С. по актуальности темы, новизне, научно-практической значимости полученных результатов и достоверности выводов удовлетворяет требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, несомненно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 — химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Должность - Ведущий научный сотрудник

Лаборатория - структурной химии.

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН.

Д.х.н., профессор



*Bohenko*

К.В. Боженко

Собственноручную подпись

Сотрудника

Удостоверяю

Сотрудник

Канцелярии

*Боженко К.В.*

*[Signature]*

31.10.2022 года

Адрес: 142432 Черноголовка Московской обл. Проспект академика Н.Н. Семенова, 1, ФИЦ ПХФ и МХ РАН.

Тел.: 8(916) 073 74 35

E-mail: [bogenko@icp.ac.ru](mailto:bogenko@icp.ac.ru).