

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

Вопрос о повышении чувствительности газовых сенсоров, является актуальным, поскольку в совершенно различных областях как научной, так и производственной деятельности постоянно возникает необходимость в устройствах, которые могли бы сигнализировать об изменении в составе окружающей среды. Для создания новых чувствительных слоев, требуется разработка модели, описывающей процесс формирования сенсорного сигнала в смешанных оксидах, чему и посвящена диссертация Курмангалеева К. С. Помимо описания сенсорного отклика наносистем, полученная модель также может быть использована при исследовании фотоэлектрических, магнитных, каталитических и других свойств нанокмпозитов. Построение модели потребовало нахождения распределения электронной плотности в полупроводниковых наночастицах, проведения квантово-химических расчетов, а также решения кинетических уравнений.

Одним из основных результатов диссертации является то, что в двухкомпонентной наноразмерной системе $\text{CeO}_2\text{-In}_2\text{O}_3$ перетекание атомов кислорода с нанокластеров CeO_2 на наночастицы In_2O_3 приводит к сдвигу максимума сенсорной кривой в область низких температур и значительному увеличению сенсорного эффекта по отношению к однокомпонентной системе In_2O_3 . В работе демонстрируется хорошее согласие теории и экспериментальных данных.

Автореферат диссертации хорошо иллюстрирован и грамотно изложен, однако, несмотря на высокий уровень работы имеется несколько пожеланий, учет которых на наш взгляд мог бы ее улучшить:

1. Представляло бы интерес исследование изменения хемосорбционных свойств поверхности In_2O_3 по отношению к кислороду в присутствии другого газа.

2. Имеется вопрос: эксперимент (например, на рис. 11) был сделан до или после теории? Чтобы оценить практическую значимость теоретической работы, надо знать, объяснила она известные из литературы данные или предсказала новые эффекты.

Указанные замечания не снижают высокой оценки диссертационной работы. Считаю, что автореферат полностью отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Автор диссертации Курмангалеев К. С. заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

д.ф.-м.н., профессор

Д.А. Шапиро

Заведующий Лабораторией фотоники Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт автоматики и электротехники Сибирского отделения Российской академии наук

630090, г. Новосибирск, проспект Академика Коптюга, д.1, ИАиЭ СО РАН,
тел. +7(383)3309021, e-mail: shapdavid@gmail.com

Подпись д.ф.-м.н. Д.А. Шапиро *з а в е р я ю*:

Ученый секретарь ИАиЭ СО РАН

к.ф.-м.н.



Е.И. Донцова

7 ноября 2022 г.