

## Отзыв

на автореферат диссертации Коротаяева Евгения Владимировича

«Рентгеноспектральные и рентгеноэлектронные исследования электронного строения слоистых дисульфидов меди-хрома  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ », представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

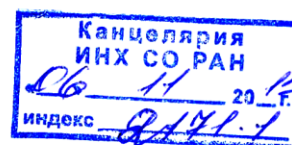
Диссертационная работа Коротаяева Е.В. посвящена комплексному исследованию слоистых катионзамещенных тройных дисульфидов  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$  ( $x=0,05-0,40$ ) с помощью комплекса методов: рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, рентгеновской эмиссионной спектроскопии, рентгеновской абсорбционной спектроскопии, а также методов квантовой химии.

Катионзамещенные слоистые дисульфиды  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$  в настоящее время рассматриваются в качестве одного из перспективных классов материалов для современной электроники. Ионный перенос катионов меди, наблюдаемый в данных соединениях, позволяет их рассматривать в качестве материалов для твердотельных источников тока, ион-селективных мембран, химических сенсоров; магнитные свойства дисульфидов  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$  могут быть использованы для создания спиновых вентилях, спиновых фильтров, магнитной памяти; термоэлектрические свойства данных соединений открывают перспективы их использования в высокоэффективных термоэлектрических преобразователях энергии.

Проведенные в диссертационной работе исследования позволили получить важную информацию о дисульфидах меди-хрома  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ :

- исследовать характер распределения электронной плотности в объеме и на поверхности образцов  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ ;
- определить характер расположения атомов меди и ванадия в кристаллической решетке дисульфидов  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ ;
- изучить особенности потолка валентной зоны и дна зоны проводимости  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ ;
- показать влияние характера расположения атомов меди в  $\alpha$ -тетраэдрических и о-октаэдрических позициях межслоевых промежутков на электронное строение  $\text{CuCrS}_2$ .

В качестве наиболее значимых результатов можно указать:



Энергетическая привязка спектров эмиссии и поглощения для  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$  ( $x=0\div 0,40$ ), а также теоретические DFT-расчеты позволили установить, что свободные  $d$ -состояния хрома у дна зоны проводимости замещаются  $d$ -состояниями ванадия. Показано, что увеличивается общий вклад занятых  $d$ -состояний в области потолка валентной зоны  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ , а также свидетельствует о том, что при катионном замещении атомов хрома  $d$ -состояния ванадия вносят существенный вклад в электропроводность соединений  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ .

Квантово-химические расчеты, осуществленные методом DFT (программный пакет ADF 2013, модуль BAND) показали, что расположение атомов меди в  $\alpha$ -тетраэдрических позициях межслоевых промежутков приводит к наличию щели между занятыми и свободными состояниями (0,29 эВ) и дисульфид меди-хрома  $\text{CuCrS}_2$  имеет полупроводниковый характер проводимости. Расположение атомов меди в  $o$ -октаэдрических позициях приводит к отсутствию щели между занятыми и свободными состояниями и к металлическому характеру проводимости  $\text{CuCrS}_2$ .

Полученные в диссертационной работе результаты имеют важное значение для понимания свойств дисульфидов  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$  и использования данных соединений в качестве функциональных материалов современной электроники. Диссертационная работа Коротаева Е.В. имеет существенные предпосылки для практического применения.

Считаю, что диссертационная работа Коротаева Е.В. удовлетворяет требованиям предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, представляемым на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Доктор технических наук,  
Профессор,  
Профессор кафедры  
Полупроводниковых приборов  
и микроэлектроники  
Новосибирского  
государственного технического университета,  
630073, г. Новосибирск,  
пр-т К. Маркса, 20;  
Тел. +7 (383) 346 0877  
e-mail: [v.gridchin@amber.ref.nstu.ru](mailto:v.gridchin@amber.ref.nstu.ru)  
29 октября 2015 г.

Гридчин Виктор Алексеевич

Подпись Гридчина В.А. заверяю  
Начальник отдела кадров НГТУ

Пустовалова О.К.

