

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

экспертной комиссии диссертационного совета 24.1.086.01 на базе ИНХ СО РАН по диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук Сыроквашина Михаила Михайловича «Рентгеноспектральное исследование электронной структуры твердых растворов моносulfида марганца  $\text{Ln}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$  ( $\text{Ln} = \text{Dy}, \text{Tm}, \text{Yb}$ )»

Комиссия диссертационного совета 24.1.086.01 на базе ФГБУН Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН в составе: председателя — доктора физико-математических наук **Козловой Светланы Геннадьевны**, членов комиссии — доктора физико-математических наук **Надолинного Владимира Акимовича** и доктора физико-математических наук **Окотруба Александра Владимировича**, в соответствии с п. 31 Положения о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук", утвержденного приказом Минобрнауки России от 10 ноября 2017 г. № 1093 (в ред. от 07.06.2021 г.), на основании ознакомления с диссертацией на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук **Сыроквашина Михаила Михайловича** и состоявшегося обсуждения приняла следующее заключение:

1. Соискатель ученой степени кандидата физико-математических наук соответствует требованиям пп. 2-4 Положения о порядке присуждения ученых степеней (утв. Постановлением Правительства России от 24.02.2013 г. №842 в ред. от 20.03.2021 г.), необходимым для допуска его диссертации к защите.
2. Диссертация на тему «Рентгеноспектральное исследование электронной структуры твердых растворов моносulfида марганца  $\text{Ln}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$  ( $\text{Ln} = \text{Dy}, \text{Tm}, \text{Yb}$ )» в полной мере соответствует специальности 1.4.4. Физическая химия, к защите по которой представлена работа.
3. Основные положения и выводы диссертационного исследования Сыроквашина Михаила Михайловича отражены в 4 статьях, опубликованных в российских и международных журналах, которые входят в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук и индексируемых в международных информационно-библиографических системах Web of Science и Scopus и в 8 тезисах докладов на российских и зарубежных научных конференциях. Представленные соискателем сведения об опубликованных им работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, достоверны.
4. Оригинальность диссертации составляет не менее 87 % от общего объема; цитирование оформлено корректно по всему тексту; заимствованного материала, использованного в диссертации без ссылки на автора, либо источник заимствования, не обнаружено; научных работ, выполненных соискателем ученой степени в соавторстве, без ссылок на соавторов, не выявлено.
5. В диссертации представлены результаты экспериментального и теоретического исследования особенностей электронного и пространственного строения  $\text{Ln}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$  ( $\text{Ln}=\text{Dy}$ ,



Tm, Yb;  $x=0; 0.01; 0.05$ ), и их связи с термоэлектрическими свойствами этих соединений. В работе изучено распределение электронной плотности, локализованной на атомах в объеме и на поверхности твердых растворов  $\text{Ln}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ . Показано, что при катионном замещении в исходной MnS-матрице характер локального окружения атомов не меняется. Определено зарядовое состояние атомов металлов и серы в  $\text{Ln}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ . Проведены квантово-химические расчеты полной и парциальных плотностей состояний в валентной зоне и зоне проводимости. Показано, что катионное замещение приводит к резким изменениям как в значениях, так и характере температурных зависимостей коэффициента Зеебека относительно исходной MnS-матрицы, что обусловлено присутствием вкладов  $f$ -состояний лантаноидов при формировании электронной структуры твердых растворов  $\text{Ln}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ . Установлено, что подобие характеров температурных зависимостей коэффициента Зеебека для  $\text{Ln}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$  ( $\text{Ln} = \text{Tm}, \text{Yb}$ ) и их отличие от соответствующих зависимостей для  $\text{Dy}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$  обусловлено особенностями распределения  $f$ -состояний лантаноидов в валентной зоне и зоне проводимости.

**Комиссия рекомендует:**

1. Принять к защите на диссертационном совете 24.1.086.01 на базе ИНХ СО РАН диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук Сыроквашина Михаила Михайловича «Рентгеноспектральное исследование электронной структуры твердых растворов моносulfида марганца  $\text{Ln}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$  ( $\text{Ln} = \text{Dy}, \text{Tm}, \text{Yb}$ )».

2. Утвердить официальными оппонентами:

– **Зубавичуса Яна Витаутасовича**, доктора физико-математических наук, заместителя директора по науке, Центр коллективного пользования "Сибирский кольцевой источник фотонов" ФГБУН "Федеральный исследовательский центр "Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук" (ЦКП "СКИФ"), г. Новосибирск;

– **Михлина Юрия Леонидовича**, доктора химических наук, главного научного сотрудника ФГБУН "Федеральный исследовательский центр "Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук", Институт химии и химической технологии Сибирского отделения Российской академии наук (ИХХТ СО РАН) – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, г. Красноярск.


3. Утвердить в качестве ведущей организации **ФГБУН Институт химии твёрдого тела и механохимии Сибирского отделения Российской академии наук (ИХТТМ СО РАН)**, г. Новосибирск.

 д.ф.-м.н. Козлова Светлана Геннадьевна

 д.ф.-м.н. Надолинный Владимир Акимович

д.ф.-м.н., профессор Окотруб Александр Владимирович



  
Ученый секретарь ИНХ СО РАН  
16 " 05 2022 г.