ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Мазурина Максима Олеговича «Синтез, структура и термодинамика органо-неорганических перовскитоподобных галогенидов», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Представленная диссертационная работа Мазурина Максима Олеговича посвящена рассмотрению вопросов термодинамической устойчивости систем перовскитоподобных галогенидов. Тема работы является, безусловно, **актуальной**, поскольку вещества данного класса в целом активно исследуются как перспективные фотовольтаические материалы, но имеющие ряд проблем, связанных с деградацией веществ в условиях эксплуатации потенциальных устройств. В работе представлен достаточно обширный массив экспериментальных термодинамических данных, а именно стандартные термодинамические функции (энтальпии, энтропии, энергии Гиббса) образования галогенидов состава $CsPbX_3$ (X = Cl, Br, I), температуры и энтальпии фазовых переходов в твердых растворах $CsPb(Cl_{1-x}Br_x)_3$, функции смешения для твердых растворов $CsPb(Cl_{1-x}Br_x)_3$ и $CH_3NH_3Pb(Cl_{1-x}Br_x)_3$. **Достоверность** представленных данных подтверждена комплексностью подходов к их получению, а также всесторонним анализом и рассмотрением различных термодинамических и структурных характеристик не отдельно, а в их взаимосвязи. Результаты данной работы обладают **теоретической и практической значимостью**: прежде всего, представленный массив термодинамических данных может быть в дальнейшем использован исследователями как справочный материал для различных электронных баз данных, а также для проведения термодинамических расчетов и оценок устойчивости исследованных маптериалов в заданных внешних условиях. С другой же стороны, обнаруженные и представленные закономерности изменения структурных и термодинамических характеристик могут быть полезны для развития теоретических представлений о свойствах твердых растворов перовскитоподобных галогенидов в целом.

Объем представленной работы достаточно большой — 196 страниц текста, автореферат и основной текст работы написаны грамотным научным языком. Апробация работы прошла на нескольких российских конференциях, по результатам исследований было выпущено 5 статей в научных журналах, индексируемых в международных наукометрических базах данных WoS и Scopus.

По диссертационной работе и автореферату возникли следующие вопросы и замечания:

1. Из автореферата не совсем понятно, как определяли стандартную энтропию отдельных фаз. На стр. 15 в тексте " Стандартная энтропия кубической фазы $CsPbCl_3$ была рассчитана на основе полученного значения (какого?) и энтропии суммарного фазового перехода $Pnma \rightarrow Pm3m$, рассчитанного по данным (каким?) дифференциальной сканирующей калориметрии". Если речь идет о тепловом потоке, то он напрямую зависит

от теплоемкости образца. Но в автореферате нет данных по теплоемкости, хотя говорится о использовании дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК). Из этого возникают вопросы - как рассчитывалась энтропия образования отдельных фаз с помощью ДСК? Почему нет данных по теплоемкости образцов?

2. На стр. 17 представлены возможные реакции (11 шт.) деградации перовскитоподобных галогенидов ряда $CsPbX_3$. На основе этих реакций " в ручном режиме" рассчитывались стандартные энергии Гиббса. В настоящее время в широком доступе существуют различные термодинамические программы: HSC, Terra, FactSage, Thermo-Calc и т.д., которые уже не одно десятилетие широко применяются в мире, в том числе и в УрФУ. Эти программы имеют огромные базы данных по термодинамическим свойствам различных соединений. Их можно дополнить или уточнить полученными результатами данной работы и достаточно точно, быстро, продуктивно рассчитать термодинамику твердых растворов, а также процессы образования, деградации исследуемых объектов. В представленной работе по термодинамике применение указанных комплексов было бы очень логичным для сравнения эксперимента и расчета. Вопрос - почему это не было сделано?

Указанные замечания не снижают ценности и значимости выполненных исследований. Данную работу оцениваю положительно, содержание диссертации **соответствует заявленной специальности 1.4.4. Физическая химия.** Представленную к защите диссертацию «Синтез, структура и термодинамика органо-неорганических перовскитоподобных галогенидов» можно считать законченной научно-квалификационной работой, что **соответствует п.9 «Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ»**. Автор диссертационной работы, Мазурин Максим Олегович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Кандидат химических наук,
старший научный
сотрудник лаборатории
неупорядоченных систем
Института металлургии
УрО РАН Куликова Татьяна Владимировна

Дата: 10.06.2024

Почтовый адрес:
620016 г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 101.
Тел.: +7-908-910-1000,
эл. почта: kuliko@gmail.com

Подпись старшего научного сотрудника, к.х.н. Куликовой Татьяны Владимировны подтверждаю

Ученый секретарь ИМЕТ УрО РАН, к.х.н. Котенков П.В.