

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Скорб Екатерины Владимировны на диссертацию Баланова Михаила Ивановича на тему «Структурные, электронные и оптические свойства гибридных соединений на основе галогенидов свинца и гомологического ряда предельных диаминов вида $[H_3N-(CH_2)_n-NH_3]PbX_4$ ($n=4-8$, $X=Cl, Br, I$)», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Диссертация посвящена исследованию низкоразмерных гибридных перовскитов, которые являются перспективными материалами для фотоники и фотовольтаики. Умение управлять формированием структуры данных материалов и, как следствие, возможность задавать необходимые оптические и электронные характеристики определяют актуальность данной работы, в которой исследуется влияние размера органического катиона в зависимости от типа галогенид-иона на структурные, электронные и оптические свойства гибридных кристаллов вида $[H_3N-(CH_2)_n-NH_3]PbX_4$ ($n=4-8$, $X=Cl, Br, I$). В отличие от других исследований, где в качестве набора органических катионов используют разнообразные амины, в данной работе широкий гомологический ряд линейных диаминов подобран в строгом соответствии увеличению длины углеродного скелета на CH_2 -группу, что определяет более системный исследовательский подход в этом вопросе.

В результате данной работы среди исследуемых 15-ти гибридных кристаллов вида $[H_3N-(CH_2)_n-NH_3]PbX_4$ ($n=4-8$, $X=Cl, Br, I$) были получены 5 новых соединений, для которых была описана кристаллическая структура. Для всех 15-ти гибридных кристаллов были описаны и проанализированы закономерности люминесцентных свойств в зависимости от их анионного и катионного состава, а также определены фазовые переходы. Среди полученных результатов можно отметить выявленный эффект четности углеродного скелета органического катиона, влияющий на структурные свойства полученных кристаллов. Данный эффект определяет размерность неорганической подсистемы у иодидных кристаллов, а также определяет смещение неорганических октаэдров в разных слоях двумерных кристаллов. Также важно отметить, что размер органического катиона и тип галогенид-иона определяют наличие или отсутствие широкополосной и узкополосной люминесценции, и их соотношение интенсивностей. Всё это определяет новизну данной работы, а также практическую значимость при использовании полученных данных для создания новых материалов с заданными структурными и оптическими свойствами.

Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения и библиографического списка. Работа содержит 120 страниц. Библиографический список содержит 60 наименований. В

PK №33-06-1216 от 10.12.2024

главе 1 представлен обзор литературных источников, относящихся к теме диссертационной работы и затрагивающих изучение структурных, оптических и электронных свойств гибридных перовскитов. В главе 2 приводится описание способов получения гибридных кристаллов и методов их физико-химической характеристики. В главе 3 представлены основные результаты исследования полученных гибридных кристаллов, в частности представлены визуализированные данные рентгеноструктурного анализа ранее не описанных кристаллов, анализ зависимости структуры от длины органической цепи и галогена, квантовохимические расчеты, спектры диффузного отражения с определенными ширинами запрещенных зон, низкотемпературные спектры эмиссии и возбуждения люминесценции, данные РФЭС, фазовые переходы.

Результаты диссертационной работы полностью отражены в опубликованных трех статьях научных журналах (Q1), индексируемой базами данных Scopus и Web of Science.

В диссертации представлен большой объем исследований, выполненных с применением современных инструментальных методов (порошковая рентгеновская дифракция, рентгеноструктурный анализ, спектроскопия диффузного отражения, спектрофлуориметрия, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, дифференциальная сканирующая калориметрия), что убедительно подтверждает достоверность результатов.

Вопросы и замечания:

- На рисунке 29 представлены зависимости расстояния между неорганическими слоями от количества мономеров в органическом катионе, насколько возможно аппроксимировать данные графики на большее число CH_2 групп, на соединения фтора?

- Фторидные соединения могут вести себя иначе, чем хлоридные, бромидные и иодидные, из-за меньшего размера атома фтора и его способности образовывать более прочные связи с катионами. Следовательно, поведение фторидных соединений может отличаться от поведения других галогенидных соединений. Однако рассмотрения ряда галогенов без упоминания фторидов, всегда остается неполным. Почему не рассматривалось ни одного фторидного соединения? В чем сложность предсказания поведения фторидных соединений?

- Насколько корректно строить линейную корреляцию при широком разбросе точек, например, как на рисунке 32? Возможно ли использование других корреляционных функций?

- На рисунке 49 для образца $(\text{C}_n)\text{DAPbI}_4$ есть эффект четного и нечетного количества атомов углерода, поясните более четко, когда такое стоит ожидать и возможно ли аппроксимировать данные особенности на другие системы?

- Какие практические результаты были получены в ходе вашего исследования? Возможно ли использовать предложенные методы для создания новых гибридных кристаллов с заданными структурными и оптическими свойствами?

Диссертация Баланова Михаила Ивановича на тему «Структурные, электронные и оптические свойства гибридных соединений на основе галогенидов свинца и гомологического ряда предельных диаминов вида $[N_3N-(CH_2)_n-NH_3]PbX_4$ ($n=4-8$, $X=Cl, Br, I$)» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Баланов Михаил Иванович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния. Пункты 9 и 11 указанного Порядка диссертантом не нарушены.

Член диссертационного совета

Доктор химических наук, профессор,
директор НОЦ инфохимии
ФГАОУ ВО «Национальный
исследовательский университет
ИТМО»

Скорб Екатерина Владимировна

Дата: 9 декабря 2024

Подпись
удостоверяю
Менеджер ОПС
Виноградова А.Д.

Скорб