



О Т З Ы В

на автореферат диссертации Верченко Валерия Юрьевича

“СИНТЕЗ, КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛЯРНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА”,

представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук.

Специальность 02.00.21 – химия твердого тела

Диссертационная работа Верченко В. Ю. посвящена синтезу ряда полярных железосодержащих интерметаллических соединений и исследованию их кристаллической и электронной структуры и проводящих и магнитных свойств. В настоящее время подобные системы привлекают значительное внимание как перспективные материалы для термоэлектрических и магнетокалорических технологий охлаждения. Следовательно, можно утверждать, что тематика диссертационной работы Верченко В. Ю. отличается новизной и актуальностью.

Целью работы являлся синтез полярных интерметаллидов на основе железа с преимущественным вкладом *d-p* и *p-p* взаимодействий в электронной структуре, а также твердых растворов на их основе, и исследование их кристаллической и электронной структуры и физических свойств.

Из полученных результатов, наиболее значительными являются следующие:

- 1) Проведено подробное исследование твердых растворов между изоструктурными интерметаллидами FeGa_3 и CoGa_3 , которые являются, соответственно, диамагнитным узкозонным полупроводником и металлическим Паули парамагнетиком. Показано, что между этими соединениями образуется непрерывный ряд твердых растворов. Путем оптимизации условий высокотемпературного синтеза в расплаве галлия получены относительно большие монокристаллы $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ga}_3$.
- 2) Методом ядерного квадрупольного резонанса установлено, что локальная структура твердого раствора $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ga}_3$ характеризуется нестатическим распределением атомов железа и кобальта, ведущим к преимущественному образованию гомоядерных взаимодействий Fe-Fe и Co-Co. С помощью квантово-химических расчетов сделано предположение, что именно эти взаимодействия приводят к подавлению зонного магнетизма в $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ga}_3$.
- 3) Установлено, что с увеличением содержания кобальта в $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ga}_3$ происходит переход от полупроводникового к металлическому состоянию, с возможным возникновением зонного антиферромагнетизма при $0.075 \leq x < 0.75$. Следует особо отметить, что наблюдаемые изменения в физических свойства подкреплены анализом электронной структуры путем квантово-химических расчетов.

- 4) Показано, что термоэлектрические свойства $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ga}_3$ становятся оптимальными при $x = 0.05$, так как для этого состава реализуется наиболее оптимальное сочетание коэффициента Зеебека и электро- и теплопроводности.
- 5) Изучена область гомогенности соединения $\text{Fe}_{3-\delta}\text{GeTe}_2$. Установлено, что этот металл проявляет зонный ферромагнетизм с температурой упорядочения 225 К.
- 6) Определены магнетокалорические свойства и магнитная структура $\text{Fe}_{3-\delta}\text{GeTe}_2$. Показано, что материал проявляет значительную магнитокристаллическую анизотропию. Этот результат также обоснован квантово-химическими расчетами.
- 7) В результате систематического исследования ряда тройных систем обнаружены новые слоистые теллуриды $\text{Fe}_{3-\delta}\text{As}_{1-y}\text{Te}_2$ и $\text{Fe}_{4+\delta}\text{AsTe}_2$, причем последний является первым примером усложнения слоистой структуры теллуридов типа $\text{T}_{3-\delta}\text{ETe}_2$.
- 8) Методом порошковой нейтронографии установлено, что $\text{Fe}_{3-\delta}\text{As}_{1-y}\text{Te}_2$ и $\text{Fe}_{4+\delta}\text{AsTe}_2$ обладают сложной антиферромагнитной структурой.

Выполненная диссертационная работа четко и логично представлена в автореферате, чтение которого убеждает в целостности и последовательности проведенных исследований. Следует особо подчеркнуть широкий и разнообразный набор методов исследования, который демонстрирует стремление соискателя добиться понимания наблюдаемых свойств на фундаментальном уровне. Основные результаты работы опубликованы в таких влиятельных международных научных изданиях как *Physical Review B* и *Inorganic Chemistry*, что подтверждает высокое качество и актуальность полученных результатов.

Подытоживая все вышесказанное, работа Верченко В. Ю. выполнена на современном экспериментальном и теоретическом уровне и полностью отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а диссертант заслуживает присвоения ему ученой степени кандидата химических наук.

Профессор, к.х.н.

Шатрук М. М.



Факультет химии и биохимии
Университет штата Флорида
Таллахаси, США
(Department of Chemistry and Biochemistry
Florida State University,
Tallahassee, FL, United States)

3 сентября 2016 г.