

Заключение диссертационного совета МГУ.02.09
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

Решение диссертационного совета от «27» июня 2022 г. №110

О присуждении Фатееву Сергею Анатольевичу, гражданину РФ, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация *«Низкоразмерные перовскитоподобные галогенопльмбаты с компактными органическими катионами: ключевые кристаллохимические особенности и оптические свойства»* по специальности 02.00.21 – «химия твердого тела» принята к защите диссертационным советом 20.05.2022, протокол № 101.

Соискатель Фатеев Сергей Анатольевич, 01.02.1994 года рождения, в 2017 году окончил Химический факультет Санкт-Петербургского государственного университета и в том же году поступил в аспирантуру ФНМ МГУ, которую окончил в 2021 году. В настоящее время соискатель работает в должности научного сотрудника в Лаборатории новых материалов для солнечной энергетики Факультета наук о материалах, ФГБОУ ВО МГУ имени М.В. Ломоносова.

Диссертация выполнена в Лаборатории новых материалов для солнечной энергетики Факультета наук о материалах МГУ имени М.В. Ломоносова.

Научные руководители:

Тарасов Алексей Борисович – кандидат химических наук, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», факультет наук о материалах, заведующий лабораторией новых материалов для солнечной энергетики;

Гудилин Евгений Алексеевич – доктор химических наук, член-корреспондент РАН, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», факультет наук о материалах, заведующий кафедрой наноматериалов.

Официальные оппоненты:

Сергей Александрович Адонин – доктор химических наук, Институт неорганической химии имени А.В. Николаева Сибирского отделения РАН, лаборатория синтеза комплексных соединений, ведущий научный сотрудник;

Асланов Леонид Александрович - доктор химических наук, профессор, ФГБОУ ВО «МГУ имени М.В. Ломоносова», Химический факультет, Кафедра общей химии, НИЛ

структурной химии;

Тимошенко Виктор Юрьевич, - доктор физико-математических наук, профессор, ФГБОУ ВО «МГУ имени М.В. Ломоносова», физический факультет, отделение физики твердого тела, кафедра физики низких температур и сверхпроводимости дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 40 опубликованных работ в рецензируемых научных изданиях, в том числе по теме диссертации 4 работы, все из которых опубликованы, в рецензируемых научных изданиях первого квартиля (Q1), индексируемых Web of Science, Scopus, RSCI и рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальностям 02.00.21 – «Химия твердого тела». Соискатель является соавтором патента РФ по теме диссертации. Наиболее важные публикации:

- 1) Sergey A. Fateev, Andrey A. Petrov, Artem A. Ordinartsev, Aleksei Y. Grishko, Eugene A. Goodilin, Alexey B. Tarasov. Universal Strategy of 3D and 2D Hybrid Perovskite Single Crystals Growth via In Situ Solvent Conversion // *Chemistry of Materials*, 2020, 32, 22, pp. 9805-9812. DOI: 10.1021/acs.chemmater.0c04060. Импакт-фактор Web of Science – 9,6. (75%)
- 2) Ekaterina I. Marchenko, Vadim V. Korolev, Artem Mitrofanov, Sergey A. Fateev, Eugene A. Goodilin, Alexey B. Tarasov. Layer Shift Factor in Layered Hybrid Perovskites: Univocal Quantitative Descriptor of Composition–Structure–Property Relationships // *Chemistry of Materials*, 2021, 33, 4, pp. 1213-1217. DOI: 10.1021/acs.chemmater.0c03935. Импакт-фактор Web of Science – 9,6. (40%)
- 3) Ekaterina I. Marchenko, Vadim V. Korolev, Sergey A. Fateev, Artem Mitrofanov, Nikolay N. Eremin, Eugene A. Goodilin, Alexey B. Tarasov. Relationships between Distortions of Inorganic Framework and Band Gap of Layered Hybrid Halide Perovskites // *Chemistry of Materials*, 2021, 33, pp. 7518-7526. DOI: 10.1021/acs.chemmater.1c02467. Импакт-фактор Web of Science – 9,6. (33%)
- 4) Sergey A. Fateev, A. A. Petrov, E.I. Marchenko, Y. V. Zubavichus, V. N. Khrustalev, A.V. Petrov, S. M. Aksenov, E. A. Goodilin, A. B. Tarasov. FA₂PbBr₄: Synthesis, Structure, and Unusual Optical Properties of Two Polymorphs of Formamidinium-Based Layered (110) Hybrid Perovskite // *Chemistry of Materials*, 2021, 33, 5, pp. 1900-1907. DOI: 10.1021/acs.chemmater.1c00382. Импакт-фактор Web of Science – 9,6. (75%)

Патенты по теме работы:

Патент РФ «СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ ОРГАНО-НЕОРГАНИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСНОГО ГАЛОГЕНИДА», Авторы: Фатеев С. А., Тарасов А. Б., Петров А. А., Гудилин Е. А., Номер: 2730315, Дата публикации: 21 августа 2020 г.

На диссертацию и автореферат поступило 5 дополнительных отзывов от ведущих российских ученых в области кристаллохимии и химии твёрдого тела, все положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их многолетним опытом и признанным авторитетом в области кристаллохимии и синтеза металл-галогенидных комплексов и гибридных соединений, а также физики полупроводниковых систем пониженной размерности. В частности, С.А. Адонин имеет целый ряд публикаций, непосредственно

посвященных синтезу и структурным особенностям гибридных галогенометаллатов. Л.А. Асланов является признанным экспертом в области кристаллографии, а также кристаллохимии гибридных и слоистых структур. В.Ю. Тимошенко признанным экспертом в области физики полупроводниковых наноструктур и систем пониженной размерности.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата химических наук является научно-квалификационной работой¹, в которой на основании выполненных автором теоретического анализа выборок известных структур и экспериментального определения структурных и спектральных особенностей гибридных галогеноплюмбатов предложены новые структурные параметры и корреляции структура-свойство для кристаллохимического дизайна новых низкоразмерных перовскитоподобных галогеноплюмбатов с целевыми оптическими свойствами.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку.

Конкретно в диссертационной работе:

- 1) Универсальная классификация известных структур слоистых перовскитоподобных галогеноплюмбатов на основе нового количественного дескриптора – фактора сдвига слоев.
- 2) Новая система из шести структурных дескрипторов, ранжированных в порядке убывания влияния на ширину запрещенной зоны (E_g) слоистых галогеноплюмбатов, также показана важность учёта совместного влияния некоторых параметров для корректной оценки E_g .
- 3) Структуры и оптические свойства новых слоистых перовскитоподобных галогеноплюмбатов, отличающихся малым межслоевым расстоянием, с катионами формамидиния (FA^+), метиламмония (MA^+) и ацетамидиния (Ac^+): FA_2PbBr_4 (3 полиморфа), $(FA_yMA_{1-y})_2PbI_4$ и $(Ac)MAPbI_4$.
- 4) Структуры новых одномерных перовскитоподобных фаз галогеноплюмбатов (цепочечные фазы FA_3PbBr_5 и FA_3PbI_5), а также фаз с размерностью каркаса, промежуточной между двумерными и трехмерными структурами (фазы $(FA_yMA_{1-y})_{1.5}PbI_{3.5}$); общая закономерность последовательного понижения размерности

неорганического каркаса фаз состава $A_{1+n}PbX_{3+n}$ ($A^+ = FA^+/MA^+$, $X^- = Br, I$) при увеличении n с сохранением кубической плотнейшей упаковки катионов A^+ и анионов X^- .

5) Причины смещения края поглощения и максимумов фотолуминесценции в сторону больших энергий для перовскитоподобных фаз $A_{1+n}PbX_{3+n}$ с увеличением параметра n ; взаимосвязь полученной экспериментальной зависимости оптических свойств от параметра n с расчётной зависимостью $E_g(n)$, отражающей тенденцию монотонного увеличения ширины запрещённой зоны с понижением размерности неорганического каркаса.

Практическая и теоретическая значимость работы С.А. Фатеева обусловлена выявленными в работе закономерностями между структурными параметрами слоистых перовскитоподобных галогенопльмбатов и их физическими свойствами, обладающими предсказательной силой и, таким образом, закладывающей теоретическую основу для направленного поиска новых полупроводниковых материалов с нужными оптоэлектронными свойствами. Открытые в работе новые фазы низкоразмерных перовскитоподобных галогенопльмбатов продемонстрировали перспективные оптические свойства и могут быть применены в качестве материалов для светоизлучающих устройств, фотодетекторов и сцинтилляторов. Также значительный интерес для практического использования представляет предложенный в ходе выполнения работы и запатентованный способ роста монокристаллов слоистых гибридных галогенопльмбатов – метод исчезающего растворителя, позволяющий получать качественные монокристаллы СПГ различного состава и строения при комнатной температуре и без использования токсичных или агрессивных растворителей.

На заседании 27 июня 2022 г. диссертационный совет принял решение присудить Фатееву С.А. ученую степень кандидата химических наук по специальностям 02.00.21 – «Химия твердого тела».

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 21 человека, из них 11 докторов наук по специальности 02.00.21 – «Химия твердого тела» участвовавших в заседании, из 30 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 21, против – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Председатель диссертационного совета

д.х.н., профессор

Лазаряк Б.И.

Ученый секретарь диссертационного совета

к.х.н.

Еремина Е.А.

«27» июня 2022 г.