

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Калимуллиной Луизы Раяновны "Физико-химия потенциальных барьеров на границе раздела металл/полиарилефталид", представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 - физическая химия

Диссертационная работа Калимуллиной Л.Р. посвящена изучению влияния химической структуры полимеров класса полиарилефталидов (ПДФ) на электронные параметры многослойных структур типа металл/полимер/металл (полупроводник). Одним из важнейших параметров, характеризующим уровень проводимости в структурах типа металл/полиарилефталид, является потенциальный барьер на границе раздела. Весьма актуальным является вопрос о возможности изменения потенциального барьера посредством модификации химической структуры полимера. Знания о химической и электронной структуре материалов дают возможность объяснить некоторые электрофизические явления, прогнозировать свойства пленок, создавать устройства с определенными характеристиками. В связи с этим важны экспериментальные и квантово-химические исследования влияния химической структуры модельных систем полимеров на параметры потенциальных барьеров на границе раздела металл/полимер. При выполнении диссертационного исследования автором получен ряд результатов, отличающихся новизной и представляющих научную и практическую ценность, в том числе

- влияние кислорода на проводимость пленок ПДФ;
- физический смысл потенциального барьера на границе раздела металл/полимер в субмикронных пленках ПДФ;
- влияние структуры полимеров на эффективность управления параметрами потенциальных барьеров структур типа металл/полимер/металл (полупроводник).

Диссертант использовала в работе ряд экспериментальных методов, в том числе, спектроскопия оптического поглощения, атомно-силовая микроскопия и интерферометрия, центрифугирование, вакуумное термодиффузионное напыление и вольтамперные характеристики, что определило достоверность и надежность полученных результатов. Использование диссертантом квантово-химических методов, выбор удачного приближения  $V3LYP/6-31+g(d)$  позволило рассчитать энергетические характеристики модельных структур полимеров и провести анализ спиновой плотности комплексов

дифенилфталида с атомами газов. Практическая ценность работы заключается в получении новых знаний о химической и электронной структуре молекул класса ариленфталидов, что позволяет прогнозировать относительные изменения потенциального барьера на границе раздела металл/полимер и может иметь большое значение при проектировании приборов молекулярной электроники.

По тексту автореферата имеется вопрос и замечание:

- непонятен смысл коэффициента шероховатости  $R_q$  (рис. 7);
- отсутствует уравнение регрессии с указанием коэффициента детерминации, хотя в основных выводах утверждается линейная корреляция между экспериментально определенными значениями сродства к электрону и энергиями нижних вакантных молекулярных орбиталей, вычисленными с помощью квантово-химических расчетов.

Диссертационная работа Калимуллиной Л.Р. "Физико-химия потенциальных барьеров на границе раздела металл/полиарифталит" является завершенным исследованием, которое по своей актуальности, научной новизне и практической значимости, отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, установленным п.п. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней» (утверждено Правительством РФ от 24.09.2013 г., № 842), а соискатель заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 - физическая химия.

Профессор кафедры физики ФГБОУ ВО  
«Уфимский государственный авиационный технический  
университет», доцент, доктор физико-математических  
наук по специальности 01.04.17 – Химическая физика, горение  
и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

15.01.2020

Михайлов Геннадий Петрович

Почтовый адрес: 450008, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12  
Телефон: +7(347) 2735681

Электронная почта: [gpmihailov@mail.ru](mailto:gpmihailov@mail.ru)



Подпись *Михайлова Г.П.*  
Удостоверяю « 15 » 01 20 20 г.  
Начальник отдела документационного обеспечения  
и архива *Алиф Исмаилов*