

ОТЗЫВ

Члена диссертационного совета на диссертацию Коваленко Алексея Валерьевича на тему:
«Квантовохимическое исследование наноструктур MX_2 и MXY на основе дихалькогенидов ($X, Y = \text{S, Se}$) металлов ($M = \text{Mo, W}$) VI группы», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Диссертация Коваленко Алексея Валерьевича лежит в области прикладной квантовой химии и материаловедения. В качестве объекта исследования выбраны нанослои и нанотрубки на основе сульфидов и селенидов молибдена и вольфрама, а в качестве теоретического способа изучения их строения, электронных, термодинамических и каталитических свойств взят стандартный и достаточно надежный неэмпирический метод сильной связи в виде его компьютерной реализации Crystal 17.

Структура диссертации А. В. Коваленко традиционная. Основная ее часть состоит из введения, трех глав и заключения. Во введении излагаются цели и конкретные задачи исследования, обоснована научная новизна работы и её практическая значимость, дана краткая характеристика методологии и методов исследования, а также сформулированы научные положения, выносимые диссертантом на защиту.

Глава 1 представляет собой обзор литературных данных, в котором изложена имеющаяся информация о методах получения, строении, зонной структуре и фоновых спектрах объемных кристаллов и нанослоев MX_2 ($M = \text{Mo, W}; X = \text{S, Se}$).

Глава 2, в которой дано описание геометрии нанотрубок и коротко изложена выбранная расчетная процедура продолжает литературный обзор.

Глава 3 - самая большая по объему, здесь А.В. Коваленко излагает полученные им оригинальные результаты. Отдельные параграфы этой главы расходятся с расчетами свойств объемных кристаллов MX_2 ($M = \text{Mo, W}; X = \text{S, Se}$) и сравнению теоретически полученных результатов с экспериментальными данными, установлению соответствия между структурой и рассчитанными фоновыми спектрами монослоев MX_2 и MXY ($M = \text{Mo, W}; X, Y = \text{S, Se}$), описанию полученных данных по структуре, электронным свойствам и устойчивости этих нанотрубок, установлению связей между рассчитанными фоновыми частотами и термодинамическими свойствами нанотрубок указанных составов.

Результаты исследования резюмированы в разделе «Заключение».

Описание некоторых технических деталей вычислительных процедур дано в «Приложении».

Диссертация Коваленко Алексея Валерьевича на тему: «Квантовохимическое исследование наноструктур MX_2 и MXY на основе дихалькогенидов ($X, Y = \text{S, Se}$) металлов ($M = \text{Mo, W}$) VI группы» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Коваленко Алексей Валерьевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по научной

