

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Хлебникова Александра Феодосиевича на диссертацию Домнина Антона Владимировича на тему: «*Неэмпирическое изучение свойств квази-одномерных углеродных и WS_2 наноструктур*», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4 – физическая химия.

Квази-одномерные наноструктурные материалы активно исследуются с момента открытия графитовых углеродных нанотрубок. Это обусловлено тем, что помимо своей эстетической привлекательности, такие молекулы хорошо подходят для изучения фундаментальных аспектов химической связи и спиральности, а также имеют большой потенциал применения в различных областях науки и технологий, таких как наноматериалы, хемосенсоры, молекулярное распознавание, жидкие кристаллы, молекулярные переключатели, супрамолекулярные материалы, полимеры, фолдамеры, проводящие и оптоэлектронные материалы, нелинейная оптика, хиральность и асимметричный синтез.

В этой связи диссертационная работа Домнина А. В., посвященная изучению влияния крутящих деформаций на свойства углеродных наноструктур различных типов и нанотрубок основе WS_2 , является **актуальной и практически значимой**.

Научная новизна диссертационной работы заключается в:

- (1) исследовании влияния торсионных деформаций на структуру и характеристики квазиодномерных наноструктур в рамках теории функционала плотности (DFT).
- (2) использовании полной симметрии для анализа свойств наноструктур и повышения эффективности расчетов в системах с большим числом атомов в элементарной ячейке.
- (3) использовании упомянутого подхода для моделирования торсионных деформаций на структуру, ширину запрещенной зоны и механические свойства различных квазиодномерных наноструктур.
- (4) разработке и применении методов, основанных на теории спиральных групп, для моделирования квазиодномерных наноструктур.

Диссертационная работа Ильина М. В. состоит из введения, обзора литературы, методической части, обсуждения результатов моделирования квази-одномерных наноструктур, заключения, списка литературы и приложения. Ее объем составляет 121 страницу текста, список цитируемой литературы содержит 119 ссылок.

Описанию собственных результатов автора предшествует краткий, но достаточно емкий **литературный обзор**, в котором рассмотрены свойства квази-одномерных наноструктур и опубликованные экспериментальные и теоретические подходы к их

изучению. В **методической части** соискатель подробно излагает методику диссертационного исследования и обосновывает релевантность использованных подходов. Рассмотрен аппарат групп симметрии квази-одномерных систем и его обобщение на торсионно искажённые системы, а также методика проведенных автором неэмпирических расчетов на основе теории функционала плотности, использующих различные для органических и неорганических квази-одномерных систем гибридные обменно-корреляционные потенциалы, PBE0 и HSE06, соответственно.

Обсуждение полученных результатов в диссертационной работе проведено тщательно и построено весьма логично. Научные положения и выводы диссертационной работы основаны на воспроизводимых и методологически правильно реализованных расчетах политвистана, наногелиценов и нанотрубок на основе WS_2 с использованием теории симметрии спиральных групп и общего алгоритма *ab initio* моделирования квазиодномерных непериодических спиральных нанообъектов. Полученные научные результаты [(а) политвистан: методом DFT впервые изучены электронные и механические свойства политвистана с учетом его спиральной симметрии; обнаружен только один энергетический минимум, соответствующий несоизмеримой структуре с отсутствием трансляционной симметрии; для структуры, соответствующей энергетическому минимуму, рассчитаны ширина запрещенной зоны и модуль Юнга, модуль сдвига и структурные параметры, при этом данные для модуля Юнга и ширины запрещенной зоны, свидетельствуют о плавном изменении этих свойств в относительно небольших пределах при деформации структуры; (б) наногелицены: проведено *ab initio* моделирование наногелиценов с различными краевыми терминациями (зигзаг и кресло) для четырех электронных состояний (двух диамагнитных, ферромагнитного и антиферромагнитного) при этом обнаружено, что энергетический минимум для наногелицена типа кресло определяется переходом Пейерлса (переход метал-изолятор), а для наногелицена типа зигзаг стабильное состояние является антиферромагнитным из-за перехода Мотта-Хаббарда; терминация краев наногелицена влияет на высоту витка при торсионном искажении, а межслоевые взаимодействия меньше в наногелиценах типа кресло; торсионные деформации оказывают ограниченное влияние на спиральные зонные структуры благодаря плавному скольжению витков относительно друг друга; (в) нанотрубки на основе WS_2 : установлено, что нанотрубки меньшего диаметра демонстрируют более значительное отклонение положения энергетического минимума на кривой кручения, при этом чем меньше диаметр, тем существеннее отклонение, а уменьшение диаметра приводит к уменьшению относительных изменений диаметра с частичным увеличением трансляции, что согласуется с растяжением нанотрубки; торсионная деформация оказывает ограниченное влияние на запрещенную зону в

нанотрубках с малым диаметром, но становится более заметной с увеличением диаметра нанотрубки] подробно обсуждены с позиций современной физической и квантовой химии.

Практическое значение полученных результатов исследования заключается в выявлении направлений практического применения теоретически изученных квазиодномерных наноструктур (политвистана, наногелиценов и нанотрубок на основе WS_2), позволяющем целенаправленно планировать экспериментальные исследования таких объектов.

По работе нет существенных замечаний. Материал изложен ясным языком и легко читается. Приведённый иллюстративный материал должным образом отображает полученные результаты. В диссертации мало опечаток. Вместе с утверждения/выражения твистан - «сильно напряженная углеводородная молекула», «наделяет наногелицены увлекательными хироптическими свойствами», «Более того, за счет однопериодичности этих систем может порождать редкие электронные явления» едва ли можно признать удачными. С точки зрения номенклатуры органической химии правильнее использовать выражение *орто*-конденсированные, а не *орто*-аннулированные кольца. Эти замечания естественно не влияют на общую положительную оценку рецензируемой работы.

По результатам работы опубликованы 3 статьи (в рецензируемых научных изданиях из перечня, утвержденного Минобрнауки РФ, и индексируемых в наукометрических базах данных Web of Science, Scopes) и тезисы 5 докладов. Публикации и представление полученных результатов на научных конференциях в полном объеме раскрывают и передают содержание диссертационной работы.

Диссертация Домнина Антона Владимировича на тему: «Неэмпирическое изучение свойств квази-одномерных углеродных и WS_2 наноструктур» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Домнин Антон Владимирович заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4 – Физическая химия. Нарушения пунктов 9 и 11 указанного Порядка в диссертации не установлены.

Член диссертационного совета доктор химических наук, профессор, профессор Кафедры органической химии Института химии СПбГУ



Хлебников А. Ф.

04.10.2024