



## ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Кузьмина Алексея Юрьевича на диссертацию Домнина Антона Владимировича на тему «Неэмпирическое изучение свойств квази-одномерных углеродных и  $WS_2$  наноструктур», представленную на соискание учёной степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.

Рассматриваемые в диссертации квази-одномерные углеродные и неорганические наноструктуры, такие как политвистан, наногелицены и нанотрубки на основе дисульфида вольфрама ( $WS_2$ ), представляют интерес благодаря их механическим, электрическим и оптическим свойствам. Экспериментальные исследования таких систем зачастую сталкиваются с объективными трудностями, связанными с синтезом самих наноматериалов и ограничениями используемых экспериментальных методов. Поэтому теоретическое моделирование рассматриваемых наносистем на основе первопринципных методов квантовой химии имеет большое значение для понимания взаимосвязи между их структурой и свойствами, а также для оптимизации и прогнозирования их характеристик для будущих применений. В частности, изучение влияния крутящих деформаций на свойства углеродных наноструктур и нанотрубок на основе  $WS_2$ , являющееся целью настоящей диссертации, представляет как фундаментальный, так и практический интерес для применений в композитных материалах, электронике, медицине и других областях.

Диссертация изложена на 121 странице и состоит из введения, трёх глав, заключения, списка условных сокращений и обозначений, списка цитируемой литературы и приложения. Работа включает 34 рисунка и 9 таблиц. Список цитированной литературы содержит 119 источников.

Во введении изложена актуальность работы, сформулированы цель и задачи работы, обоснованы теоретическая и практическая значимость работы, а также её научная новизна, приведена методология и методы исследования, сформулированы научные положения диссертации, выносимые на защиту, а также приведены основные полученные результаты. Помимо этого, во введении приведён список конференций и публикаций, в которых докладывались и были опубликованы полученные результаты, а также указан личный вклад автора.

Главе 1 посвящена обзор литературы. В ней вводится понятие о квази-одномерных наноструктурах и рассмотрена взаимосвязь между их свойствами и структурой, описываемой с помощью линейных групп симметрии со спиральной периодичностью. Также обсуждаются актуальные экспериментальные и теоретические работы по квазиодномерным наноструктурам, таким как углеродные нанонити и нанотрубки на основе дисульфида вольфрама.

Глава 2 посвящена описанию используемой в работе методики. В ней рассмотрены элементы теории спиральных групп симметрии и обсуждается их использование при описании нанотрубок с гексагональной морфологией. В главе также рассмотрены квантовохимические методы моделирования квази-одномерных объектов с использованием программы CRYSTAL17 в рамках теории функционала плотности и

приводятся детали расчётов для рассматриваемых в работе материалов – наногелиценов, политвистана и нанотрубок WS<sub>2</sub>.

Глава 3 посвящена основным результатам работы. В разделе 3.1 рассматривается моделирование наноструктур содержащих sp<sup>3</sup>-гибридизованные атомы на примере политвистана. В работе было изучено влияние торсионных деформаций и выбора симметрично неприводимого фрагмента на результаты моделирования, проведены исследования электронных, колебательных и механических свойств политвистана, а также влияния торсионных и аксиальных деформаций на них. В разделе 3.2 обсуждаются результаты моделирования структуры и свойств наногелиценов с терминациями граней типа «кресло» и «зигзаг». Для каждого наногелицена рассматривались четыре состояния - диамагнитный металл, диамагнитный полупроводник, ферромагнитный металл и антиферромагнитный полупроводник. Показано, что наногелицен с терминациями граней типа «кресло» является диамагнитным полупроводником, в то время как с терминациями граней типа «зигзаг» - антиферромагнитным. Также было установлено, что терминация краев наногелицена влияет на высоту витка при торсионном искажении и межслоевые нековалентные взаимодействия меньше в наногелиценах типа «кресло». В разделе 3.3 обсуждаются результаты моделирования торсионных искажений углеродных и неорганических нанотрубок WS<sub>2</sub>. В работе изучены влияние торсионного искажения на диаметр нанотрубок и изменение запрещённой зоны. Показано, что торсионная деформация возрастает с увеличением диаметра нанотрубки WS<sub>2</sub>.

В разделе «Заключение» обобщены полученные результаты и приведены основные выводы. В приложении приведена информация о рассчитанных фононных частотах политвистана в Г-точке зоны Бриллюэна для двух значений углов поворота, а также базисные наборы использованные для расчёта нанотрубок WS<sub>2</sub>.

Замечания по диссертации следующие:

- 1) Во введении отсутствуют ссылки на литературные источники, что усложняет оценку актуальности и новизны работы.
- 2) В работе в ряде мест присутствуют технические и стилистические неточности:
  - a. На странице 3: «Хотя потенциал применения политвистана огромен, его синтез и описание свойств остаются, на сегодняшний день, остаётся не решенной задачей».
  - b. На странице 9: «Были определены структурные параметры энергетического минимума политвистана, а также зависимости энергии образования, ширины запрещенной зоны и модуля Юнга от угла скручивания, а также впервые построены карты зависимости ширины от торсионных и аксиальных деформаций».
  - c. На странице 9: «Кроме того, ни одну из рассмотренных наноструктур нельзя было описать с в рамках теории пространственных или стержневых групп».
  - d. На странице 28 «Необходимость в понижении симметрии возникает при изучении электро-электронных или фонон-фононных взаимодействий, а также при изучении областей экстремальных деформаций».
  - e. На странице 32 текст дублируется в двух последовательных параграфах: «В зависимости от значений, которые принимают индексы, существует ...».
  - f. На странице 36 в таблице 2 приводятся результаты для алмаза, которые совпадают с результатами в таблице 1. Результаты для политвистана отсутствуют.

- g. На странице 42 ссылки на таблицы (SI1 и SI2) в приложении не совпадают с их номерами (S1 и S2) в приложении.
  - h. На странице 56 в подписи к рисунку 20: «Области красного цвета относятся соответствующим ...».
  - i. На странице 61 в подписи к рисунку 24: «Электронных зон построенные в спиральной зоне ...».
  - j. В списке литературы, в некоторых ссылках отсутствуют нижние и верхние индексы в химических формулах. Например: [4, 11, 12, 63, 64, 66, 67, 68, 69, 74, 75, 79, 81, 82, 83].
  - k. В списке литературы, ссылки оформлены не одинаково: в некоторых ссылках названия журналов приводятся сокращённо, а в некоторых полностью.
- 3) Значения рассчитанных фоновых частот в таблицах S1 и S2 приводятся с точностью четыре знака после запятой, что не соответствует точности расчёта.
- 4) В приложении приведены базисные наборы использованные для расчёта нанотрубок WS<sub>2</sub>, но отсутствуют базисные наборы использованные для расчётов политивистана и наногелицена.

Сделанные замечания не влияют на общую положительную оценку диссертационной работы А.В. Домнина и не снижают ценности полученных соискателем результатов.

Диссертация А.В. Домнина содержит **оригинальные** результаты, чья **достоверность** не вызывает сомнения. Материалы диссертации опубликованы в трёх научных статьях в международных рецензируемых журналах (Computational Materials Science (IF=3,1), Computational Condensed Matter (IF=2,6), Nanomaterials (IF=4,4) индексируемых в базах данных Web of Science Core Collection и Scopus. Во всех трёх научных статьях автор диссертационной работы А.В. Домнин является первым автором.

Диссертация Домнина Антона Владимировича на тему: «Неэмпирическое изучение свойств квази-одномерных углеродных и WS<sub>2</sub> 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 учёной степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия. Нарушения пунктов 9 и 11 указанного Порядка в диссертации не обнаружены.

Член диссертационного совета  
Доктор физики, ведущий научный сотрудник,  
действительный член Латвийской академии наук,  
заведующий лабораторией EXAFS спектроскопии  
Института физики твёрдого тела Латвийского университета.

  
Кузьмин Алексей Юрьевич  
(Kuzmins Aleksejs).

11.10.2024