

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Смирнова Михаила Борисовича 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.

Диссертация посвящена актуальной проблеме исследование строения и электронной структуры нескольких семейств одномерных периодических наноструктур, таких как политвистаны, наногелицены и нанотрубки на основе дихалькогенидов переходных металлов. Актуальность выбранной тематики обусловлена высокой перспективностью одномерных наноструктур для различных применений в электронике, фотонике, биомедицине и информатике. Несмотря на обилие работ по данной тематике, представленные в диссертации результаты впечатляют широтой охвата материала и строгостью теоретической основы исследования.

В представленной диссертации теоретически определены соответствующие энергетическим минимумам, структуры политвистана, наноглиценов и серии хиральных нанотрубок на основе дисульфида вольфрама. Исследованы особенности электронного строения этих наноструктур и их поведение при торсионных и аксиальных деформациях. К результатам, имеющим прикладное значение, можно отнести установление возможности использования торсионных деформаций для изменения свойств политвистана и нанотрубок и определение влияния терминации граней на магнитные свойства наногелиценов.

В работе использованы методы решения электронной задачи, адекватность которых доказана многочисленными успешными применениями в исследованиях сходных соединений. Следует отметить удачный для данного исследования выбор программного комплекса CRYSTAL2017, в котором предусмотрена возможность генерации начальных координат атомов в нанотрубках на основе их положения в исходных слоях, а также различные методы учета дисперсионных взаимодействий в рамках теории функционала плотности. При анализе изучаемых структур и электронных волновых функций автор успешно использовал теорию спиральных групп, что значительно облегчило решение поставленных задач.

33-06-952 от 18.10.2024

В целом, совокупность полученных результатов дает основание утверждать, что результаты данной диссертации способствуют углублению понимания влияния деформаций на структуру квазиодномерных объектов, что способствует разработке эффективных методов модификации квазиодномерных материалов для их адаптации к конкретным приложениям в биомедицине, электронике, оптоэлектронике etc.

Основные результаты диссертации опубликованы в рецензируемых российских и международных научных журналах, докладывались на конференциях в России и за рубежом. Они нашли признание и широко цитируются другими исследователями. Автореферат правильно и полно отражает содержание диссертации.

К недостаткам диссертации я бы отнес недостаточное, на мой взгляд, изложение теоретической схемы интерпретации нековалентных взаимодействий. На рис. 20 представлена диаграмма “RDG - $\text{sign}(\lambda_2) \cdot \rho$ ”. Для обозначения RDG дано пояснение – это «приведенный градиент электронной плотности». Но почему-то на рис. 20 для этой величины (которая по определению безразмерная!) приведены единицы измерения – а.е. В тексте диссертации отсутствует определение (или хотя бы пояснение физического смысла) величины λ_2 . Дается лишь отсылка: «Для лучшего понимания природы нековалентных взаимодействий и их анализа, рекомендуется ознакомиться с обзорной статьей [117]». Такой стиль изложения допустим в журнальных публикациях. Для диссертаций, на мой взгляд, желательнее более развернутое изложение. В отсутствие обсуждения физического смысла величины λ_2 читателю невозможно понять, почему ее значение может служить характеристикой нековалентных взаимодействий. Приведенная в тексте фраза «Области красного цвета относятся соответствующим отталкиванию, области зеленого цвета - к ван-дер-ваальсовым взаимодействиям, а синий цвет используется для сильного притяжения», по крайней мере, нуждается в ссылке. Дополнительно хочу заметить, что ещё одним неудобством для читателя данной диссертации является отсутствие индексов DOI в цитируемой литературе.

Отмеченные недостатки носят непринципиальный характер и не умаляют научной значимости отмеченных выше основных результатов данной диссертации.

Диссертация Домнина Антона Владимировича на тему: «Неэмпирическое изучение свойств квази-одномерных углеродных и WS₂ 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 обнаружены.

Член диссертационного совета
доктор физико-математических наук, профессор
Михаил Борисович Смирнов



Дата 15.10.2024

М.Б. Смирнов
Кандидат
15.10.2024