

## ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Цирельсона Владимира Григорьевича 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.

Перспективный с точки зрения технологических применений класс квази-одномерных наноструктур интересен как пример носителей уникальных электронных, оптических и механических свойств, что важно для создания материалов будущего. Поэтому углеродные наноструктуры этого класса являются предметом интенсивных исследований. В то же время, неорганические одномерные системы изучены слабо. Поскольку на повестке дня стоит задача направленного поиска и создания новых материалов с одномерной структурой, диссертация А.В. Домнина **актуальна**. Она посвящена изучению влияния деформаций одномерных структур (включая крутящие деформации) на свойства углеродных наноструктур политивистана и наногелиценов, а также неорганических хиральных нанотрубок основе  $WS_2$ . Диссертант в рамках одного и того же неэмпирического расчетного метода теории функционала плотности сосредоточился на выборе оптимальной расчетной методики, учитывающей тип и специфику исследуемых квази-одномерных наноструктур, а затем провел расчеты и осуществил детальный анализ их свойств при деформации этих структур. Результаты данной диссертации позволят ускорить успешный направленный синтез одномерных материалов и **будут востребованы** в среде химиков-материаловедов.

Диссертация изложена на 121 странице и состоит из введения, трех глав, заключения, списка цитируемой литературы и приложения. Работа включает 34 рисунка и 9 таблиц. Список цитированной литературы содержит 119 ссылок.

Во Введении изложены цель и задачи исследования, обоснована научная новизна работы и её практическая значимость, дана краткая характеристика методологии и методов исследования, а также сформулированы научные положения, выносимые на защиту. Глава 1 представляет собой обзор структур и свойств квази-одномерных наносистем и сводку результатов по их экспериментальному и теоретическому изучению. В Главе 2 (Методическая часть) развиты приложения теории лайн групп к нанотрубкам с гексагональной морфологией. Охарактеризованы квантово-химические методы моделирования квази-одномерных объектов. Глава 3 содержит результаты моделирования квази-одномерных наноструктур наногелиценов и углеродных и неорганических нанотрубок. В разделе «Заключение» подведены результаты исследования. Детали вычислений даны в Приложении.

**Основные результаты** работы следующие.

- В диссертации учтена полная симметрия рассматриваемых квази-одномерных систем, разработаны и применены методы, основанные на теории спиральных групп, и изучены воздействия торсионной деформации на их структуру, картину запрещенной зоны

и механические свойства. Использование неэмпирических методов расчета и учет полной симметрии дает достаточно точные результаты при разумных вычислительных затратах.

- Достигнуто понимание воздействия торсионной деформации на структуру и свойства одномерных наноструктур. Тем самым углублены знания о внутренних механизмах, определяющих поведение этих материалов. Создана основа для улучшения контроля свойств наноматериалов с оптимальными характеристиками для биомедицины, электроники и др.

- Определена структура энергетического минимума политвистана и изучены его электронные и механические свойства и отклик на механические деформации. В наногелицах с помощью приведенного градиента электронной плотности показана роль нековалентных взаимодействий между витками при формировании электронных, структурных и механических свойств. Указано на роль ограничения граней на магнитные свойства наногелицев.

- Выявлены детали влияния торсионной деформации на свойства неорганических нанотрубок на основе WS<sub>2</sub>. Установлено, что величина диаметра нанотрубки обратно пропорциональна степени влияния деформации на структуру и свойства нанотрубки.

- Продемонстрировано, что достоверное моделирование свойств и структуры различных наноструктур требует использования не только теории пространственных или стержневых групп, но и теории спиральных групп.

По диссертации имеются **замечания**.

- 1) В работе использовались различные модификации (полноэлектронный и псевдопотенциальный варианты) метода Кона-Шэма и применялись различные функционалы и базисные наборы. Эта информация, важная для понимания результатов, разбросана по диссертации. Сведение всех использованных приближений и деталей расчета и вывод об их влиянии на результаты сделали бы работу более убедительной.
- 2) Оценка точности полученных численных характеристик наноструктур в работе отсутствует. Между тем, даже приближенные оценки такого рода важны для понимания, каковы погрешности получаемых расчетных величин.

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

Результаты, полученные в диссертации А.В. Домнина, являются **новыми**. **Степень достоверности** результатов и **оригинальность** работы сомнений не вызывает. Материалы диссертации обсуждались на 5 научных конференциях и изложены в 3-х научных статьях, опубликованных в международных рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных РИНЦ, Web of Science и Scopus.

Резюмируя, отмечу, что диссертация Антона Владимировича Домнина 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 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,

Заведующий кафедрой квантовой химии

ФБГОУ ВО «Российский химико-технологический

университет имени Д.И. Менделеева»

125047, г. Москва, Миусская площадь, д. 9

Тел.: +7 (499) 978-95-84,

E-mail: tsirelson.v.g@muctr.ru

Цирельсон Владимир Григорьевич

25 сентября 2024 г.

Подпись профессора Цирельсона В.Г. удостоверяю:

*Подпись Цирельсона В.Г. - удостоверяю*



*З. Ренд*

*30.09.2024*