

УТВЕРЖДАЮ

Директор

Института химии СПбГУ

 /И.А. Балова/

«09» апреля 2024г

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

### **Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»**

Диссертация Домнина Антона Владимировича «Неэмпирическое изучение свойств квази-одномерных углеродных и  $WS_2$  наноструктур» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» в 2020 – 2024гг в ходе очного обучения в аспирантуре СПбГУ.

Научным руководителем является Роберт Александрович Эварестов, профессор, доктор физико-математических наук, заведующий Кафедрой квантовой химии института химии СПбГУ.

Содержание и результаты работы рассматривались на заседании кафедры квантовой химии СПбГУ (протокол заседания кафедры квантовой химии от 09.04.2024 №43/6/2-02-1). В ходе обсуждения отмечалась актуальность темы диссертационного исследования, а также недостаточная научная разработанность проблем, связанных с изучением влияния торсионных деформаций на свойства квази-одномерных наноструктур, которая предопределила выбор цели, задач и объектов исследования, а также его научную новизну и практическую значимость.

Научная новизна данного исследования заключается в развитии методик для моделирования торсионных деформаций нанообъектов, а также

в том, что, для рассматриваемых объектов, впервые были получены зависимости электронных и механических свойств от угла торсионной деформации неэмпирическими методами.

Наиболее важные результаты, отражающие личный вклад соискателя, содержащие научную новизну, имеющие теоретическую и прикладную значимость заключаются в следующем:

1. Были определены структурные параметры энергетического минимума политвистана, а также зависимости энергии образования, ширины запрещенной зоны и модуля Юнга от угла скручивания. Помимо этого, было изучено влияние аксиальной деформации на свойства и структуру политвистана.

2. Сделаны выводы о влиянии нековалентных взаимодействий между витками на электронные, структурные и механические свойства. Также была показана возможность влияния терминации граней на магнитные свойства наногелиценов.

3. Показана важность использования методики «уменьшения мономера» для моделирования экстремальных деформаций и магнитных свойств квазиодномерных объектов.

4. Впервые изучено влияние торсионной деформации на структуру, энергию, ширину запрещенной зоны, положения вершины валентной зоны и дна зоны проводимости для нанотрубок на основе  $WS_2$ .

Достоверность и обоснованность полученных результатов подтверждаются предварительной валидацией методов теоретического моделирования, а также их корректным использованием. Помимо этого, работа прошла широкую апробацию. Результаты работы опубликованы в высокорейтинговых журналах и были представлены на всероссийских конференциях. Публикации с достаточной степенью полноты отражают содержание диссертации.

Диссертация соответствует специальности 1.4.4. Физическая химия и соответствует научному направлению - получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергий, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных сред и белковом окружении (п. 11).

Таким образом, диссертация на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия на тему «Неэмпирическое изучение свойств квази-одномерных углеродных и  $WS_2$  наноструктур», выполненная Домниным Антоном Владимировичем, является завершенным научным исследованием, имеет теоретическое и прикладное значение, соответствует требованиям, установленным пунктами 9-14 Положения «О порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 No 842 (ред. От 11.09.2021), и рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук.

Заведующий кафедрой  
квантовой химии,  
проф., доктор физ.-мат.  
наук



Р.А. Эварестов

