

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета на диссертацию Куруч Дмитрия Дмитриевича
на тему:

«Квантово-химические расчеты наноструктур на основе перовскитов»
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по
специальность: 02.00.01 – Неорганическая химия

Рецензируемая работа лежит в области прикладной вычислительной и квантовой химии и неорганического материаловедения. Предметом исследования являются наноструктурированные материалы на основе перовскитов. Актуальность предпринятого диссертантом исследования геометрического строения, термодинамических свойств, электронного строения, механизмов переноса заряда, а также реакций на поверхности слоев и нанотрубок обусловлена отсутствием систематизированной информации об указанных характеристиках этих наноматериалов и перспективностью наноматериалов для создания элементов наноэлектроники.

Структура диссертации традиционная. Она начинается с Введения и краткого описания потенциалов использованного Д.Д. Куруч неэмпирического метода ЛКАО.

Изложение оригинальных результатов начинается с демонстрации надежности выбранного подхода для прогнозирования параметров решетки, модулей упругости, энергий атомизации и запрещенных зон кристаллов перовскитов и оксидов Zr, Hf и Y. Затем диссертант переходит к основной теме исследования, начиная с более трудоемких расчетов дефектных слоев, содержащих примеси и вакансии, переходя постепенно к нанотрубкам с различными типами слоев и упаковок. Крайне интересным при моделировании этих материалов и особенно

09/2-123 от 06.12.2014

нанотрубок представляется идеи расслоения и консолидирования стенок при реконструкции многослойных материалов. Обнаружены химически интересные корреляции между ионными радиусами компонентов состава и устойчивостью нанотрубок. Следующие большие разделы диссертации посвящены компьютерному моделированию молекулярной и диссоциативной адсорбции воды на идеальных и легированных поверхностях нанослоев и нанотрубок. Выяснение диссертантом строения большого числа таких комплексов с водой и определение энергий активации и путей миграции протонов и кислородов по поверхности этих системах проясняет механизмы проводимости перовскитных протяженных наноматериалах. Заканчивается основная часть диссертации анализом ширины запрещенной зоны разнообразных слоев в зависимости от их состава и состояния адсорбированной с оценкой возможностей фотохимического каталитического разложения воды на материалах. Диссертация завершается обстоятельным подведением итогов работы (из 15 пунктов на 4 стр.) и списком цитированной литературы. К диссертации прилагается ее полный перевод на английский язык.

Достоверность полученных результатов не вызывает сомнения, все они получены с использованием самых современных и надежных методов и компьютерных программ квантовой химии.

Полученные результаты могут быть включены в курсы неорганической химии и наноматериаловедения Университетов и Химико-технологических ВУЗов и использованы в процессе преподавания этих дисциплин.

Хорошее впечатление производят публикации диссертанта - результаты диссертации опубликованы в лучших специализированных международных журналах. На основании вышеуказанного считаю, что диссертационная работа Куруч Дмитрия Дмитриевича является законченным научным трудом и соответствует требованиям, установленным Приказом от 01.09.2016 №6821/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете». Автор диссертационной работы Куруч Дмитрий

Дмитриевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.01 – Неорганическая химия.

Член диссертационного совета:

Доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник
Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт
общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук



Дьячков Павел Николаевич

15.11.2017

Подпись руки тов. Дьячкова П.Н.
ПЛОДОСТОВЕРНО
Данная подпись имеет силу

