

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета на диссертацию Куруча Дмитрия Дмитриевича «Квантовохимические расчеты наноструктур на основе перовскитов», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.01 – Неорганическая химия

В диссертационной работе Д. Д. Куруча представлены результаты теоретических исследований структуры, устойчивости и электронных свойств моделей поверхностей ряда кристаллических перовскитов (содержащих атомы Sr, Ba, Ti, Zr и Hf), а также тонких слоев и нанотрубок, полученных их сворачиванием. В качестве основного расчетного метода в работе принят гибридный вариант теории функционала плотности и приближения Хартри-Фока. Рассмотрены как бездефектные поверхности, так и поверхности с кислородными вакансиями и примесными атомами иттрия. Значительную часть работы составляют расчеты взаимодействия молекул воды с кристаллическими поверхностями (слоями) и поверхностями нанотрубок.

Актуальность работы обусловлена, прежде всего, тем, что квантовохимические методы *ab initio* в настоящее время обеспечивают надежный теоретический инструмент для определения устойчивости, атомной и электронной структуры и конкретных форм нанобъектов. Указанная информация необходима для интерпретации и прогнозирования свойств наноматериалов, которые приобретают все большее значение в современной технике и технологии.

Диссертационная работа включает введение, методическую, содержательную часть и заключение. Введение, в основном, посвящено обзору расчетов дефектных и гидратированных поверхностей перовскитов, а также моделям нанотрубок. В краткой методической части рассматриваются вопросы, связанные с выбором эффективных основных псевдопотенциалов и базиса атомных орбиталей для расчетов в приближении ЛКАО, а также величины параметров, регулирующих точность вычислений.

09/2 - 124 Отм 06.12.14

В начале раздела «Результаты расчетов и их обсуждение» автор проводит сравнение ряда свойств объемных кристаллов перовскитов (которые выступают как тестовые системы) полученных экспериментально и в результате расчетов с использованием принятых методик. Как следует из представленного сравнения (Табл. 1) использованный метод действительно обеспечивает хорошую точность воспроизведения структурных данных (порядка 1%). Точность энергий атомизации несколько меньше (около 3%).

В последующих подразделах автор последовательно рассматривает результаты моделирования структуры нанослоев и нанотрубок, а затем адсорбции молекул воды на поверхности нанослоев и нанотрубок. Для большинства исследуемых систем приводятся структурные данные, которые определяются в результате полной оптимизации их геометрии. Особого внимания заслуживает подробный анализ стабильности различных конфигураций, выполненный на основе вычисления энергий образования и энергий адсорбции молекул воды (нанослои и нанотрубки), поверхностных энергий (нанослои), энергий сворачивания (нанотрубки).

Итоги работы и выводы даны в Заключение.

Список цитированной литературы, содержащий 101 наименование, приводится в конце работы. Диссертация представлена как на русском, так и на английском языках.

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в виде шести статей в научных журналах с достаточно высоким импакт-фактором.

По содержанию диссертационной работы имеются следующие замечания.

1. С точки зрения рецензента, в ведении недостаточное внимание уделено результатам экспериментальных исследований свойств поверхностей перовскитов, а также структуре синтезированных нанотрубок.

2. В работе упомянуты не все экспериментальные данные, относящиеся к исследуемым системам и доступные к настоящему времени. Так, например, в

Табл. 1 отсутствуют литературные данные для модуля упругости SrZrO_3 , тогда как в литературе имеются соответствующие экспериментальные оценки (D. de Ligny, P. Richet, Phys. Rev. B. 1996. 53. 3013).

3. В работе упоминаются результаты экспериментальных исследований структуры поверхностей различных Y-замещенных перовскитов, однако практически отсутствует обсуждение экспериментальных данных по изучению их поверхностной проводимости.

4. Данные по энергиям адсорбции молекул воды на поверхности перовскитов никак не сопоставляются с выводами прямых или косвенных измерений теплот адсорбции.

5. По всему тексту диссертационной работы энергетические характеристики даны без погрешности. Может ли автор оценить порядок этих величин?

6. В таблице 1 даны величины энергий атомизации, определенные экспериментально и рассчитанные методами квантовой химии. Используются ли эти величины в дальнейших расчетах?

7. В работе встречаются грамматические и синтаксические ошибки, а также опечатки.

Несмотря на отмеченные недостатки, достоверность представленных результатов не вызывает сомнения, так как все они найдены на основе адекватных моделей и с использованием современных методов квантовой химии.

Полученные данные могут быть включены в курсы по химии неорганических наноматериалов и использованы в процессе преподавания специальных дисциплин.

На основании вышеуказанного считаю, что диссертационная работа Куруча Дмитрия Дмитриевича является законченным 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 при-

суждения ученой степени кандидата химических наук по специальности
02.00.01 – Неорганическая химия.

Член диссертационного совета,
доктор химических наук
по специальности 02.00.01 – неорганическая химия,
профессор

С.И. Лопатин
01.12.2017 г

