

## **Отзыв научного руководителя**

на выпускную квалификационную работу студента бакалавриата

**Карпова В. В.**

«Неэмпирические расчеты устойчивости, электронных и фононных свойств монослоев и нанотрубок на основе халькогенидов галлия(II)», выполненной по направлению 04.03.02 «Химия, физика и механика материалов» в рамках образовательной программы СВ.5016.2016 «Химия, физика и механика материалов»

Выпускная квалификационная работа В. В. Карпова посвящена теоретическому изучению наноструктур на основе слоистых моносulfидов и моноселенидов галлия. Актуальность выполненной работы определяется тем, что материалы на основе монохалькогенидов галлия широко используются в различных областях техники и технологии. Так, многие из этих соединений находят применение в качестве полупроводников, фотопроводников, фотодетекторов и излучателей света, а также в качестве перспективных материалов для анодов литий-ионных батарей. В последнее время, внимание как экспериментаторов, так и теоретиков обращено на изучение нанообъектов (нанолистов, наностержней и нанотрубок) на основе халькогенидов галлия (II). Свойства наноразмерных объектов могут заметно отличаться от свойств объемных кристаллов, что обеспечивает дополнительные возможности для их практического использования.

К настоящему времени выполнено достаточно много квантовохимических расчетов электронной структуры и устойчивости кристаллов и нанослоев на основе халькогенидов Ga. Тем не менее, практически отсутствуют теоретические данные относительно устойчивости, спектральных и термодинамических свойств нанотрубок GaS и GaSe, возможность синтеза которых доказана экспериментально. В задачу Выпускной квалификационной работы (ВКР) В. В. Карпова входит проведение квантовохимических расчетов и изучение структуры, устойчивости и фононных спектров указанных нанотрубок.

В ходе подготовки к ВКР В. В. Карпов провел серию квантовохимических расчетов объемных кристаллов GaS и GaSe с целью выбора параметров моделирования, обеспечивающих хорошее воспроизведение имеющихся экспериментальных данных (структуры, колебательных частот, констант упругости, энергий атомизации). В процессе проведения этих расчетов он освоил работу с программой для квантовохимических расчетов CRYSTAL2017.

В рамках выбранной методики В. В. Карпов выполнил квантовохимические расчеты геометрических и энергетических параметров в общей сложности около 100 нанотрубок с различным составом, структурой, хиральностью и диаметром. Неэмпирические расчеты колебательных состояний подтвердили локальную стабильность рассмотренных объектов, что указывает на принципиальную возможность синтеза одностенных нанотрубок на основе халькогенидов галлия (II). Впервые проведенное сравнение рассчитанных фононных частот монослоев и нанотрубок позволяет предложить критерии для экспериментальной идентификации монослоев и нанотрубок по количеству сигналов в инфракрасных спектрах и спектрах комбинационного рассеяния.

В ходе выполнения ВКР, В. В. Карпов проявил научную инициативу, энергичность и настойчивость, что позволило ему успешно преодолеть трудности, неизбежно возникающие в любой исследовательской работе. В. В. Карпов является одним из исполнителей гранта РФФИ «Неэмпирические расчеты структуры, электронных и фононных свойств разноповерхностных нанотрубок на основе смешанных халькогенидов Ga и In». Результаты работы В. В. Карпова доложены в виде стендового доклада на международной студенческой научной конференции «Mendeleev 2019» и опубликованы в виде статьи в журнале «Физика твердого тела».

Считаю, что работа В. В. Карпова удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к бакалаврским выпускным квалификационным работам, и заслуживает оценки ОТЛИЧНО.

Научный руководитель,

кандидат химических наук,  
доцент кафедры квантовой химии  
института химии СПбГУ



А. В. Бандура

26 мая 2020 г.