

PERSONAS DATI

Dmitrijs Bočarovs

 Kengaraga 8, Rīga, LV-1063 (Latvija)

 29622457

 bocharov@latnet.lv

Dzimšanas datums 30/10/1981

DARBA PIEREDZE

01/04/2002–pašlaik

Pētnieks (Inženieris līdz 10/2006, zinātniskais asistents līdz 9/2012)

LU Cietvielu fizikas institūts, Teorētiskās fizikas un datomodelēšanas nodaļa, Rīga (Latvija)

01/02/2013–pašlaik

Docents (lektors līdz 02/2014)

Transporta un sakaru institūts, Rīga (Latvija)

01/04/1999–pašlaik

Neformālās izglītības projektu vadītājs

Biedrība UNESCO-Club “Kultūra. Iecietība. Draudzība”, Rīga (Latvija)

01/09/2014–31/08/2015

Vieszinātnieks

Paula Šerera institūts, Viligena (Šveice)

05/03/2013–31/12/2014

Fiziķis

LU Fizikas un matemātikas fakultāte, Rīga (Latvija)

01/10/2013–31/01/2014

Pētnieks

LU Fizikas un matemātikas fakultāte, Rīga (Latvija)

01/12/2009–30/11/2012

Pētnieks

LU datorikas fakultāte, Rīga (Latvija)

01/11/2007–31/12/2007

Zinātniskais asistents

LU Fizikas un matemātikas fakultāte, Rīga (Latvija)

IZGLĪTĪBA

01/10/2006–24/01/2012

Doktora grāds fizikā, zinātniskais vadītājs Dr.chem. Jurijs Žukovskis, darbs “Virsmas īpašību un reakcijas spēju modelēšana no pirmajiem principiem nitrīdu kodolu degvielai”

Latvijas Universitāte, Rīga (Latvija)

01/09/2004–30/06/2006

Maģistra grāds fizikā, zinātniskais vadītājs Dr.phys. Aleksejs Kuzmins, darbs “Rentgenabsorbcijas spektru kvantu ķīmiska interpretācija perovskīta tipa savienojumos”

Latvijas Universitāte, Rīga (Latvija)

01/09/2000–30/06/2004

Bakalaura grāds fizikā

Latvijas Universitāte, Rīga (Latvija)

PRASMES

Dzimtā valoda krievu

Citas valodas

	SAPRATNE		RUNĀŠANA		RAKSTĪŠANA
	Klausīšanās	Lasīšana	Dialogs	Monologs	
latviešu	C1	C1	C1	C1	C1
angļu	B2	B2	B2	B2	B2

Līmeņi: A1 un A2: Pamatlīmenis - B1 un B2: Vidējais līmenis - C1 un C2: Augstākais līmenis
 Eiropas kopīgās pamatnostādnes valodu apguvei

Organizatoriskās / vadības prasmes

2016-līdz šim brīdim: LU CFI Zinātniskās padomes loceklis

2010-līdz šim brīdim: Latvijas Valsts Fizikas Olimpiādes un LU Jauno Fiziku Skolas orgkomitejas loceklis

2002-līdz šim brīdim: Latvijas Atklātās Fizikas Olimpiādes orgkomitejas loceklis (2005.-2007., 2011.-2013., 2016. Olimpiādes koordinators)

2003-līdz šim brīdim: Rīgas Skolēnu Intelektuālo „Kas? Kur? Kad?” spēļu čempionāta koordinators

Ar darba pienākumiem saistītās prasmes

No 12/2012 Latvijas Zinātņu padomes eksperts (Ekspertīzes jomas: cietvielu fizika, cietvielu datamodelēšana no pirmajiem principiem, kvantu ķīmija, materiālfizika, elektroniskās un atomārās struktūras aprēķini, fizikas didaktika)

Publikācijas:

Raksti zinātniskajos izdevumos

1. R.A. Evarestov, A.V. Bandura, M.V. Losev, E.A. Kotomin, Yu.F. Zhukovskii, and D. Bocharov, A first principles DFT study in UN bulk and (001) surface: comparative LCAO and PW calculations. - J. Comput. Chem., 2008, 29, p. 2079-2087.
2. D. Bocharov, A. Kuzmin, J. Purans, and Yu.F. Zhukovskii, Quantum chemistry studies of the O K-edge X-ray absorption in WO₃ and AWO₃. - SPIE Proceedings (Proc. AOMD-6, Riga, Latvia, 2008), 2008, 71420T (p. 1-9).
3. N. Zaporina, O. Doynikova, A. Krumina, D. Bocharov, and J. Grabis, Methods of electron microdiffraction and X-ray analysis in structure study of nanodisperse partially stabilized ZrO₂ powders. - J. Surf. Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2009, 3, p. 464-467.
4. Yu.F. Zhukovskii, D. Bocharov, E.A. Kotomin, R.A. Evarestov, and A.V. Bandura, First principles calculations of oxygen adsorption on the UN(001) surface. - Surf. Sci., 2009, 603, p. 50-53.
5. Yu.F. Zhukovskii, D. Bocharov, and E.A. Kotomin, Chemisorption of a molecular oxygen on the UN (001) surface: *ab initio* calculations. - J. Nucl. Mater., 2009, 393, p. 504-507.
6. N. Zaporina, J. Grabis, V.N. Timofeev, and D. Bocharov, Microstructural investigations of multicomponent SiC/Si₃N₄-Al₂O₃-Y₂O₃ nanopowders. - Latv. J. Chem., 2010, No 1, p. 33-38.
7. D. Bocharov, D. Gryaznov, Yu.F. Zhukovskii, and E.A. Kotomin, DFT calculations of point defects on UN(001) surface. - Surf. Sci., 2011, 605, p. 396-400.
8. D. Bocharov, D. Gryaznov, Yu.F. Zhukovskii, and E.A. Kotomin, *Ab initio* modeling of oxygen impurity atom incorporation into uranium mononitride surface and subsurface vacancies, J. Nucl. Mater., 2011, 416, p. 200-204.
9. Yu.F. Zhukovskii, D. Bocharov, D. Gryaznov, and E.A. Kotomin, First Principles Simulations on Surface Properties and Oxidation of Nitride Nuclear Fuels. - Chapter in book: Advances in Nuclear Fuel (Ed. Shripad T. Revankar, InTech Open Access Publishers), 2012, p. 95-122.
10. E.A. Kotomin, Yu.F. Zhukovskii, D. Bocharov, and D. Gryaznov, *Ab initio* modelling of UN grain boundary interfaces. - IOP Conf. Series: Mater. Sci. Engineering, 2012, 38, 012058 (p. 1-4).

11. N. Zaporina, J. Grabis, M. Maiorov, A. Krumina, G. Heidemane, D. Bocharov, Nanodisperse nickel ferrite: methods of production, structure and magnetic properties, *Latv. J. Chem.*, 2012, No. 1/2, p. 99–104.
12. A. Sorokine, D. Bocharov, S. Piskunov, and V. Kashcheyevs, Electronic charge redistribution in LaAlO_3 (001) thin films deposited at SrTiO_3 (001) substrate: First-principles analysis and the role of stoichiometry. - *Phys. Rev. B*, 2012, 86, 155410 (p. 1-10).
13. D. Bocharov, D. Gryaznov, Yu.F. Zhukovskii, and E.A. Kotomin, *Ab initio* simulations of oxygen interaction with surfaces and interfaces in uranium mononitride. - *J. Nucl. Mater.*, 2013, 435, (p. 102–106).
14. A. Anspoks, D. Bocharov, J. Purans, F. Rocca, A. Sarakovskis, V. Trepakov, A. Dejneka, and M. Itoh, Local structure studies of $\text{SrTi}^{16}\text{O}_3$ and $\text{SrTi}^{18}\text{O}_3$. - *Phys. Scr.*, 2014, 89, 044002 (p. 1-5)
15. S. Piskunov, O. Lisovski, J. Begens, D. Bocharov, Yu.F. Zhukovskii, M. Wessel, and E. Spohr, C-, N-, S-, and Fe-doped TiO_2 and SrTiO_3 nanotubes for visible-light-driven photocatalytic water splitting: Prediction from first principles. - *J. Phys. Chem. C*, 2015, 119, p. 18686–18696.
16. A. Chesnokov, O. Lisovski, D. Bocharov, S. Piskunov, Yu.F. Zhukovskii, M. Wessel, and E. Spohr, *Ab initio* simulations on N and S co-doped titania nanotubes for photocatalytic applications. - *Phys. Scr.*, 2015, 90, 094013 (p.1-7).
17. A. Anspoks, J. Timoshenko, D. Bocharov, J. Purans, F. Rocca, A. Sarakovskis, V. Trepakov, A. Dejneka, and M. Itoh, Local structure studies of Ti for $\text{SrTi}^{16}\text{O}_3$ and $\text{SrTi}^{18}\text{O}_3$ by advanced X-ray absorption spectroscopy data analysis. - *Ferroelectrics*, 485, 2015, p. 42–52.
18. S. Piskunov, P.A. Žgung, D. Bocharov, A. Kuzmin, J. Purans, A. Kalinko, R.A. Evarestov, S.E. Ali, and F. Rocca, Interpretation of unexpected behavior of infrared absorption spectra of ScF_3 beyond the quasiharmonic approximation. - *Phys. Rev. B*, 2016, 93, 214101 (p. 1-9).
19. D. Bocharov, M. Krack, A. Kalinko, J. Purans, F. Rocca, S.E. Ali, and A. Kuzmin, *Ab initio* molecular dynamics simulations of the Sc K-edge EXAFS of scandium trifluoride. - *J. Phys. Conf. Ser.*, 2016, 712, 012009 (p. 1-4).
20. J. Purans, S. Piskunov, D. Bocharov, A. Kalinko, A. Kuzmin, S.E. Ali, and F. Rocca, Local structure of perovskites ReO_3 and ScF_3 with negative thermal expansion: interpretation beyond the quasiharmonic approximation. - *J. Phys. Conf. Ser.*, 2016, 712, 012013 (p. 1-4).
21. D. Bocharov, M. Chollet, M. Krack, J. Bertsch, D. Grolimund, M. Martin, A. Kuzmin, J. Purans, and E.A. Kotomin, Interpretation of the U L_{3} -edge EXAFS in uranium dioxide using molecular dynamics and density functional theory simulations. - *J. Phys. Conf. Ser.*, 2016, 712, 012013 (p. 1-4).
22. D. Bocharov, P. Žgung, S. Piskunov, A. Kuzmin, and J. Purans, Electronic structure of cubic ScF_3 from first-principles calculations. - *Low Temp. Phys.*, 2016, 42, p. 710-715.
23. O. Lisovski, A. Chesnokov, S. Piskunov, D. Bocharov, Yu.F. Zhukovskii, M. Wessel, and E. Spohr, *Ab initio* calculations of doped TiO_2 anatase (101) nanotubes for photocatalytic water splitting applications. - *Mater. Sci. Semicond. Process.* 2016, 42, p. 138-141.
24. Yu.F. Zhukovskii, S. Piskunov, O. Lisovski, A. Chesnokov, and D. Bocharov, First principle evaluation of photocatalytic suitability for TiO_2 -based nanotubes. - Chapter in a book: W. Cao (Ed.) *Semiconductor Photocatalysis - Materials, Mechanisms and Applications* (InTech Open Access Publishers, Croatia), 2016, p. 105-133.
25. D. Bocharov, M. Chollet, M. Krack, J. Bertsch, D. Grolimund, M. Martin, A. Kuzmin, J. Purans, and E.A. Kotomin, Analysis of the U L_{3} -edge X-ray absorption spectra in UO_2 using molecular dynamics simulations. - *Progr. Nucl. Ener.*, 2017, 94, p. 187-193.
26. O. Lisovski, S. Piskunov, Yu.F. Zhukovskii, and D. Bocharov, Quantum chemical simulations of titanium dioxide nanotubes used for photocatalytic water splitting. - *J. Surf. Investigation*, 2017, 11, p. 78–86.

Populārzinātniskas publikācijas

1. V. Fļorovs, A. Cēbers, D. Bočarovs, V. Kaščejevs, D. Docenko, Latvijas 30. atklātā fizikas olimpiāde. – “Zvaigžņotā Debess”, 2005, 190, p. 63-70.
2. A. Petroveca, D. Bočarovs, Neformālās izglītības iespējas fizikā, astronomijā un matemātikā. - “Zvaigžņotā Debess”, 191, p. 68-74.
3. V. Fļorovs, A. Cēbers, D. Bočarovs, V. Kaščejevs, Latvijas 31. atklātā fizikas olimpiāde. – “Zvaigžņotā Debess”, 2006, 194, p. 51-56.

4. V. Fļorovs, A. Cēbers, D. Bočarovs, D. Docenko, V. Kaščejevs, Latvijas 32. atklātā fizikas olimpiāde. – "Zvaigžņotā Debess", 2007, 197, p. 53-58.
5. V. Fļorovs, A. Cēbers, D. Bočarovs, D. Docenko, P. Nazarovs, J. Timošenko, V. Kaščejevs, Latvijas 33. atklātā fizikas olimpiāde. – "Zvaigžņotā Debess", 2008, 202, p. 43-51.
6. V. Fļorovs, A. Cēbers, V. Kaščejevs, D. Bočarovs, D. Docenko, Latvijas 34. atklātā fizikas olimpiāde. – "Zvaigžņotā Debess", 2009, 206, p. 43-48.
7. V. Fļorovs, A. Cēbers, D. Docenko, D. Bočarovs, V. Kaščejevs, Latvijas 35. atklātā fizikas olimpiāde. – "Zvaigžņotā Debess", 2011, 211, p. 40-46.
8. V. Fļorovs, A. Cēbers, D. Bočarovs, J. Timošenko, D. Docenko, and V. Kaščejevs, Latvijas 36. atklātā fizikas olimpiāde. – "Zvaigžņotā Debess", 2011, 214, p. 33-39.
9. V. Fļorovs, D. Docenko, D. Bočarovs, A. Cēbers, Latvijas 37. atklātā fizikas olimpiāde. – "Zvaigžņotā Debess", 2012, 218, p. 45-52.
10. D. Docenko, D. Bočarovs, A. Cēbers, L. Dolgovs, J. Timošenko, Latvijas 38. atklātā fizikas olimpiāde. – "Zvaigžņotā Debess", 2013, 222, p. 45-51.
11. D. Bočarovs, A. Cēbers, J. Timošenko, D. Docenko, Latvijas 39. atklātā fizikas olimpiāde. – "Zvaigžņotā Debess", 2014, 226, p. 37-43.
12. D. Docenko, A. Cēbers, D. Bočarovs, J. Timošenko, Latvijas 40. atklātā fizikas olimpiāde. – "Zvaigžņotā Debess", 2015, 230, p. 42-49.
13. D. Bočarovs, J. Timošenko, D. Docenko, A. Cēbers, A. Katkevičs, Latvijas 41. atklātā fizikas olimpiāde. – "Zvaigžņotā Debess", 2016, 230, p. 41-49.

Mācību kursi:

2007./08. m.g. pārbaudes testa sagatavošana kursam "Struktūra un nanofāzu raksturojums" (LU kursa kods Fizi5028, asistentā amatā kopā ar Dr. A. Kuzminu).

2012./13. m.g.-2013./14. m.g. un no 2015./16. m.g. Augstākā matemātikā (TSI)

2006./07. m.g.-2013./14. m.g. Laboratorijas darba "Rentgenstaru absorbcija" vadīšana "Cietvielu un materiālu fizikas laboratorija" kursa (Fizi5011) ietvaros (LU)

Digitālā prasme

Windows, Linux, MS Office, Mathematica, Origin.

Datoru programmatūra materiālu modelēšanai ķīmijā, fizikā un materiālzinātnē: VASP, Crystal, CP2K, FEFF.