

«УТВЕРЖДАЮ»

И. о. ректора РХТУ им. Д. И. Менделеева,  
д.т.н., проф. И. В. Воробьев



« 29 »

2024 г.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Диссертация на тему: «Квантово-химическое моделирование электронно-механических свойств нанотрубок» по научным специальностям 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ и 1.4.4 Физическая химия на соискание ученой степени кандидата технических наук выполнена на кафедре информационных компьютерных технологий федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева».

В процессе подготовки диссертации Краснов Дмитрий Олегович, «29» октября 1994 года рождения, был аспирантом кафедры информационных компьютерных технологий федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева» с 01.09.2018 г. по 31.08.2022 г. Работает в РХТУ имени Д. И. Менделеева с 2018 года, в настоящее время – на должности главного специалиста отдела разработки и внедрения АИС. С 01.10.2023 г. по 30.09.2024 г. прикреплен на соискание ученой степени кандидата наук без освоения программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре в РХТУ имени Д. И. Менделеева.

Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана в РХТУ им. Д. И. Менделеева в 2024 году.

Научный руководитель – Кольцова Элеонора Моисеевна, д.т.н. по специальности 05.17.08 Процессы и аппараты химических технологий, профессор, заведующий кафедрой информационных компьютерных технологий федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева».

Научный консультант – Дьячков Павел Николаевич, д.х.н. по специальности 02.00.04 Физическая химия, профессор, главный научный сотрудник Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН.

По результатам рассмотрения диссертации на тему: «Квантово-химическое моделирование электронно-механических свойств нанотрубок» принято следующее заключение.

Актуальность темы диссертационной работы обусловлена тем, что посвящена квантово-химическому моделированию электронно-механических

свойств нанотрубок из благородных и цветных металлов. Нанотрубки – очень важные новые наноматериалы, характеристики которых варьируются в некоторых пределах. Миниатюрные размеры, уникальные физико-химические и электронные свойства мотивируют развитие данных исследований, способствуя повышению интереса инженеров и исследователей к нанотрубкам. На основе нанотрубок создают разнообразные электронные устройства вплоть до реализации компьютера, работа которого основана на использовании транзисторов исключительно на углеродных нанотрубках. Нанотрубки можно подвергать механической деформации: скручиванию, растяжению и сжатию вдоль оси, изгибу, сплющиванию. При этом физическими свойствами нанотрубок и работой электронных элементов на их основе можно управлять с помощью механических воздействий за счет изменения формы нанотрубок. Быстрое развитие этой экспериментальной области, называемой наноэлектромеханикой, сильно замедляется из-за недостатка теоретических исследований электромеханических свойств трубок.

Изучение электронных свойств нанотрубок в основном в мировой практике рассматривается применительно к свойствам углеродных нанотрубок. Значительно меньше работ в области изучения электромеханических свойств углеродных нанотрубок, интеркалированных атомами переходных металлов. И практически отсутствуют работы по изучению свойств нанотрубок из благородных и цветных металлов. Теоретическое моделирование электронных и особенно электромеханических свойств данных наноматериалов становится чрезвычайно актуальной задачей.

Научная новизна заключается в следующем: развитии теории квантово-химических расчетов электронных свойств нанотрубок любого состава методом линеаризованных присоединенных цилиндрических волн.

На основе результатов квантово-химического моделирования зонной структуры нанотрубок установлено, что для золотых, серебряных и медных трубок количество каналов баллистического транспорта примерно равно сумме индексов хиральности нанотрубок.

На основе результатов квантово-химического моделирования влияния механических деформаций на электронные свойства нанотрубок установлено, что с помощью деформаций трубок можно управлять электронными свойствами платиновых и палладиевых нанотрубок, регулируя ширину запрещенной зоны в палладиевых трубках и спиновую плотность состояний в платиновых.

Теоретическая и практическая ценность работы состоит в разработке программного комплекса, состоящего из программных модулей, позволяющих проводить квантово-химическое моделирование электронно-механических свойств нанотрубок с учетом спин-орбитального взаимодействия. Полученные результаты расчетов свойств нанотрубок можно использовать при разработке новых способов их применения: золотые, серебряные и медные нанотрубки можно использовать в наноэлектронике в качестве наносолеоидов и излучающих антенн; палладиевые и платиновые нанотрубки – в спинтронике в качестве датчиков.

Диссертационная работа выполнялась в рамках научного проекта РФФИ рамках № 20-30-90215 Аспиранты.

Работа характеризуется логичностью построения, аргументированностью основных научных положений и выводов, а также четкостью изложения.

Основные положения диссертации получили полное отражение в 13 печатных работах, из них 3 в журналах, индексируемых в международных базах данных Web of Science и Scopus. Результаты диссертации представлены на международных и всероссийских конференциях, в том числе на Международных конгрессах молодых ученых по химии и химической технологии МКХТ (Москва, 2023, 2022, 2018 г.), Международной научно-практической конференции «EURASIASCIENCE» (Москва, 2023 г.), Международной научно-практической конференции «Задачи и возможности международного трансфера инновационных технологий» (Калуга, 2023 г.), Конференции молодых ученых по общей и неорганической химии (Москва, 2018 г.).

Получен акт о внедрении результатов диссертационной работы в учебный процесс в РХТУ им. Д.И. Менделеева и подано заявление на получение свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ.

**Публикации, в изданиях, индексируемых в международных базах данных:**

1. D'yachkov P. N., Krasnov D. O. Electronic and transport properties of deformed platinum nanotubes calculated using relativistic linear augmented cylindrical wave method // *Chemical Physics Letters*. 2019. V. 720. P. 15-18. DOI 10.1016/j.cplett.2019.02.006 (*Web of Science, Scopus*)
2. Krasnov D. O., Khoroshavin L. O., D'yachkov P. N. Spin—Orbit Coupling in Single-Walled Gold Nanotubes // *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. 2019. V. 64. P. 108-113. DOI 10.1134/S0036023619010145 (*Scopus*)
3. Khoroshavin L.O., Krasnov D.O., Kol'tsova E.M., et al. Electronic properties of achiral and chiral gold nanotubes // *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. 2017. T. 62. С. 783-789. DOI 10.1134/S0036023617060110 (*Scopus*)

**Публикации, в рецензируемых изданиях:**

1. Краснов Д. О., Кольцова Э. М. Изучение генерации магнитного поля в хиральных медных нанотрубках // *Computational nanotechnology*. 2022. Т. 9. С. 17-21. DOI 10.33693/2313-223X-2022-9-4-17-21 (*ВАК*)
2. Краснов Д. О., Женса А. В., Кольцова Э. М. Магнитные свойства хиральных медных нанотрубок // *Computational nanotechnology*. 2022. Т. 9. С. 68-72. DOI 10.33693/2313-223X-2022-9-3-68-72 (*ВАК*)

**Публичные доклады на международных научных мероприятиях:**

1. Краснов Д. О., Сидоренко Н. В. Электронные свойства хиральных платиновых нанотрубок с учетом спин-орбитального взаимодействия // LVIII Международная научно-практическая конференция “EURASIASCIENCE”. 2023. С. 52-55.
2. Краснов Д. О., Хорошавин Л. О. Моделирование электронных свойств однослойных углеродных нанотрубок с дефектами замещения // Международная научно-практическая конференция «Задачи и возможности международного трансфера инновационных технологий». 2023. С. 143-147.

3. Краснов Д. О. Электронные и транспортные свойства деформированных палладиевых нанотрубок // Успехи в химии и химической технологии. 2023. Т. 37. № 17. С. 46-49.
4. Краснов Д. О., Сидоренко Н. В., Дьячков П. Н., и др. Генерация электромагнитного поля в хиральных медных нанотрубках // Успехи в химии и химической технологии. 2023. Т. 37. № 4. С. 109-111.
5. Краснов Д. О., Кольцова Э. М. Электронные свойства золотых и серебряных нанотрубок // Успехи в химии и химической технологии. 2022. Т. 36. № 11. С. 60-63.
6. Краснов Д. О. Изучение спинзависимой электронной структуры золотых нанотрубок // VIII Конференция Молодых Ученых по Общей и Неорганической Химии. 2018. С. 142-143.
7. Краснов Д. О., Дьячков П. Н., Кольцова Э. М. Программный комплекс для расчета электронного строения нанотрубок из благородных металлов с учетом спин-орбитального взаимодействия // Успехи в химии и химической технологии. 2018. Т. 32. № 11. С. 27-29.
8. Хорошавин Л. О., Краснов Д. О., Дьячков П. Н. и др. Программный комплекс для моделирования электронных свойств однослойных нанотрубок // Успехи в химии и химической технологии. 2016. Т. 30. № 4. С. 33-35.

По тематике, методам исследования, предложенным новым научным положениям диссертация соответствует паспорту специальности научных работников 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ в части:

Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий.

Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента.

Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента.

Постановка и проведение численных экспериментов, статистический анализ их результатов, в том числе с применением современных компьютерных технологий.

По тематике, методам исследования, предложенным новым научным положениям диссертация соответствует паспорту специальности научных работников 1.4.4 Физическая химия в части:

Изучение физико-химических свойств изолированных молекул и молекулярных соединений при воздействии на них внешних электромагнитных полей, потока заряженных частиц, а также экстремально высоких/низких температурах и давлениях

Создание и разработка методов компьютерного моделирования строения и механизмов превращения химических соединений на основе представлений квантовой механики, различных топологических и статических методов, включая

методы машинного обучения, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойство.

Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об элементарной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, 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.

Автореферат отражает основное содержание диссертации.

Диссертация Краснова Дмитрия Олеговича является завершенной научно-квалификационной работой, содержащей результаты, полученные на основании исследований, проведенных на высоком научном и техническом уровне с применением современных методов исследования. Научные положения, выводы и рекомендации, сформулированные автором, теоретически обоснованы и не вызывают сомнений. Представленные в работе результаты принадлежат Краснову Дмитрию Олеговичу; они оригинальны, достоверны и отличаются научной новизной и практической значимостью.

С учетом научной зрелости автора, актуальности, научной новизны и практической значимости работы, а также ее соответствия требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева», предъявляемым к подобным работам, диссертация на тему: «Квантово-химическое моделирование электронно-механических свойств нанотрубок» рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата технических наук по научным специальностям 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ и 1.4.4 Физическая химия.

Диссертация рассмотрена на расширенном заседании кафедры информационных компьютерных технологий федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева», состоявшемся «28» мая 2024 года, протокол № 16. В обсуждении приняли участие: д.т.н., проф. Кольцова Э. М., д.х.н., проф. Межуев Я. О., д.т.н., проф. Глебов М. Б., д.ф.-м.н., проф. Цирельсон В. Г., к.т.н., доц. Василенко В. А., к.т.н., доц. Женса А. В., к.т.н., доц. Митричев И. И., к.т.н., доц. Семенов Г. Н., ст. преп. Васецкий А. М., к.т.н., доц. Зубов Д. В.

Принимало участие в голосовании 16 человек. Результаты голосования: «За» – 16 человек, «Против» – 0 человек, воздержались – 0 человек, протокол № 16 от «28» мая 2024 г.

Председатель заседания  
к.т.н., доцент кафедры ИКТ

А.В. Женса

Секретарь заседания  
к.т.н., доцент кафедры ИКТ

Е.Б. Филиппова

# ПРОТОКОЛ

расширенного заседания  
кафедры информационных компьютерных технологий  
РХТУ им. Д. И. Менделеева  
от «28» мая 2024 г. № 16

Присутствовали:

От кафедры информационных компьютерных технологий:

1. Зав.каф. ИКТ, д.т.н., проф. Кольцова Элеонора Моисеевна,
2. Доцент каф. ИКТ, к.т.н., доц. Василенко Виолетта Анатольевна,
3. Доцент каф. ИКТ, к.т.н., доц. Женса Андрей Вячеславович,
4. Доцент каф. ИКТ, к.т.н., доц. Митричев Иван Игоревич,
5. Доцент каф. ИКТ, к.т.н., доц. Зубов Дмитрий Владимирович,
6. Доцент каф. ИКТ, к.т.н., доц. Семенов Геннадий Николаевич,
7. Доцент каф. ИКТ, к.т.н., доц. Филиппова Елена Борисовна,
8. Старший преподаватель каф. ИКТ, к.т.н. Шанева Анна Сергеевна,
9. Старший преподаватель каф. ИКТ Васецкий Алексей Михайлович,
10. Старший преподаватель каф. ИКТ Пысин Максим Дмитриевич,
11. Ассистент каф. ИКТ Лебедев Данила Александрович,
12. Ассистент каф. ИКТ Лобанов Алексей Владимирович,
13. Ассистент каф. ИКТ Крашенинников Роман Сергеевич,
14. Ассистент каф. ИКТ Миронова Екатерина Александровна.

От диссертационного совета РХТУ.1.4.02 (физическая химия):

15. Зав.каф. биоматериалов, д.х.н., проф. Межуев Ярослав Олегович,
16. Зав.каф. квантовой химии, д.ф.-м.н., проф. Цирельсон Владимир Григорьевич.

От кафедры кибернетики химико-технологических процессов:

17. Зав.каф. КХТП, д.т.н., проф. Глебов Михаил Борисович.

Также присутствовал научный консультант диссертационной работы Краснова Дмитрия Олеговича:

18. Глав. науч. сотр. лаборатории квантовой химии ИОНХ РАН им. Н.С. Курнакова, д.х.н., проф., Дьячков Павел Николаевич.

Всего присутствовало: 18 человек.

## ПОВЕСТКА ДНЯ

Предварительное рассмотрение диссертационной работы Краснова Дмитрия Олеговича, соискателя кафедры информационных компьютерных технологий РХТУ им. Д. И. Менделеева на тему: «Квантово-химическое моделирование электронно-механических свойств нанотрубок».

Работа выполнена на кафедре информационных компьютерных технологий федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева».

Тема диссертационной работы Краснова Дмитрия Олеговича и научный руководитель д.т.н., проф., заведующий кафедрой ИКТ Кольцова Э.М. утверждены на заседании Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 4 октября 2023 г, протокол № 5. Научный консультант д.х.н., проф., главный научный сотрудник лаборатории квантовой химии ФГБУН РАН «Институт общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова» Дьячков П.Н. утвержден приказом и. о. ректора от 27 мая 2024 г № 992 ст.

**СЛУШАЛИ:**

Сообщение Краснова Дмитрия Олеговича, изложившего основное содержание своей диссертационной работы на тему: «Квантово-химическое моделирование электронно-механических свойств нанотрубок», представляемой на соискание ученой степени кандидата технических наук по научным специальностям 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ и 1.4.4 Физическая химия.

Краснову Дмитрию Олеговичу были заданы следующие вопросы:

**д.т.н., проф. Глебов М. Б.:**

1. Что является предметом моделирования – атомы или нанотрубки? Если нанотрубки, то тогда, как учитывались атомы?
2. Сколько в расчете бралось элементарных ячеек? Какова реальная длина рассчитанных нанотрубок?
3. Как меняются магнитные поля во времени? Как учитывается намагниченность нанотрубки при расчете уравнения Шредингера?

**к.т.н., доц. Митричев И.И.:**

1. Продемонстрирована зависимость частоты колебания электромагнитного поля от радиуса нанотрубок. Зачем и почему выбраны именно указанные трубки для демонстрации зависимости? Только радиус нанотрубки влияет на частоту колебаний электромагнитного поля? Или другие параметры геометрии тоже?
2. Продемонстрированы теоретические расчеты встраивания цепочек атомов в полость нанотрубок. Можно ли практически это осуществить? Как такие нанотрубки можно создать?
3. Точка, которая выбивается из общей картины на графике – это ошибка? Почему она так «выбивается» из графика? Может именно она несет важную информацию?

**к.т.н., доц. Женса А.В.:**

1. Что делает программный комплекс? Сколько строк кода и его объем? Что конкретно сделано вами?
2. Какие выводы были сделаны по работе? Даете ли вы какие-то рекомендации экспериментаторам?

**ст. преп. Васецкий А.М.:**

1. Медная нанотрубка (10, 8) демонстрирует значение магнитного поля в 7 раз меньше, чем медная трубка (10, 7), хотя количество каналов проводимости у нее больше. С чем это связано?

**д.т.н., проф. Кольцова Э.М.:**

1. Продемонстрируйте уравнение Шредингера и его решение в различных областях нанотрубки.
2. Как называется рассчитанный потенциал? Кто автор теории метода линеаризованных присоединенных плоских волн?
3. Чем метод линеаризованных присоединенных цилиндрических волн лучше метода линеаризованных присоединенных плоских волн?
4. Сколько базисных функций при решении уравнения Шредингера методом линеаризованных присоединенных плоских волн? А в методе линеаризованных присоединенных цилиндрических волн?
5. Как вычисляется количество каналов баллистического транспорта при расчетах силы магнитного поля в хиральных нанотрубках?
6. Как можно использовать полученные результаты? Какие существуют примеры использования нанотрубок из цветных и благородных металлов?
7. Что было сделано в области моделирования свойств нанотрубок? Что из этого новое? Какова практическая значимость?

**к.т.н., доц. Зубов Д. В.:**

1. Что такое матричный гамильтониан? Расскажите о физическом смысле элементов матричного гамильтониана.

**к.т.н., доц. Василенко В. А.:**

2. Программный комплекс умеет предсказывать свойства нанотрубок? Проводилось ли сравнение с экспериментальными данными?

**к.т.н., доц. Семенов Г. Н.:**

1. Из каких модулей состоит программный комплекс и что он включает в себя?
2. На сколько удобно стало пользоваться новым программным комплексом?
3. Расскажите о численных характеристиках расчетов разных нанотрубок. Как изменились эти показатели по сравнению с предыдущей версией программного комплекса?
4. Есть ли возможность распараллелить программу для ускорения расчетов?

**д.ф.-м.н., проф. Цирельсон В. Г.:**

1. Что такое линеаризация в названии метода? Что такое спин-орбитальное взаимодействие?
2. Как называется функция расчета потенциала? Как рассчитывается электронная плотность?

Также им было сделано множество замечаний по представлению доклада:

- Необходимо переработать список задач и укрупнить их.
- Добавить описание радиальной задачи. Укрупнить блок схемы на слайдах 7-10.
- На 11, 12, 19, 22 слайдах необходимо добавить легенды к графикам.
- На 13-15, 24, 25 слайдах необходимо привести сравнение с экспериментальными данными.
- На слайде 14 сделать акцент на том, к чему приводит ускорение расчетов.
- На слайде 18 необходимо сделать акцент на результатах расчета магнитных полей в хиральных трубках.

- На слайде 28 необходимо объяснить для чего предназначены углеродные нанотрубки интеркалированные атомами переходных металлов.
- На слайде 29 необходимо выделить в таблице важные значения и сделать промежуточные выводы.
- На слайдах 30, 31 необходимо переработать и укрупнить выводы по работе.

В обсуждении приняли участие: д.т.н., проф. Кольцова Э. М., д.ф.-м.н., проф. Цирельсон В. Г., д.х.н., проф. Межуев Я. О., д.т.н., проф. Глебов М. Б., д.х.н., проф., Дьячков П. Н., к.т.н., доц. Василенко В. А., к.т.н., доц. Женса А. В., к.т.н., доц. Митричев И. И., к.т.н., доц. Семенов Г. Н., ст. преп. Васецкий А. М., к.т.н., доц. Зубов Д. В.

**ПОСТАНОВИЛИ:**

Заслушав и обсудив диссертационную работу Краснова Дмитрия Олеговича полностью принять следующее заключение организации по диссертации на тему «Квантово-химическое моделирование электронно-механических свойств нанотрубок».

Председатель заседания  
к.т.н., доцент кафедры ИКТ

А.В. Женса

Секретарь заседания  
к.т.н., доцент кафедры ИКТ

Е.Б. Филиппова