

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Краснова Дмитрия Олеговича
«Квантово-химическое моделирование электронно-механических свойств нанотрубок» по специальностям 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ и 1.4.4. Физическая химия, представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук

Актуальность темы диссертационной работы Краснова Дмитрия Олеговича обусловлена необходимостью анализа структуры и свойств новых наноматериалов, обладающих набором свойств, необходимых для создания на их основе наноустройств, применяемых в электронике, при разработке различных сенсоров, оптических устройств и т. п. Потенциал использования углеродных нанотрубок в нанотехнологиях достаточно подробно обсуждался в литературе, однако недавний синтез нанотрубок из цветных и благородных металлов открыл новые возможности и новые проблемы в изучении их электронных и механических свойств. Решению этой актуальной проблемы как раз и посвящена диссертационная работа Краснова Д.О.

В представленной работе используется метод линейаризованных присоединенных цилиндрических волн, позволяющий рассчитывать и предсказывать электронно-механические свойства металлических нанотрубок. Данный метод был адаптирован автором для решения поставленных задач путем модернизации алгоритмов и программных комплексов, разработанных ранее для углеродных нанотрубок.

В результате проделанной работы были получены новые результаты, среди которых выделим следующие:

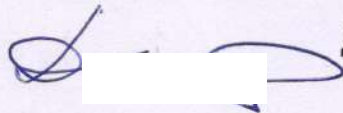
Для золотых, серебряных и медных нанотрубок показано, что количество каналов баллистического транспорта равно сумме индексов хиральности нанотрубок. Показано, что спин-орбитальное взаимодействие проявляется в виде расщепления нерелятивистских дисперсионных кривых; оно убывает с увеличением радиуса нанотрубок и при переходе к внутренним состояниям валентной зоны. Упругая деформация нанотрубок влияет на электронные свойства платиновых и палладиевых нанотрубок. Продемонстрирована возможность создания больших полей с помощью наносоленоидов из хиральных нанотрубок. Установлено, что частоты низкоэнергетических собственных колебаний электромагнитного поля лежат в рентгеновском диапазоне.

Все результаты автора, выносимые на защиту, получены впервые, опубликованы в известных научных журналах, прошли апробацию на конференциях.

Автореферат содержит исчерпывающую информацию о диссертационной работе, публикациях по теме диссертации и другие необходимые сведения.

Работа выполнена на стыке двух специальностей 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ и 1.4.4. Физическая химия и соответствует ряду пунктов паспортов этих специальностей.

Резюмируя, можно сказать, что тема диссертационной работы актуальна, диссертация вносит вклад в активно развивающуюся область изучения новых наноматериалов и их электронных свойств. Считаю, что диссертация Краснова Дмитрия Олеговича «Квантово-химическое моделирование электронно-механических свойств нанотрубок» удовлетворяет всем требованиям Положения о присуждении ученых степеней «Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева», предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата технических наук, а ее автор, без сомнения, заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальностям 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ и 1.4.4. Физическая химия.



Дмитриев Сергей Владимирович

Доктор физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния, профессор, главный научный сотрудник лаборатории «Нелинейная физика и механика материалов» ФГБУН «Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук» (адрес: 450001, РБ, г. Уфа, ул. Степана Халтурина 39, телефон: +7 (347) 223-64-07, E-mail: dmitriev.sergey.v@gmail.com, <https://www.imsp.ru/>).

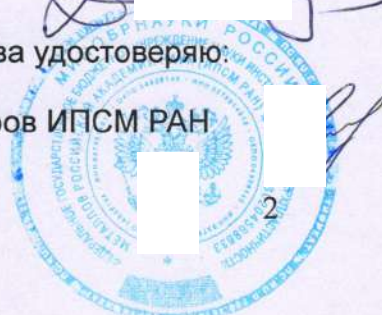
Я, Дмитриев Сергей Владимирович, даю согласие на обработку моих персональных данных, связанную с защитой диссертации и оформлением аттестационного дела Д.О. Краснова.



Дмитриев Сергей Владимирович

Подпись С.В. Дмитриева удостоверяю:

Начальник отдела кадров ИПСМ РАН



Т.П. Соседкина