

ОТЗЫВ

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

Диссертационная работа Краснова Д.О. посвящена разработке программных модулей и проведению расчетов электронных и электромагнитных свойств нанотрубок из благородных и цветных металлов. Актуальность работы связана с уникальными физико-химическими характеристиками исследуемых объектов, а именно неуглеродных нанотрубок, которые в настоящее время являются активным предметом исследований, в частности благодаря широким перспективам применения в приложениях электроники и наноэлектроники. Золотые, серебряные и медные нанотрубки, изученные в диссертации, могут в дальнейшем использоваться в качестве наносолеоидов и излучающих антенн. В работе разработан программный комплекс, который предназначен для проведения квантово-химического моделирования электронно-механических характеристик отдельных нанотрубок с учетом спин-орбитального взаимодействия, а также описания более сложных нанообъектов, таких как нанотрубки с внедренными нанопроводами и деформированные нанотрубки.

К положительным качествам диссертационной работы следует отнести подробное изложение использованного метода расчета и алгоритмов, применение современных технологий вычислений (хэш-таблиц) для ускорения процессов моделирования. Автор в достаточной мере владеет терминологией предметной области, работа хорошо структурирована, получены новые и актуальные результаты, которые опубликованы в пяти статьях в рецензируемых изданиях, три из которых входят в наукометрические базы Scopus/WoS. Достоверность полученных результатов подтверждается применением методов компьютерного моделирования с адекватным выбором уровня теории для решаемых задач, сравнением с результатами независимых работ, а также с экспериментальными данными там, где это возможно.

Представленная работа содержит ряд недостатков. Например, в автореферате не представлены данные анализа сходимости результатов вычислений по числу выбранных k -точек и энергии отсечки, а также ни приводится оценка погрешности метода в сравнении с

известными литературными данными. Тем не менее, указанные замечания не снижают общей положительной оценки работы.

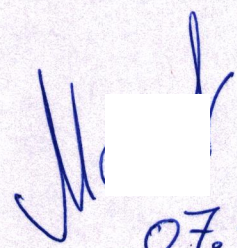
На основании вышеизложенного, считаю, что диссертационная работа Краснова Д.О. обладает актуальностью, новизной и практической значимостью, отвечает требованиям, предусмотренным Положением о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», а ее автор Краснов Дмитрий Олегович заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по научным специальностям 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (технические науки), 1.4.4 – Физическая химия (технические науки).

Доктор физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, доцент, профессор кафедры физики конденсированных сред института нанотехнологий в электронике, спинтронике и фотонике ФГАОУ ВО Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ» (НИЯУ МИФИ), адрес: 115409, г. Москва, Каширское шоссе, 31

E-mail: Mike.Maslov@gmail.com; MMMaslov@mephi.ru

тел.: +7 (495) 788-56-99

Маслов Михаил Михайлович


07.11.2022

Подпись удостоверяю
Начальник отдела документационного
обеспечения НИЯУ МИФИ
_____ О.П. Нейко

