

Отзыв

на автореферат диссертации Краснова Дмитрия Олеговича «Квантово-химическое моделирование электронно-механических свойств нанотрубок», представленной к защите на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ;

1.4.4. – Физическая химия

Диссертация Д. О. Краснова посвящена квантово-механическому моделированию электронно-механических свойств нанотрубок из благородных и цветных металлов. Значительная часть исследований в мировой литературе посвящена свойствам углеродных нанотрубок. Существенно меньше работ по неуглеродным нанотрубкам, однако нанотрубки из благородных и цветных металлов представляет собой интерес для наноэлектроники. Систематические работы по теоретическим исследованиям электромеханических свойств неуглеродных нанотрубок представлены слабо. Полученные в рамках представленной диссертации результаты расчетов свойств нанотрубок можно использовать при разработке новых способов их применения, например, в наноэлектронике в качестве наносоленоидов и излучающих антенн; в спинтронике в качестве датчиков и др., что **обуславливает актуальность** проведенного исследования.

В диссертации Д. О. Краснов использовал и развил метод линеаризованных присоединенных цилиндрических волн, предложенный П. Н. Дьячковым. Соискателем разработан программный комплекс, состоящий из программных модулей, позволяющий проводить квантово-химическое моделирование электронно-механических свойств нанотрубок с учетом спин-орбитального взаимодействия.

Результаты расчетов рассмотренных автором систем из неуглеродных нанотрубок **обладают новизной**. Так Д. О. Краснов в своей работе установил, что для золотых, серебряных и медных нанотрубок количество каналов баллистического транспорта равно сумме индексов хиральности нанотрубок, а спин-орбитальное взаимодействие проявляется в виде расщепления нерелятивистских дисперсионных кривых, которое убывает при переходе к внутренним состояниям валентной зоны и нанотрубкам большего радиуса. В результате продемонстрировано, что с помощью

механических деформаций нанотрубок можно управлять электронными свойствами платиновых и палладиевых трубок, регулируя ширину запрещенной зоны в палладиевых трубках и спиновую плотность состояний в платиновых нанотрубках. Показано, что очень большие поля могут быть реализованы в нанобъемах с помощью наносолеоидов из хиральных нанотрубок, а частоты низкоэнергетических собственных колебаний электромагнитного поля зависят от радиуса нанотрубок и лежат в рентгеновском диапазоне.

Диссертационная работа выполнена на высоком уровне с использованием современных информационных технологий. Результаты исследования представлены на Российских и международных конференциях. Основное содержание диссертации опубликовано в 10 научных работах, в том числе 3 статьи в изданиях, индексируемых в международных базах данных Web of Science и Scopus, и 2 статьи в журнале из перечня ВАК. 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 программного средства.

После ознакомления с авторефератом диссертации возникли следующие вопросы и замечания:

1. Вряд ли стоит рассматривать отдельной задачей диссертационного исследования задачу «изучить способы ускорения квантохимического моделирования»
2. Автором рассчитаны значения плотностей состояний на уровне Ферми в углеродных нанотрубках, интеркалированных переходными металлами из ряда 3d-металлов. Можно ли из имеющихся данных сформулировать закономерности изменения свойств, исходя из периодичности изменения свойств катионов?
3. Как может повлиять изгиб нанотрубки, интеркалированной нанопроводами, на величину электропроводности?
4. А автореферате встречаются опечатки, например, «квантохимического».

Вопросы и замечания носят уточняющий характер и не влияют на общую высокую оценку работы. Содержание автореферата соответствует опубликованным работам.

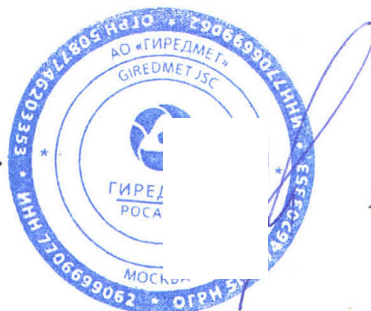
Считаю, что по объему, новизне, актуальности и степени проработанности исследования диссертация Д. О. Краснова «Квантово-химическое моделирование электронно-механических свойств нанотрубок» **соответствует требованиям**, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, предусмотренным Положением о порядке присуждения ученых степеней в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», утвержденным приказом и.о. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.09.2023 г № 103ОД, а ее автор Дмитрий Олегович Краснов **заслуживает** присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальностям 1.2.2 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ; 1.4.4. – физическая химия.

Начальник управления материалов и технологий четвертого энергетического перехода АО «Гиредмет»
имени Н. П. Сажина,
д-р хим. наук, доцент

Максим Васильевич Ананьев

Москва, 111524,
ул. Электродная, д. 2, стр. 1
Тел.: +7(495) 708-44-66
E-mail: MVaAnanyev@rosatom.ru

01.11.2024
Подпись М. В. Ананьева заверяю.
Директор АО «Гиредмет»
имени Н. П. Сажина



Андрей Иванович Голиней