

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).

Тема диссертационной работы, выполненной Красновым Д.О., является актуальной в связи с тем, что расчет свойств нанотрубок становится все более важным из-за их уникальных физических, химических и электронных характеристик. Эти материалы обладают потенциалом для создания различных электронных устройств, включая компьютеры на основе углеродных нанотрубок. Одной из ключевых задач является изучение электромеханических свойств нанотрубок, так как механическое воздействие может изменять их поведение. Исследования также распространяются на неуглеродные нанотрубки, что делает теоретическое моделирование еще более важным.

Из автореферата видно, что диссертационная работа содержит элементы новизны, заключающиеся в развитии теории квантохимических расчетов электронных свойств нанотрубок любого состава методом линеаризованных присоединенных цилиндрических волн. Этот метод использует базис линеаризованных присоединенных цилиндрических волн, которые представляют собой комбинацию цилиндрических волн, распространяющихся вдоль оси нанотрубки, и линеаризованных атомных орбиталей с центрами на атомах. Этот базис позволяет учитывать симметрию нанотрубок и значительно упрощает вычисления, поэтому данный метод применим к нанотрубкам любого состава, включая трубки на основе соединений переходных металлов.

Из автореферата следует и практическая значимость работы, заключающаяся в получении результатов расчетов свойств нанотрубок, которые можно использовать при разработке новых способов их применения: золотые, серебряные и медные нанотрубки предположительно можно использовать в нанoeлектронике в качестве

наносоленоидов и излучающих антенн; палладиевые и платиновые нанотрубки – в спинтронике в качестве датчиков.

Замечания.

Однако по автореферату имеются следующие замечания:

- 1) в автореферате не представлено сравнение полученных результатов квантово-механических расчетов с экспериментальными или теоретическими исследованиями;
- 2) в автореферате указано, что число каналов баллистического транспорта равно сумме индексов хиральности нанотрубки и что это согласуется с экспериментальными данными, но не приведены реальные экспериментальные значения и точность результатов сравнения.

Несмотря на приведенные замечания в целом автореферат дает представление о диссертационной работе. Из списка опубликованных работ, приведенного в автореферате, следует, что данная диссертационная работа прошла апробацию. Видно, что работа сделана на хорошем научном уровне, автореферат отвечает требованиям, предъявляемым к выполнению и оформлению диссертационной работы, а диссертант Д.О. Краснов заслуживает присвоения ему 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).

Главный научный сотрудник,
заведующий лабораторией механики
многофазных систем,
доктор физико-математических наук,
профессор

Урманчиев Саид Федорович

01.11.2024

Институт механики им. Р.Р. Мавлютова – обособленное структурное подразделение
Федерального государственного бюджетного научного учреждения
Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук
450054, г. Уфа, Проспект Октября, д. 71
E-mail: said52@mail.ru

Подпись Урманчиева С.Ф. заверяю:

И.о. директора ИМех УФИЦ РАН

канд. физ.-мат. наук, доцент Галимзянов М.Н.

