

## 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) и 1.4.4. Физическая химия (технические науки)

Объектами исследования являются нанотрубки широкого класса из благородных и цветных металлов. Сам выбор таких объектов является актуальным в связи с возрастающим интересом к их изучению.

Практическая значимость заключается в том, что был разработан программный комплекс, позволяющий проводить квантово-химическое моделирование электронно-механических свойств нанотрубок с учетом спин-орбитального взаимодействия.

В автореферате представлены результаты большого объема теоретических исследований, связанных с изучением свойств нанотрубок. Было определено влияние спин-орбитального взаимодействия на электронное строение нанотрубок; влияние механических деформаций на электронные свойства платиновых и палладиевых трубок; электронный и спиновый транспорт в хиральных нанотрубках из благородных металлов.

Достоверность и обоснованность проведенных научных исследований обеспечивается целостным, комплексным подходом, адекватностью методов исследования, апробацией математических моделей. По результатам исследования опубликовано достаточное количество печатных работ и получено 1 свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ.

По автореферату имеются следующие замечания:

1) одна из задач диссертационной работы включает пункт *«изучить способы ускорения квантово-химического моделирования»*, однако, в автореферате не указано какие способы ускорения были рассмотрены и в чем их отличия;

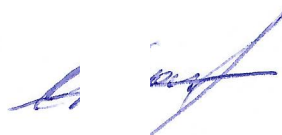
2) указано, что *«разработан программный комплекс, состоящий из программных модулей, позволяющий проводить квантово-химическое моделирование электронно-механических свойств нанотрубок с учетом спин-орбитального взаимодействия»*, однако, не указано какой язык программирования и программные технологии при этом использовались.

Отмеченные недостатки не снижают впечатления от проделанной диссертантом работы, выполненной на хорошем научно-техническом уровне.

Исходя из текста автореферата, считаю, что по актуальности, новизне исследований, достоверности результатов, их практической значимости диссертация Краснова О.Д. на тему «Развитие научных основ процесса капсулирования дисперсных материалов» соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям (п. 2.1 – 2.9 Положения о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном

образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», утвержденного приказом и. о. ректора от 14.09.2023 г. № 103ОД с изменениями от 15.04.2024 г. № 27ОД), а также паспортам специальностей 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (технические науки) и 1.4.4. Физическая химия (технические науки), а её автор, Краснов Олег Дмитриевич, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата технических наук по указанным специальностям.

Первый заместитель руководителя,  
Курчатовского комплекса  
химических исследований (ИРЕА) по научной работе,  
доктор технических наук, доцент



Макаренков  
Дмитрий Анатольевич  
тел.: +7 (495) 9637070  
e-mail: makarenkovd@mail.ru

Подпись Д.А. Макаренкова заверяю

Главный Ученый секретарь  
НИЦ «Курчатовский институт»



Борисов  
Кирилл Евгеньевич

Адрес НИЦ «Курчатовский институт»  
123182, Москва, пл. Академика Курчатова, 1  
e-mail: nrcki@nrcki.ru  
<http://www.nrcki.ru>

29.10.2024