

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).

Актуальность темы «Квантово-химическое моделирование электронно-механических свойств нанотрубок», рассматриваемой Красновым Д.О., заключается в их уникальных свойствах, которые могут быть использованы в передовых технологиях, таких как наноэлектромеханика и электроника. Особый интерес представляют углеродные нанотрубки, которые применяются для создания транзисторов и других электронных элементов. Механическое воздействие на нанотрубки открывает новые возможности для управления их свойствами. Изучение неуглеродных наноматериалов также расширяет перспективы их применения, что подчеркивает важность теоретического расчета электромеханических свойств. К новизне работы можно отнести осуществление расчетов магнитных и электромагнитных полей в хиральных нанотрубках из цветных и благородных металлов.

Диссертационная работа не только содержит новизну, но и является практически значимой. Разработан программный комплекс, состоящий из программных модулей, позволяющий проводить квантово-химическое моделирование электронно-механических свойств нанотрубок с учетом спин-орбитального взаимодействия.

Достоверность и обоснованность проведенных научных исследований обеспечивается целостным, комплексным подходом, адекватностью методов исследования. По результатам работы сделано достаточное количество публикаций и получено 1 свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ.

По автореферату есть замечание:

В рамках описания методики расчета указывается, что количество базисных функций сильно влияет на время моделирования, но не указана конкретная степень влияния базисных функций на производительность. Также не указано влияние количества базисных функций на результаты квантово-механического расчета нанотрубок.

Указанное замечание не снижает общей положительной оценки представленной для рецензии работы. Содержание автореферата свидетельствует о том, что диссертация Краснова Д.О. является целостной научно-квалификационной работой, имеющей актуальность, научную новизну и практическую значимость. Работа 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 Д.О. 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).

Заместитель директора по науке,
доктор технических наук, профессор

Б.О.

30.10.2024

Бессарабов Аркадий Маркович

АО Научный центр "Малотоннажная химия"
107564, г. Москва, ул. Краснобогатырская, д. 42
E-mail: bessarabov@nc-mtc.ru
Тел.: +7 (495) 983-5888

