

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., определена острой потребностью в систематических теоретических исследованиях свойств активно синтезируемых в настоящее время неуглеродных нанотрубок, использование которых охватывает разнообразные высокотехнологичные области, включая компьютерные и информационные технологии.

Автореферат содержит результаты теоретических исследований электронных и электронно-механических свойств нанотрубок из благородных и цветных металлов: золотых, серебряных, платиновых, палладиевых и медных; а также электронных свойств углеродной нанотрубки (10, 0), внутренняя область которой заполнена переходными металлами. Автором диссертационного исследования осуществлена переработка программного комплекса расчетов электронно-механических свойств на язык C++ с использованием алгоритмов стандартной библиотеки. Разработанное математическое описание алгоритма проведения расчетов позволило выполнить оптимизацию программного алгоритма и уменьшить время расчета.

Для выполнения расчета зонных структур используется предложенное Джоном Слэтером приближение, согласно которому можно разделить пространство кристалла на межатомные области и области атомов. При этом для отыскания волновой функции системы используется оригинальный метод

линеаризованных присоединенных цилиндрических волн, который обеспечивает быструю сходимость в случае нанотрубок. Сочетание этих подходов было положено в основу разработанного программного алгоритма и позволяет рассчитывать на приемлемый уровень ошибки.

По результатам математического моделирования и оптимизации проведено отнесение исследуемых нанотрубок металлов к конкретным типам электронного строения – золотые, серебряные и медные нанотрубки имеют металлический тип строения, палладиевые трубки проявляют полупроводниковые свойства, а платиновые нанотрубки полуметаллические. Показано, что можно управлять электронными свойствами платиновых и палладиевых нанотрубок с помощью механических деформаций – это может быть использовано для датчиков давления и силы в спинтронике. Получены закономерности, которые имеют важное значение для понимания поведения исследуемых нанотрубок как излучающих систем. Показано, что для получения нанопроводов с высокой проводимостью в качестве интеркалята лучше всего использовать Ti или Mn, в зависимости от количества атомов в поперечном сечении.

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.

Автореферат оставляет благоприятное общее впечатление, хотя и не лишен некоторых опечаток и сложных для восприятия предложений. Одной из наиболее досадных опечаток является приведенное в первом абзаце на пятой странице утверждение, что «Электронное строение молекулы, согласно положениям квантовой механики, можно определить из ее *одноэлектронной* волновой функции ψ_n .»

Указанные замечания не снижают общей положительной оценки представленной 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).

31.10.2024

доктор химических наук (1.4.3 – органическая химия, 1.4.4 – физическая химия), профессор,
заведующая лабораторией квантовой химии ФГБОУ ВО «ИГУ»



/Витковская Надежда Моисеевна /

кандидат химических наук (1.4.4 – физическая химия),
заведующий лабораторией квантовохимического моделирования
молекулярных систем ФГБОУ ВО «ИГУ»



/Орел Владимир Борисович /

Федеральное государственное образовательное учреждение высшего образования «Иркутский государственный университет»

Почтовый адрес: 664003, г. Иркутск, ул. Карла Маркса, д.1, ИГУ

E-mail: vita@cc.isu.ru, orelv@isu.ru

Телефон: +7 (3952) 52-12-11

