

## 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., не вызывает сомнений. На основе нанотрубок работают разнообразные электронные устройства. Для создания нанотрубок и объяснения их свойств необходимо проводить рассмотрение электронного строения нанотрубок методами квантовой химии.

Разработанное математическое описание представляет собой комплекс сложных уравнений с хорошо обоснованным физико-химическим смыслом. Представленный математический аппарат соответствует мировому уровню квантово-химических исследований. Обращает на себя внимание оптимизация времени расчётов при разработке математического аппарата и программного обеспечения, что позволяет проводить расчёты для больших систем таких, как нанотрубки.

Автореферат содержит результаты теоретических исследований нанотрубок из благородных металлов (золото, медь, серебро, платина, палладий) и углеродных нанотрубок, интеркалированных атомами различных переходных металлов.

По результатам математического моделирования и оптимизации установлены зависимости между геометрией, электронным транспортом и магнитными полями, возникающими при воздействии постоянного электрического тока. Определены металлы, чья интеркаляция в углеродную нанотрубку обеспечивает, наиболее высокую электропроводимость.

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.

Замечаний к представленной для рецензии работе нет. 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).

Должность  
Организация  
Доктор химических наук  
Главный научный сотрудник  
НИЛ Компьютерного моделирования  
лекарственных средств им. Потёмкина  
В.А.  
ФГАОУ ВО «Южно- Уральский  
Государственный Университет (НИУ)»

ФИО

Гришина Мария Александровна

5.11.2024

Подпись Гришина М.А. удостоверяю  
Начальник управления  
по работе с кадрами  
Минакова

