

## 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., обусловлена рядом факторов, связанных с уникальными характеристиками и широким спектром применений этих наноматериалов. Нанотрубки, особенно углеродные, обладают выдающимися механическими, электрическими и тепловыми свойствами. Они прочнее стали, легче и обладают высокой электропроводностью, что делает их перспективными материалами для использования во множестве отраслей. Благодаря своим проводящим и полупроводниковым свойствам нанотрубки могут использоваться для создания миниатюрных электронных компонентов, транзисторов и сенсоров, что особенно важно в условиях миниатюризации электроприборов. Изучение свойств нанотрубок экспериментальными методами может быть трудоёмким и дорогостоящим. Компьютерное моделирование позволяет значительно упростить и ускорить процесс, делая его более доступным и гибким для исследований. Моделирование позволяет прогнозировать поведение нанотрубок в различных условиях и оптимизировать их структуру для конкретных задач, что является важным этапом в разработке новых материалов и способов их применения. Таким образом, компьютерное моделирование свойств нанотрубок имеет высокую научную и практическую ценность, способствуя развитию инновационных технологий в различных областях, таких как электроника, медицина и энергетика.

Практическая значимость диссертационной работы Краснова Д.О. заключается в разработке программного комплекса, который позволяет проводить квантово-химическое моделирование электронно-механических свойств нанотрубок любого состава с учетом спин-орбитального взаимодействия.

В автореферате диссертанта представлены результаты кванто-химического моделирования электронно-механических свойств нанотрубок из благородных и цветных металлов. Были определены зонные структуры и плотности электронных состояний; влияние спин-орбитального взаимодействия на электронное строение трубок; влияние механических деформаций на электронные свойства платиновых и палладиевых трубок; рассчитаны магнитные и электромагнитные поля в хиральных золотых, серебряных и медных трубках; установлены зависимости между геометрией, баллистическим электронным транспортом и магнитными полями.

Достоверность и обоснованность проведенных научных исследований обеспечивается целостным, комплексным подходом, адекватностью методов исследования, апробацией математических моделей. По результатам исследования опубликовано 10 печатных работ и получено 1 свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ.

По содержанию и тексту реферата можно сделать следующие замечания.

1. Диссертант не вполне корректно использует, в общем, жаргонные термины «золотые», «медные», «металлические» нанотрубки и «провода». Такое словоупотребление вызывает ощущение, что указанные нано- и микро-объекты априорно обладают свойствами соответствующих металлов. Между тем, это совсем не очевидно, так как в общем случае «металличность» есть свойство макроскопического образца. Было бы правильнее говорить о нанотрубках и нанопроводах, состоящих из атомов соответствующих металлов (а лучше — элементов, поскольку, как уже было сказано, быть металлом — это свойство макроскопическое) и по результатам проведённых расчётов прийти к заключению о том, насколько эти объекты похожи на металлы. Здесь также уместно отметить, что использованный диссертантом теоретический подход, реализованный в разработанных им программах, имеет тенденцию переоценивать «металличность». Это может особенно проявиться в случае нанопроводов из атомов переходных металлов (погруженных в углеродные нанотрубки), в которых можно ожидать (опираясь, как раз на информацию об электронных структурах объёмных фаз переходных элементов — например о сложной магнитной структуре  $\alpha$ -Mn или




ферромагнитных структурах Fe, Co, Ni) самых необычных магнитных состояний, зависящих от корреляционных эффектов в d-оболочках их атомов. Эти эффекты находятся за пределами возможностей использованного диссертантом подхода (одной спиновой поляризации недостаточно).

2. Также и представление материала не всегда удачно. В табл. 2 переходные элементы перечислены без какой бы то ни было видимой системы — не в порядке возрастания атомных номеров (соответственно, числа электронов в d-оболочках их атомов) ни в порядке возрастания плотности на уровне Ферми. Это мешает выделить как возможные закономерности, так и возможные аномалии в поведении соответствующих нанопроводов.

Указанные замечания не снижают 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).

Главный научный сотрудник  
лаборатории сорбционных процессов  
Института физической химии и  
электрохимии им. Фрумкина РАН,  
доктор физико-математических наук



А.Л.Чугреев

Институт физической химии и электрохимии имени А. Н. Фрумкина РАН  
119071, г. Москва, Ленинский пр-т., 31, к.4  
E-mail: tchougreeff@phychе.ac.ru

Тел.: +7(916)344-3651

Подпись главного научного сотрудника А.Л. Чугреева заверяю

30.10.2024

3

Зав. кафедрой  
Емельянова Н.А.

