

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

доктора технических наук, профессора Чье Ен Уна
на диссертационную работу Сычева Михаила Сергеевича
«Моделирование структурных параметров кубических
кристаллических решеток», представленную на соискание ученой
степени кандидата технических наук
по специальности 05.13.18 «Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ»

Актуальность темы диссертационного исследования

Внедрение научноемких технологий в самые различные области современного производства существенно расширило перечень, а также резко повысило уровень требований к физико-химическим свойствам конструкционных материалов, определяемых их строением на микроуровне. Именно поэтому в настоящее время во всем мире активизировались научные изыскания в области математического моделирования перспективных кристаллических структур и автоматизированного расчета их внутренних энергетических параметров. В частности, знание величины энергетической постоянной Маделунга и коэффициента плотности упаковки кристаллической решетки заданного типа является важным аспектом решения задачи химического синтеза катодных материалов для литий-ионных аккумуляторов, используемых в подавляющем большинстве портативных электронных устройств.

В свою очередь, практически все существующие на текущий момент подходы к определению структурно-энергетических характеристик кристаллических систем, сталкиваются с проблемой использования больших объемов исходных данных. Данное обстоятельство характерно, как для классических методов расчета, вынужденных учитывать пространственные координаты и электрические заряды всех частиц, размещенных внутри анализируемого объема кристалла, так и для проведения квантово-механических вычисле-

ний, основанных на достаточно громоздкой процедуре итерационного поиска наиболее устойчивых квантовых состояний.

Таким образом, тема рассматриваемого диссертационного исследования, направленного на разработку компактной математической модели, адекватно описывающей внутреннюю структуру кубических кристаллов, а также реализацию эффективных численных методов расчета их энергетических параметров и создание программного продукта, автоматизирующего проведение необходимых вычислений, может быть признана актуальной.

Степень обоснованности научных положений

Обоснованность научных положений, выносимых на защиту, обеспечивается надежностью использованных для их вывода теоретических методик, а также подтверждается следующим рядом обстоятельств:

1) оригинальность предлагаемой соискателем матричной модели компактного описания кристаллической структуры заключается в показанной возможности адекватного двумерного отображения пространственного расположения ее атомных узлов, реализуемой за счет использования общих знаний о точечных симметриях группы O_h , теории матриц и теории групп;

2) разработанные соискателем численные методы и алгоритмы базируются на классическом способе прямого суммирования знакопеременного ряда электростатических величин, выражающих кулоновское взаимодействие электронейтральных ансамблей частиц, а также практически используют оригинальную методику улучшения его сходимости;

3) предложенный соискателем способ определения плотности упаковки кристаллической структуры, основывается на количественном учете общего числа частиц, входящих в состав ее реально исследуемого объема, что существенно отличает подобный подход от традиционных теоретических методов расчета, ограничивающихся рассмотрением структуры локализованной элементарной ячейки заданного кристалла;

4) представленные соискателем программные средства автоматизации расчетов успешно прошли официальную процедуру государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ Российской Федерации.

Достоверность и научная новизна результатов

Достоверность результатов предложенного соискателем решения задачи математического моделирования энергетических и структурных параметров кристаллов кубической сингонии, подтверждаются их совпадением с известными справочными данными о значениях энергетической постоянной Маделунга и коэффициента плотности упаковки соответствующих кристаллических решеток. Кроме того, независимая проверка их эффективности была осуществлена использованием авторских программ автоматизации рассматриваемых расчетов в рамках практического выполнения НИР, проводимых рядом государственных учреждений и организаций.

Общая оценка научной новизны основных результатов рассматриваемой диссертации позволяет констатировать, что:

1) предлагаемая соискателем математическая модель является более компактной по отношению к ее другим распространенным аналогам, т. к. использует меньший объем исходных данных, а также обладает систематизированной математической структурой;

2) численный метод, реализованный на базе предлагаемой математической модели, объективно обеспечивает повышение скорости выполнения практических расчетов за счет использования малого объема текущих данных, обрабатываемых посредством векторно-матричных вычислений;

3) разработанный программный комплекс впервые позволил практически реализовывать имитационное моделирование структурно-энергетических параметров кристалла на базе действительного рассмотрения его макроскопического объема, охватывающего порядка одного миллиарда частиц;

4) значения энергетической постоянной Маделунга, вычисленные соискателем для простых кубических кристаллов и отдельно для подрешеток сложных кубических структур, в отдельных случаях уточняют их литера-

турные значения, что обусловлено рассмотрением большего числа частиц;

5) значения коэффициентов плотности упаковки рассматриваемых кристаллических структур впервые рассчитаны численным способом.

Выявленные недостатки и критические замечания

1. При разработке алгоритма общего расчета энергетической постоянной Маделунга исследуемых кристаллов, соискателем используется структурное понятие «координационный слой». В свою очередь, рассматриваемые решеточные суммы обычно рассчитываются на базе последовательного учета кулоновского взаимодействия центральной частицы с радиально расходящимися от нее координационными сферами. При этом из текста диссертации не понятно, из каких источников было заимствовано вышеназванное понятие, или же оно впервые введено в рассмотрение самим автором.

2. В диссертационных материалах не затрагивается и даже не ставится вопрос о принципиальной возможности практического применения предлагаемого соискателем метода сжатия исходных данных для компактного описания кристаллических структур, имеющих более низкую степень симметрии, т. е. гексагональных, тетрагональных и т.д.

3. Во втором пункте научной новизны результатов диссертации заявлено кардинальное повышение скорости предлагаемых расчетов рассматриваемых параметров по сравнению с использованием других традиционных методов. Однако, ни в рукописи диссертационной работы, ни в опубликованных печатных работах автора, нет объективных сравнительных данных, практически подтверждающих подобное утверждение.

4. В четвертом и пятом пунктах научной новизны соискателем заявлено некоторое уточнение известных справочных данных о численных величинах энергетической постоянной Маделунга и коэффициента плотности упаковки, но при этом никак не обоснована практическая ценность подобного уточнения их точности.

Перечисленные недостатки не снижают общей научной значимости оппонируемой диссертационной работы, т. к. не опровергают основные вы-

воды и заключения, сформулированные на основании ее результатов, а также принципиально не противоречат научным предпосылкам, использованным соискателем для их формирования.

Заключение

Изучение диссертации, а также опубликованных по ее теме работ позволяет констатировать, что рассматриваемое квалификационное исследование выполненное соискателем, обладает внутренним единством, содержит новые научные результаты и положения, выдвигаемые для публичной защиты, и свидетельствует о его личном вкладе в науку. Предложенные соискателем решения актуальной научной задачи достаточно аргументированы и оценены по сравнению с другими известными результатами.

Рукопись диссертации изложена научным языком и отвечает основным требованиям, предъявляемым к работам соответствующего уровня. Автореферат полностью отражает ключевые моменты и выводы диссертации. Общее содержание диссертации полностью освещено в 20 печатных работах, подготовленных ее автором, включая 9 статей, опубликованных в рецензируемых научных журналах, рекомендуемых ВАК.

Основные результаты, полученные автором рассматриваемой диссертационной работы, могут быть отнесены к универсальным разработкам системного и фундаментального характера и в соответствии с Указом Президента РФ от 07.07.2011 «Об утверждении приоритетных направлений развития науки, технологий и техники в Российской Федерации и перечня критических технологий Российской Федерации» достаточно полно отвечают внутреннему содержанию критической технологии «Компьютерное моделирование наноматериалов,nanoустройств и нанотехнологий». Таким образом, оппонируемая диссертация, на основании п.9 действующего «Положения о порядке присуждения ученых степеней», может быть определена в качестве научно-квалификационной работы, содержащей решение задачи, имеющей значение для развития соответствующей отрасли знаний.

Диссертация «Моделирование структурных параметров кубических кристаллических решеток» в полной мере соответствует квалификационным требованиям, предъявляемым к диссертационным работам на соискание учёной степени кандидата технических наук по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ», а ее автор, Сычев Михаил Сергеевич, заслуживает присуждения искомой учёной степени.

Официальный оппонент:

заведующий кафедрой автоматики и системотехники

ФГБОУ ВПО «Тихоокеанский государственный университет»,

доктор технических наук,

профессор

Чье Ен Ун

адрес: 680035, г. Хабаровск,
ул. Тихоокеанская, 136

тел.: (4212) 37-51-91

e-mail: chye@ais.khstu.ru