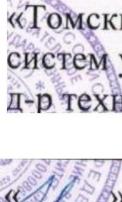


УТВЕРЖДАЮ

Директор департамента управления и
стратегического развития ФГБОУ ВПО
«Томский государственный университет
систем управления и радиоэлектроники»,
д-р техн. наук, профессор

Ю.А. Шурыгин

 «Апрель» 2015 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации 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»

1. Актуальность работы

На текущем этапе научно-технического прогресса математическое и компьютерное моделирование внутренней микроструктуры кристаллических решеток, изо-молекул или полимеров, является весьма важным аспектом понимания особенностей их поведения в различных условиях. Эта задача неизбежно встает перед учеными, разрабатывающими новые технологические материалы, практический синтез которых связан с необходимостью проведения теоретического анализа особенностей молекулярной структуры заданного химического состава. При этом физико-химическая устойчивость искомого материала оценивается по минимальному значению его внутренней когезионной энергии, находому посредством, весьма громоздких квантово-механических расчетов.

В свою очередь, современные исследования показали возможность эффективного решения рассматриваемой задачи путем модернизации более простых вычислительных технологий, направленных на классическое определение таких фундаментальных констант, как значение энергетической постоянной типовой кристаллической решетки и коэффициент плотности ее упаковки. Однако большинство прикладных результатов, представленных в работах ведущих отечественных и зарубежных ученых, не обладает достаточной степенью унификации, соответствующей уровню типового инженерного расчета.

Таким образом, разработка универсальной совокупности математических моделей, численных методов и комплексов программ, предназначенных для системного эффективного вычисления структурно-энергетических параметров кристаллических решеток, является актуальной задачей, входящей в состав общего перечня критических технологий Российской Федерации.

2. Краткий обзор содержания работы

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулированы ее основная цель и конкретные задачи исследования, представлены научные положения, выносимые на защиту, а также кратко перечислены основные теоретические и практические результаты.

Первая глава посвящена описанию физической взаимосвязи структуры кристалла с величиной его внутренней энергии, в ней приведены: общие сведения о кристаллической решетке; основные способы математического моделирования внутренней микроструктуры кристаллических тел; классические и современные способы расчета структурных и энергетических параметров кристаллов, представляющих собой знакопеременные структурные фрагменты. Особо отмечено, что практически все известные методы решения рассматриваемой задачи обладают высокой степенью сложности их практической реализации и неоднозначностью получаемых результатов.

Во **второй главе** обоснована возможность универсального представления трехмерной структуры кубического кристалла в виде компактного набора матриц, учитывающих симметрично повторяющиеся частицы и их заряды. Кроме того, для рассматриваемой типовой группы кристаллических решеток соискателем впервые введено понятие «координационного слоя».

Третья глава посвящена разработке методов прямого расчета энергетической постоянной Маделунга и коэффициента плотности упаковки конкретных кристаллов, базирующихся на предлагаемой модели их математического описания, используемой совместно с методом учета действия нескомпенсированного электрического заряда, предложенного Харрисоном, и авторского алгоритма численного определения компактности структуры.

В **четвертой главе** представлена программная реализация разработанных соискателем методов и алгоритмов, описана общая методика подготовки наборов необходимых исходных данных, приведены контрольные примеры расчета структурных параметров шести основных типов кубических кристаллических решеток.

По объему и структуре диссертационная работа соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям на соискание ученой степени кандидата технических наук.

3. Научная новизна

Научная новизна результатов диссертации заключается в следующем:

3.1. Предлагаемая соискателем матричная модель компактного описания кубической кристаллической структуры дает возможность объективного уменьшения общего объема исходных данных о пространственном расположении ее атомных узлов за счет объединения однотипных элементов, обусловленного точечной симметрией группы Oh , что в результате позволяет эффективно имитировать конфигурацию уже некоторого макроскопического объема.

3.2. Оригинальность предлагаемого численного метода расчета постоянной Маделунга заключается в увеличении скорости проводимых вычислений, объективно обеспечивающем меньшим объемом исходных данных, а также в повышении точности конечного результата, обусловленном большим числом членов знакопеременного ряда, выражющего кулоновское взаимодействие электро-нейтральных ансамблей частиц.

3.3. Соискателем впервые предложен численный способ расчета коэффициента плотности упаковки кубической кристаллической структуры, обычно определяемого только с помощью теоретических методов, основанных на учете внутреннего объема частиц ее локализованной элементарной ячейки.

4. Практическая ценность и внедрение результатов работы

Практическая значимость рассматриваемой диссертационной работы состоит в том, что предлагаемая ее автором матричная модель строения кристаллической решетки является наиболее компактной по отношению к другим существующим аналогам как с точки зрения практически используемого объема необходимых исходных данных, так и с позиции общей математической структуры, а созданные на ее базе численные методы и алгоритмы позволяют свести процедуру вычисления энергетических и структурных параметров различных кристаллов кубической сингонии до уровня типового инженерного расчета, существенно унифицирующего общий подход к их рассмотрению. Разработанные алгоритмы позволили унифицировать вычисления энергетических и структурных параметров кубических кристаллических решеток в рамках единого программного комплекса.

Представленные в диссертации математическая модель, численные методы и комплексы программ внедрены: в ФГБУН «Объединенный институт высоких температур РАН» в рамках выполнения НИР «Исследование теплофизических свойств веществ»; в ФГБОУ ВПО «Амурский гуманитарно-педагогический государственный университет» в рамках выполнения НИР № 02201258374 «Научно-методические проблемы преподавания естественнонаучных дисциплин в высшей школе»; в учебном процессе ФГБОУ ВПО «Амурский государственный университет».

5. Обоснованность и достоверность полученных результатов и сделанных выводов

Достоверность основных положений и выводов, сформулированных в диссертации, подтверждается проведенными вычислительными экспериментами, использованием разработанного программного продукта в ФГБУН «Объединенный институт высоких температур РАН» в рамках выполнения НИР «Исследование теплофизических свойств веществ». Основные результаты

диссертационной работы были аппробированы на научно-практических конференциях разного уровня в период 2009 – 2013 гг.

6. Рекомендации по использованию результатов работы

Перспективное использование предложенных методов и алгоритмов возможно в направлении разработки математических моделей компактного описания структуры кристаллических решеток, обладающих другими видами симметрии – гексагональной, тетраэдрической и т.д., характерных для многих соединений. Особую значимость они могут иметь для расчетов параметров кристаллических решеток соединений с фазовыми переходами, в которых изменение типа решетки и свойств кристаллов может осуществляться несколько раз в небольшом температурном интервале. Такие расчеты позволят оценить свойства кристаллов до проведения сложных экспериментальных исследований. Ярким примером таких соединений являются твердые растворы титанатов бария, которые в диапазоне температур $\pm 120^{\circ}\text{C}$ имеют четыре типа кристаллических решеток: кубическую ($T > 120^{\circ}\text{C}$), тетрагональную ($T = 5 \div 120^{\circ}\text{C}$), ромбическую ($T = -90 \div +5^{\circ}\text{C}$) и орторомбическую ($T < -90^{\circ}\text{C}$). Исследования твердых растворов с фазовыми переходами проводятся в Томском государственном университете систем управления и радиоэлектроники.

Другим примером таких соединений могут быть геологические породы сложных составов. Использование разработанных в диссертации моделей и алгоритмов может быть эффективным для расчета энергетических и структурных параметров кристаллических решеток горных пород. Такие исследования проводятся в Институте геологии и природопользования ДВО РАН (г. Благовещенск).

Они могут найти также применение при определении химической стабильности и биологической доступности лекарственных препаратов, имеющих сложную структуру. Такие исследования проводятся во Владивостокском филиале Дальневосточного научного центра физиологии и патологии дыхания СО РАМН.

7. Замечания по работе

7.1. В работе отсутствуют какие-либо сведения о существующих аналогах разработанных автором программных комплексов, не проведены их сравнительные характеристики с авторскими программными продуктами.

7.2. Предлагаемый соискателем алгоритм определения значения энергетической постоянной Маделунга и коэффициента компактности для заданного количества координационных слоев не предусматривает возможности остановки расчета по достижению требуемой точности результатов.

7.3. Представленные результаты автоматизированных расчетов энергетической постоянной кристаллов типа A_xB_y , при которых за исходную точку вы-

бранны как положительный, так и отрицательный ионы, не позволяют определить, какая методика перехода к общей константе Маделунга (Наора или Изгородиной) была в итоге реализована в авторском программном продукте.

7.4. Отсутствует обоснование выбор кристалла CsCl в качестве модельного среди других хорошо изученных ЦГК, а также сравнение результатов расчетов постоянных решетки с известными расчетными и экспериментальными данными.

7.5. В диссертации отсутствует описание результатов внедрения предложенных автором моделей, алгоритмических методов и комплексов программ. Представленные в приложении акты вызывают ряд вопросов:

- дисциплина «Концепция современного естествознания» читается, как правило, для гуманитарных направлений подготовки, и непонятно, на развитие каких общекультурных и профессиональных компетенций направлено использование программных комплексов;
- справка о внедрении в учебный процесс АмГУ подписана почему-то проректором по научной работе, кроме того, непонятно, в каких дисциплинах и по каким направлениям подготовки используются полученные автором результаты;
- акт об использовании научно-практических результатов при выполнении НИР в Объединенном институте высоких технологий РАН фиксирует факт расчетов и не содержит каких-либо данных об эффективном использовании предоставленных комплексов программ.

Отмеченные выше недостатки диссертационной работы не снижают общей ее положительной оценки. Автореферат полностью отражает основное содержание диссертационной работы. Список цитируемых литературных источников состоит из 125 наименований, включая 20 научных работ, опубликованных соискателем по теме диссертации, в числе которых 9 статей в рецензируемых журналах из перечня изданий, рекомендуемых ВАК.

8. Общая оценка диссертации

Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, в которой содержится обоснованное решение задачи разработки эффективной совокупности математических моделей, численных методов и комплексов программ, предназначенных для системного расчета структурно-энергетических параметров кристаллических решеток, имеющей существенное значение для развития страны.

Принимая во внимание актуальность темы, научную новизну и практическую значимость полученных результатов, считаем, что диссертация «Моделирование структурных параметров кубических кристаллических решеток» удовлетворяет требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», а ее автор, Сычев Михаил Сергеевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Результаты диссертационной работы Сычева М.С. были обсуждены на совместном научном семинаре кафедры автоматизации обработки информации и лаборатории радиационного и космического материаловедения ФГБОУ ВПО «Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники» 9 апреля 2015 г., протокол № 289.

Зав. кафедрой АОИ
д-р техн. наук профессор

Ю.П. Ехлаков
e-mail: upe@tusur.ru
тел. (3822) 41-41-31
адрес: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 40

Зав. лабораторией радиационного
и космического материаловедения
д-р физ.-мат. наук профессор

М.М. Михайлов
e-mail: membrana2010@mail.ru
тел. (3822) 70-15-96
адрес: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 40