

Отзыв

на автореферат диссертации Сычева Михаила Сергеевича
«Моделирование структурных параметров кубических
кристаллических решеток», представленной на соискание ученой
степени кандидата технических наук по специальности 05.13.18
«Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ»

Одной из центральных задач физики твердого тела и кристаллохимии является предсказание свойств материалов обладающих кристаллической структурой. В настоящее время является известным, что эти свойства напрямую зависят от энергии когезии и плотности упаковки частиц. Таким образом, создание эффективных моделей и вычислительных алгоритмов, позволяющих определять энергетические и структурные параметры кристаллических решеток, является актуальной научной задачей.

Судя по автореферату, основное содержание диссертации посвящено разработке единой совокупности математических моделей и алгоритмов, позволяющих эффективно рассчитывать энергетическую константу Маделунга и плотность пространственной упаковки решеток кубической сингонии. При этом новизна научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных автором диссертации, заключается в интеграции базовых понятий теории групп и теории симметрии кристаллов с современными методами улучшения сходимости решеточных сумм, что в результате позволяет сгладить вычислительные трудности, присущие традиционным методам описания конфигурации кристаллических решеток и прямым способам расчета их структурно-энергетических параметров.

В свою очередь, практическая ценность результатов диссертации состоит в том, что общая совокупность сформированных в ее рамках математических моделей периодических трехмерных решеток, численных методов определения их структурных параметров, а также авторского комплекса прикладных программ позволяет существенно унифицировать общую технологию имитационного моделирования исследуемых объектов.

К недостаткам диссертационной работы можно отнести отсутствие в ней сравнительной оценки основных вычислительных характеристик защищаемого комплекса программ и аналогичных программных продуктов, существующих на современном рынке информационных технологий.

Диссертация «Моделирование структурных параметров кубических кристаллических решеток» соответствует установленным квалификационным критериям, а ее автор – Сычев Михаил Сергеевич заслуживает ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Профессор кафедры

«Системы обработки информации и управления»

ФГБОУ ВПО «Московский государственный

технический университет им. Н.Э. Баумана»,

доктор технических наук, профессор

Григорьев Юрий Александрович

Адрес: 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1;

тел.: (499) 263-63-91;

e-mail: grigorev@bmstu.ru

Подпись профессора Григорьева Ю.А. заверяю