

## 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

На сегодняшний день является очевидным, что точные значения таких параметров кристаллической решетки, как ее энергетическая постоянная и коэффициент плотности упаковки, дают возможность эффективно прогнозировать химическую стабильность и основные физические свойства различных перспективных материалов. При проведении имитационного моделирования этих параметров возникает необходимость практического учета огромного количества частиц, образующих кристаллическую структуру синтезируемого образца. Размерность необходимых исходных данных, используемых для традиционного описания трехмерной структуры вещества, достигает весьма внушительных значений, существенно затрудняющих проведение вычислений, а также возможность автоматизации расчетов. Отсюда следует несомненная **актуальность** проведенных соискателем исследований.

Судя по общему содержанию диссертации, сформированные ее автором математические модели, численные методы и комплексы программ представляют собой новое решение рассматриваемой задачи. Эффективность подхода подтверждается высокой степенью соответствия значений постоянной Маделунга и коэффициента плотности упаковки различных типов кристаллов кубической сингонии, определенных посредством имитационного моделирования, существующим справочным данным.

Отметим, что на основе материалов диссертации соискателем опубликовано **9 статей** в рецензируемых журналах, включенных в действующий перечень научных изданий, рекомендованных ВАК РФ.



В качестве замечания следует отметить отсутствие объективных сравнительных данных, характеризующих заявляемое соискателем превосходство в скорости вычислений, проводимых по предложенной им методике, с показателями других программных комплексов, направленных на решение аналогичных задач. Указанный недостаток не снижает общую положительную оценку работы.

Считаю, что диссертационная работа «Моделирование структурных параметров кубических кристаллических решеток» заслуживает положительной оценки, а ее автор Сычев Михаил Сергеевич достоин присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Главный научный сотрудник отдела вычислительной математики  
Федерального государственного бюджетного учреждения науки  
«Институт вычислительного моделирования СО РАН»,  
доктор физико-математических наук, профессор  
Новиков Евгений Александрович

Адрес: 660036, Красноярск, Академгородок, дом. 50, стр. 44, ИВМ СО РАН  
Телефон: +7(391)2494724  
E-mail: [novikov@icm.krasn.ru](mailto:novikov@icm.krasn.ru)

Е.А. Новиков

Подпись д.ф.-м.н., профессора Е.А. Новикова заверяю.  
Ученый секретарь ИВМ СО РАН,  
к.ф.-м.н.

А.В. Вяткин