

ОТЗЫВ

официального оппонента Криштопа Виктора Владимировича доктора физико-математических наук, профессора 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» в специализированный совет Д 212.092.03 при Комсомольском-на-Амуре государственном техническом университете

Актуальность темы диссертационного исследования

Основная часть диссертационной работы Сычева М.С. посвящена моделированию и исследованию энергетических и структурных параметров кристаллов кубической сингонии, таких как постоянная Маделунга и плотность пространственной упаковки. Известно, что постоянная Маделунга является ключевой характеристикой при расчете полной энергии решетки, а, следовательно, и ее стабильности. Таким образом, при помощи данной константы можно определить устойчивость исследуемой структуры, что является необходимым условием при синтезе новейших лекарственных препаратов.

Также необходимо отметить, что кристаллохимические параметры структурной плотности пространственной упаковки коррелируют с условиями (глубинностью) минералообразования, а также могут служить индикаторами (указателями) направленности процессов замещения одних минералов другими. На основании этого можно вывести соответствующие формулы оценки весьма широкого спектра физико-химических свойств веществ, включая механические, прочностные, термические, упругие, поверхностные, эмиссионные и многие другие.

Таким образом, с учетом вышесказанного можно сделать вывод об **актуальности** рассматриваемой диссертационной работы.

Степень обоснованности научных положений

Для получения заявленного результата были корректно использованы апробированные и достаточно эффективные методы исследования сходимости рядов, алгоритмизации функциональных вычислений и базовые понятия групп. Таким образом, предложенная математическая модель матричного описания структуры кристалла, опираясь на классические теоретические предпосылки, весьма эффективно характеризует его энергетические и структурные параметры, что практически подтверждается результатами серии вычислительных экспериментов, совпавших с известными справочными значениями.

Научная новизна полученных результатов

Научную новизну диссертационной работы можно представить следующими основными положениями:

- на базе предложенной соискателем матричной математической модели компактного описания структуры кристалла, был применен современный физический метод улучшения сходимости решеточных сумм Харрисона, позволяющий учитывать в расчетах действие не скомпенсированного заряда элементарной ячейки;
- разработанные автором численные методы и алгоритмы позволяют практически включить в рассмотрение более двух миллиардов частиц, т.е. дают возможность исследовать макроскопический объем кристалла, следовательно, рассчитывать более точные значения его энергетических и структурных параметров.

Соответствие работы критериям, предъявляемым к кандидатским диссертациям

Диссертация Сычева М.С. является завершенной научно-квалификационной работой, содержащей решение задачи эффективного математического моделирования энергетических и структурных параметров кристаллических решеток кубической сингонии, включающей синтез оригинальной математической модели, разработку методов численного расчета

рассматриваемых параметров и создание компьютерной программы их автоматизации.

Основные результаты научной работы освещены автором в 9 статьях, опубликованных в рецензируемых изданиях, рекомендованных ВАК РФ, а также апробированы на 7 научно-технических конференциях: 52-я всероссийская научная конференция МФТИ «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук» (Москва, 2009); XXIII и XXIV международные научные конференции «Математические методы в технике и технологиях» (Саратов, 2010; Пенза, 2011); V общероссийская научно-практическая «Актуальные вопросы современной науки и образования» (Красноярск, 2010); VII международный семинар «Физико-математическое моделирование систем» (Воронеж, 2011); V международная научно-техническая конференция «Аналитические и численные методы моделирования естественнонаучных и социальных проблем» (Пенза, 2011); I международная интернет-конференция «Современное состояние минералогии» (Казань, 2013).

Судя по формальным признакам, диссертация написана Сычевым М.С. самостоятельно, обладает внутренним единством, содержит новые научные результаты и защищаемые положения, что свидетельствует о личном вкладе автора в науку.

Недостатки и замечания по диссертации

Рассмотрение представленных в диссертации материалов позволяет отметить следующие критические замечания:

1) в диссертационной работе представлены существующие модели кристаллической структуры, такие как элементарная ячейка, решетка Бравэ и базис, тензор 2-го порядка, но не рассмотрены альтернативные способы описания, например, плотнейшие шаровые упаковки, или метод Полинга-Белова;

2) в работе рассмотрено применение предложенной соискателем матричной модели компактного описания кристаллической решетки только для кубических кристаллов. При этом вопрос общей применимости к другим ти-

пам решеток (тетраэдрической, гексагональной, ромбоэдрической и др.) никак не освещен;

3) в тексте диссертации недостаточно внимания уделяется физическим предпосылкам методов расчета энергетической постоянной кристаллической решетки (Эвальда, Эвьена, Харрисона).

Отмеченные недостатки не затрагивают основные выводы, сформулированные в рамках проведенного соискателем диссертационного исследования, и не снижают общей научной значимости его результатов.

Заключение

Диссертация «Моделирование структурных параметров кубических кристаллических решеток», является научно-квалификационной работой, содержащей теоретически обоснованные и экспериментально подтвержденные математические модели, численные методы и комплексы программ, общая совокупность которых позволяет эффективно рассчитывать энергетические и структурные параметры кристаллов кубической сингонии, что имеет достаточно важное научное и практическое значение.

Научный уровень рассматриваемой работы соответствует квалификационным критериям, которым должны отвечать диссертации, подготовленные по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ», а ее автор – Сычев Михаил Сергеевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук.

Проректор по учебной работе ФГБОУ ВПО «Дальневосточный государственный университет путей сообщения», доктор физико-математических наук, профессор, Криштоп Виктор Владимирович

Адрес: 680021, г. Хабаровск, ул. Серышева, д. 47

Электронная почта: krishtop@list.ru

Телефон: 8 (4212) 407-334