

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.190.06 НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО
УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «ПЕТРОЗАВОДСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ» ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 24.06.2016 г., протокол № 35
о присуждении **Крупянскому Дмитрию Сергеевичу**, гражданину Российской
Федерации ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Анализ структурного состояния многокомпонентных систем атомов, формируемых в компьютерных экспериментах, на основе теории графов» в виде рукописи по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния принята к защите «21» апреля 2016 года, протокол № 32 диссертационным советом Д 212.190.06 на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Петрозаводский государственный университет», 185910, г.Петрозаводск, пр. Ленина, 33, действующего на основании приказа Министерства образования и науки Российской Федерации №156/нк от 1 апреля 2013 года.

Соискатель Крупянский Дмитрий Сергеевич, 1984 года рождения, в 2006 году окончил Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Петрозаводский государственный университет» с присуждением квалификации «математик». В 2012 году соискатель окончил Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Петрозаводский государственный университет» с присуждением квалификации «инженер». В 2016 году окончил очную аспирантуру Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Петрозаводский государственный университет» по направлению 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Диссертация выполнена на кафедре физики твердого тела физико-технического

факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Петрозаводский государственный университет».

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, доцент **Фофанов Анатолий Дмитриевич** работает в должности профессора кафедры физики твердого тела физико-технического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Петрозаводский государственный университет».

Официальные оппоненты:

1. **Еремин Николай Николаевич**, гражданин Российской Федерации, доктор химических наук, заведующий кафедрой кристаллографии и кристаллохимии Геологического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет» имени М.В. Ломоносова,
2. **Белов Максим Павлович**, гражданин Российской Федерации, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории моделирования и разработки новых материалов Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет МИСиС»,

дали **положительные** отзывы на диссертацию.

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт катализа имени Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук, г.Новосибирск, в своем **положительном** заключении, подписанным заведующим лабораторией структурных методов исследования ФГБУН Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, д. ф.-м. н., профессором *Цыбулей Сергеем Васильевичем* и утверждённым директором ФГБУН Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, член.-корр. РАН, д.х.н., Бухтияровым Валерием Ивановичем, указала, что «Диссертационная работа «Анализ структурного состояния многокомпонентных систем атомов, формируемых в компьютерных экспериментах, на основе теории

графов» соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям». Отзыв о диссертационной работе Крупянского Д.С. рассмотрен и одобрен на научном семинаре лаборатории структурных методов исследования Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН 7 июня 2016 г., протокол № 56.

Соискатель имеет 12 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 12 работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях 3 работы.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Крупянский, Д. С. Реализация метода молекулярной динамики посредством технологии Nvidia CUDA / Д. С. Крупянский, Д. В. Лобов, Р. Н. Осауленко // Ученые записки Петрозаводского государственного университета. Сер. Естественные и технические науки. – 2013. – Т. 2, № 131. – С. 84–86.
2. Крупянский, Д. С. Алгоритм поиска точечных подмножеств и его применение для анализа атомной структуры модельных кластеров / Д. С. Крупянский, А. Д. Фофанов // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Сер. Математическое моделирование и программирование. – 2014. – Т. 7, № 2. – 46–54.
3. Крупянский, Д. С. О влиянии точности арифметических расчётов на результаты молекулярно-динамического эксперимента / Д. С. Крупянский, А. Д. Фофанов // Ученые записки Петрозаводского государственного университета. Сер. Естественные и технические науки. – 2015. – Т. 2, № 147. – С. 72–76.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. **Кременецкого Вячеслава Георгиевича**, кандидата химических наук, старшего научного сотрудника лаборатории высокотемпературной химии и электрохимии Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья имени И.В. Тананаева Кольского научного центра Российской академии наук»

Замечания:

- 1) Отсутствуют четкие определения для ряда используемых понятий (например, максимальная компонента графа и ее порядок, индексы тетраэдричности и октаэдричности), что несколько затрудняет понимание текста.

2) Не приведено описание условий МД эксперимента, в частности, условий кристаллизации кластера MgO.

2. **Платонова Сергея Михайловича**, кандидата физико-математических наук, доцента кафедры информационных технологий и систем Новгородского государственного университета

Замечания:

1) В таблице 1 представлены значения модулярности исследуемых графов, рассчитанные для разбиения их вершин на сообщества в соответствии с типом структурного элемента, интересно было бы сравнить значения модулярности данных графов относительно их оптимального разбиения на сообщества.

2) В тексте автореферата используются специфические термины, смысл которых не разъясняется, в частности, отсутствуют определения индексов тетраэдричности и октаэдричности.

Все отзывы, поступившие на диссертацию и автореферат, **положительные** и заканчиваются выводом, что диссертационная работа Крупянского Д.С. полностью соответствует требованиям, которые ВАК предъявляет к кандидатским диссертациям, а ее автор – Крупянский Д.С. – заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается известностью их достижений в данной отрасли науки, наличием публикаций в соответствующей сфере исследования и способностью определить научную и практическую ценность диссертации.

Официальный оппонент д.х.н. Еремин Н. Н. – один из признанных лидеров в области компьютерного моделирования структур и свойств минералов и неорганических соединений, автор более 100 научных публикаций в российских и зарубежных изданиях. За последние 5 лет им опубликовано около 50 статей в центральных российских научных журналах и в зарубежных научных журналах с высоким импакт-фактором.

Официальный оппонент к.ф.-.м.н. Белов М. П. занимается научными исследованиями в области первопринципных методов в физике конденсированного

состояния, является научным сотрудником лаборатории моделирования и разработки новых материалов НИТУ МИСиС, основной целью которой является разработка вычислительных инструментов, необходимых для научно-обоснованного дизайна новых материалов.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт катализа имени Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук является одним из ведущих институтов Российской академии наук, одним из основных направлений научной деятельности которого является создание научных основ молекулярного дизайна веществ и материалов. Среди фундаментальных исследований Института можно выделить: исследование структуры катализаторов и механизма их формирования, а также математическое моделирование каталитических процессов. Представитель ведущей организации д.ф.-м.н. Цыбуля Сергей Васильевич – заведующий лабораторией структурных методов исследования Института катализа, заведующий кафедрой физических методов исследования твердого тела Новосибирского государственного университета.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработан новый метод количественного исследования структуры многокомпонентных наноразмерных систем, в основе которого лежит разбиение модельного объекта на совокупность полиэдров заданного состава, описываемой в виде графа;

предложены новые количественные характеристики – инварианты графа, позволяющие описать структурное состояние многокомпонентных нанокластеров с различной степенью упорядоченности в расположении частиц;

доказана эффективность использования разработанного метода для исследования структуры многокомпонентных атомных кластеров;

введена и использована новая количественная характеристика формы локальной конфигурации атомов – индекс деформированности, позволяющий распространить статистико-геометрический подход к анализу структуры на многокомпонентные системы со структурными элементами произвольной формы.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

выявлены топологические инварианты графов, описывающих взаимное расположение координационных многогранников, чувствительные к значимым особенностям структуры многокомпонентных нанокластеров;

применительно к решению задач диссертации результативно использован метод молекулярной динамики;

установлено наличие корреляций между значениями топологических инвариантов графов и химическим составом кластеров;

установлена связь разбиения модельного кластера на области с однородной структурой, составом или концентрацией со структурой сообществ графа, описывающего систему соединяющихся координационных многогранников атомов различных сортов.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

разработан оригинальный метод для обнаружения значимых в плане формирования функциональных свойств неоднородностей структуры;

разработанная модель позволяет интерпретировать результаты структурных исследований многокомпонентных систем.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

полученные результаты основаны на применении современных методов численного моделирования;

проведено детальное сопоставление полученных результатов с известной совокупностью литературных данных;

использованы представительные наборы компьютерных моделей и современные методики их обработки, позволяющие получить статистически достоверный результат.

Личный вклад соискателя состоит в: сборе и анализе литературных данных по теме диссертации; разработке нового метода анализа компьютерных моделей многокомпонентных атомных кластеров; разработке компьютерных программ и алгоритмов; планировании и проведении численных экспериментов; проведении структурного анализа построенных моделей; непосредственном участии в обсуждении и интерпретации полученных результатов и формулировке выводов. Подготовка

публикаций по теме диссертации осуществлялась совместно с соавторами работ.

Научные публикации и автореферат полностью отражают содержание диссертации и результаты, полученные в работе.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается наличием последовательного плана исследований, непротиворечивостью результатов и взаимосвязью выводов.

Диссертационный совет Д 212.190.06 на заседании 24 июня 2016 г. пришел к выводу о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 30 января 2002 г. № 74 (в редакции постановления Правительства Российской Федерации от 20 июня 2011 г. № 475), и принял решение присудить **Крупянскому Дмитрию Сергеевичу** ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них 7 докторов наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 22 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение ученой степени – 14, против присуждения ученой степени – 1, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель
диссертационного совета

В. Вуров

Гуртов Валерий Алексеевич

Ученый секретарь
диссертационного совета

Пикулев Виталий Борисович

24 июня 2016 г.



Подпись руки	<i>Гуртов В. А.</i>
	<i>Пикулева В. В.</i>
УДОСТОВЕРЯЮ.	
Уч. секретарь ученого совета	<i>[Signature]</i>
	«24» 06 2016 г.