

ОТЗЫВ

научного руководителя на диссертационную работу Крупянского Дмитрия Сергеевича **«Анализ структурного состояния многокомпонентных систем атомов, формируемых в компьютерных экспериментах, на основе теории графов»**, представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния

Предлагаемая к защите диссертационная работа Крупянского Дмитрия Сергеевича выполнена в русле работ по исследованию некристаллических материалов, которые ведутся на кафедре физики твердого тела физико-технического факультета ФГБОУ ВО Петрозаводского государственного университета (ПетрГУ) достаточно длительное время. Более того, тема диссертационного исследования была инициализирована необходимостью анализа кластеров атомов, формируемых при интерпретации дифракционных картин рассеяния, возникающих в результате рентгенографического изучения некристаллических материалов. Цель работы - поиск новых методов количественного описания (на разных уровнях) структуры компьютерных моделей многокомпонентных систем.

Наиболее важными представляются следующие результаты, полученные диссертантом:

1. Новый количественный метод анализа и сопоставления структуры многокомпонентных наноразмерных систем атомов, формируемых в компьютерных экспериментах;
2. Разработан и реализован в виде программы алгоритм поиска точечных подмножеств, позволяющий выявлять в структуре модельных кластеров локальные конфигурации атомов по заданному шаблону;
3. Установлена взаимосвязь структурного состояния многокомпонентных нанокластеров и значений инвариантов графов, описывающих систему соединяющихся координационных многогранников атомов различных сортов;

