

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
**ИНСТИТУТ ХИМИИ И ТЕХНОЛОГИИ
РЕДКИХ ЭЛЕМЕНТОВ И МИНЕРАЛЬНОГО
СЫРЬЯ**
им. И.В. Тананаева
КОЛЬСКОГО НАУЧНОГО ЦЕНТРА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИХТРЭМС КНЦ РАН)
Академгородок, 26а, Апатиты, Мурманская обл.
Россия, 184209
Факс (815-55)6-16-58, тел (815-55) 79-5-49, 7-52-95
E-mail office@chemy.kolasc.net.ru
ОКПО 04694169, ИНН 5101100177, ОГРН 1025100508597

24.05.2016 № 230-217P

На № _____ от _____

Ученому секретарю
диссертационного Совета
Д 212.190.06
к.ф-м.н. Пикулеву В.Б.

ФГБОУ ВО "Петрозаводский
государственный университет"
185910, г. Петрозаводск,
ул. Ленина, 33,
Петрозаводский
государственный университет

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Крупянского Дмитрия Сергеевича
"АНАЛИЗ СТРУКТУРНОГО СОСТОЯНИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ АТОМОВ,
ФОРМИРУЕМЫХ В КОМПЬЮТЕРНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТАХ, НА ОСНОВЕ ТЕОРИИ
ГРАФОВ",
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния

Настоящая работа посвящена развитию методов детального количественного исследования структуры компьютерных моделей многокомпонентных наноразмерных систем. В основе предложенного автором метода анализа модельных структур лежит разбиение структуры на совокупность полиэдров заданного состава и сопоставление этой совокупности соответствующего графа. Дальнейший анализ опирается на использование ряда инвариантов, чувствительных к тем или иным особенностям модельных структур. Собственно, выявление таких инвариантов и составляет основную специфику данной работы.

Актуальность работы несомненна: методы компьютерного моделирования в настоящее время становятся основным инструментом исследования структур на наноуровне, причем, молекулярная динамика занимает здесь доминирующее положение вследствие значительного усовершенствования потенциалов взаимодействия и соответствующего повышения уровня

достоверности получаемых модельных структур. В то же время наблюдается определенный застой в области анализа этих структур. Основным инструментом здесь является метод Вороного-Делоне, использующий разбиение структуры на многогранники Вороного или симплексы Делоне с последующим их анализом. Подход довольно успешно работает в однокомпонентных системах, но менее эффективен в случае неупорядоченных многокомпонентных структур. Поэтому любые продвижения в этой области крайне желательны и должны всячески приветствоваться.

Теория графов активно используется при топологическом анализе структур и химических связей в сфере кристаллографии и теоретической минералогии. В работах известного канадского минералога-теоретика Ф.К. Хоуторна в этой связи говорится даже о "новой парадигме" в теоретической минералогии. В русле этого направления лежит и подход, развиваемый в данной работе.

Научная новизна диссертации Д.С. Крупянского представляется несомненной. Предложенный подход основан, как упомянуто выше, на предварительном разбиении структуры на совокупность полиэдров заданного состава. На первый взгляд, это является ограничением метода, поскольку разбиение зависит от предварительной кристаллохимической информации, которая в принципе может быть и ошибочной. Но ничто не мешает использовать в процессе исследования любые альтернативные разбиения структуры. Кстати, в автореферате диссертации Д.С. Крупянского упоминается два варианта разбиения модельной поликристаллической структуры MgO – с выделением октаэдрических и гексаэдрических конфигураций атомов – и проводится их сопоставление. Анализ подобных альтернативных разбиений уже сам по себе имеет немалый интерес для многих неупорядоченных структур – не только для аморфных твердых тел, но и для жидкостей, в том числе для расплавов.

Но главную ценность работы, на наш взгляд, представляет выявление топологических инвариантов, чувствительных к тем или иным параметрам структуры. Это позволяет отслеживать различные трансформации структуры в таких процессах, как диффузия атомов, кристаллизация и др., оценивать степень однородности структуры, поликристалличности и т.п. То есть, диссертантом создан новый, вполне работоспособный инструментальный анализ неупорядоченных многокомпонентных структур.

Практическая ценность работы также не вызывает сомнения, поскольку разработанный метод позволяет глубже понять процессы формирования локальных образований и их трансформации при нарушении равновесия в неупорядоченных многокомпонентных структурах, что во многих случаях стимулирует появление новых практических применений исследуемых объектов. Нетрудно распространить предложенный подход, например, на исследование структуры, процессов диффузии и иных форм поведения комплексных частиц

тугоплавких металлов в расплавах неорганических солей. А эти системы активно используются на практике.

К практическому итогу работы следует отнести также разработку алгоритма параллельных расчетов на основе CUDA для молекулярно-динамических расчетов. В отсутствие высокопроизводительных, но дорогостоящих вычислительных комплексов данный подход позволяет, тем не менее, кардинально увеличить производительность компьютера благодаря использованию графического процессора и выполнить за разумное время необходимые расчеты.

По автореферату диссертации можно высказать следующие 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.

Отмеченные замечания не снижают научную и практическую значимость результатов работы.

Работа производит очень хорошее впечатление, отличается систематическим подходом, хорошим методическим уровнем и основательностью анализа. Автореферат диссертации и опубликованные по ней материалы в полной мере отражают содержание работы.

Диссертация, несомненно, отвечает требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (в редакции постановления Правительства Российской Федерации от 24.09.13 № 842), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Крупянский Д.С. заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Старший науч. сотр., к.х.н. (05.17.11),
лаборатория высокотемпературной
химии и электрохимии
Тел.: 8(815) 55-79129
E-mail: kreme_vg@chemy.kolasc.net.ru

