

**Министерство образования и науки  
Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего  
профессионального образования  
«Новгородский государственный университет  
имени Ярослава Мудрого»  
(НовГУ)**

Б.Санкт-Петербургская ул., д. 41,  
Великий Новгород, 173003  
Тел. (816-2) 62-72-44, факс (816-2) 62-41-10  
E-mail: NovSU@novsu.ru  
<http://www.novsu.ru>  
ОКПО 02068918, ОГРН 1025300780075,  
ИНН/КПП 5321033744/532101001

09.06.2016 № 2525

**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, д. 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.

В работе Крупянского Д.С. решается важная и актуальная задача – исследование способов описания и изучения строения неупорядоченных фаз вещества (жидких, аморфных, стеклообразных). Данная проблема является предметом интенсивных дискуссий, начиная с работ Дебая, Френкеля, Бернала и имеет уже почти столетнюю историю. Идея использования теории графов для исследования структуры сложных систем также не нова и с успехом эксплуатируется учеными в различных областях науки, в том числе химиками для классификации химических соединений, установления связей состав-строение-свойства, поиска веществ с заданными свойствами. Несмотря на имеющийся прогресс в развитии представлений о строении тел с топологическим беспорядком, до настоящего времени не сформировано какой-либо идеальной модели, позволяющей количественно описать структуру данных объектов. Поэтому новая попытка автора, основанная на использовании теории графов для исследования структурных особенностей многокомпонентных систем атомов, представляется весьма актуальной.

Научная новизна результатов исследования не вызывает сомнений, поскольку впервые определены универсальные количественные характеристики (инварианты графа), позволяющие зафиксировать структурные особенности многокомпонентных систем с различным составом. Не менее ценным является установление связи между сообществами

вершин графовой модели и структурными неоднородностями соответствующего кластера атомов. Данный подход уже позволил получить результаты, важные для понимания структуры систем в различных областях науки, однако для анализа атомной структуры вещества – использован впервые автором данной работы. Дополнительно стоит отметить реализацию новой характеристики формы локальной конфигурации атомов, позволяющей распространить статистическо-геометрический подход, используемый для анализа атомной структуры с помощью метода Вороного-Делоне, на структурные элементы произвольного типа.

В качестве замечаний по автореферату следует отметить:

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.

Несмотря на указанные недостатки, диссертационная работа Крупянского Д.С. удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым «Положением о присуждении ученых степеней» к кандидатским диссертациям, а Крупянский Д.С. заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук.

*Даю свое согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.*

Кандидат физико-математических наук,  
доцент кафедры Информационных  
технологий и систем НовГУ,

*Почтовый адрес:* 173003, Великий  
Новгород, ул. Большая Санкт-  
Петербургская, д. 41  
*тел.:* +79052927713  
*email:* sergey.platonov@novsu.ru

*Плато*



Платонов  
Сергей  
Михайлович