

Отзыв на автореферат диссертации ЯМАЛЕТДИНОВА РУСЛАНА ДАМИРОВИЧА
«Теоретическое моделирование элементов с памятью: графеновый мемконденсатор и
оптомемристор на основе нитрозокомплексов рутения»,
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по
специальности 02.00.04 «Физическая химия»

Диссертация Р.Д.Ямалетдинова посвящена теоретическому моделированию различных элементов с памятью с использованием теории функционала плотности и методов молекулярной динамики. Теоретические методы проверены и согласуются с экспериментальными данными. В работе изучены ряд аминонитрозокомплексов рутения и графеновые листы. Спектр исследованных объектов выбран исходя из свойств, необходимых для получения конечных устройств, что обуславливает актуальность и практическую значимость данной работы.

К наиболее значимым результатам можно отнести получение и сравнение данных о термической стабильности комплексов с различными лигандами, исследование механизма их фотоизомеризации, определение переходных состояний, а также расчет стабильных конформаций графеновых листов. В ходе выполнения данной работы был проведен значительный объем работы по подбору и модификации различных параметров для соответствующих расчетов, в частности уточнение коэффициентов для поля сил CHARMM. В завершении, представлена теоретическая модель функционирования «оптомемристора» и разработана простая аналитическая модель переключения графеновой мембраны.

Хотя в целом автореферате написан простым, доступным языком, позволяющий понять область работы и использованные методы, иногда встречается недостаточность информации. Например, на стр. 9 указан тип дифрактометра «монокристаллический дифрактометр Bruker AXS P4», но не приведена соответствующая информация о дифрактометре «ДРОН-3М». Другой пример можно привести при обсуждении расчета энергии переходного состояния на стр.11, где автор не указывает каким методом проводилось определение этого переходного состояния.

Сделанные замечания не умаляют ценности исследования, которое демонстрирует способность соискателя выполнять работу на высоком научном уровне, с использованием современных расчетных и экспериментальных методов.

Работа Ямалетдинова Р.Д. по актуальности темы, количеству и качеству (научная новизна, практическая значимость, достоверность, оригинальность) полученных результатов и другим параметрам полностью соответствует требованиям ВАК. Диссертант Ямалетдинов Р.Д. заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности «Физическая химия».

к.х.н., н.с., зам.директора по науке ИХТТМ СО РАН, зав.лаборатории физико-химических основ фармацевтических материалов ФЕН ЦГУ

Подпись Д. А. Рычкова удостоверяю:
Ученый секретарь ИХТТМ СО РАН д.х.н.

18 января 2019

Денис Александрович Рычков,

К.х.н., н.с., зам.директора по науке ИХТТМ СО РАН
ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН
630128, г.Новосибирск, ул.Кутателадзе, 18

<http://www.solid.nsc.ru>

Тел. (383) 332-40-02

Факс: (383) 332-28-47

Эл.почта root@solid.nsc.ru

ИХТТМ СО РАН
ВХ. № 15325-90
01
02.01.19