

ОТЗЫВ

на выпускную бакалаврскую работу Крыловой Марины Александровны
«Моделирование электрических и упругих свойств производных фуллерена»

Задача, рассмотренная в выпускной квалификационной работе, представляет как теоретический, так и практический интерес. Оценить энергетические, электронные и спектральные свойства вещества в зависимости от геометрической структуры молекул актуально во многих случаях. Например, при исследовании электронных и магнитных характеристик, упругих свойств, колебательных спектров, переноса протона в конденсированной фазе. В работе предложены и реализованы в программном продукте модели квантовохимического исследования эндокомплексов одного из радиоактивных элементов – атома гадолиния с фуллереном и с гидроксिलированными фуллеренами.

Крылова М.А. разобралась в сложном теоретическом аппарате квантовой механики, в теории колебательной спектроскопии, в расчетных методах функционала плотности. Предложенная в работе методика представляет интерес для получения конкретных численных значений электронных, магнитных и других физико-химических характеристик системы, а также для развития представлений о технологических процессах ядерной медицины. Эта методика может быть использована в других исследованиях.

В процессе работы М.А.Крылова проявила себя как вдумчивый, целеустремленный исследователь, умеющий разбираться в применяемых им формулах и уравнениях. Самостоятельно она освоила программные пакеты HyperChem, который использовался на начальном этапе работы, Chemcraft и Gaussian 09 в разных версиях. Все квантовохимические расчеты проводились в параллельном режиме вычислений с использованием высокопроизводительных вычислительных комплексов. К сожалению, недостаточное знание химии не позволило проанализировать все аспекты реакционной способности и свойств систем на основании многочисленных вычисленных характеристик электронной структуры рассматриваемых молекул.

Однако, несмотря на некоторые недостатки, считаю, что представленная работа заслуживает оценки «отлично».

Научный руководитель
д.ф.-м.наук., доцент

Бедрина М.Е.

29.05.2018