

## РЕЦЕНЗИЯ

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

Задача, рассмотренная в бакалаврской работе актуальна и, несомненно, представляет как практический, так и теоретический интерес. Оценить положение радиоактивного элемента, его энергию связи с внутренней поверхностью фуллерена квантово-механическими методами возможно только с использованием современной вычислительной техники, что требует определенных знаний и навыков работы. Кроме того, необходимо было разобраться в сложном теоретическом аппарате квантовой механики, в теории метода функционала электронной плотности и в методах расчета физико-химических свойств. Расчеты проводились в программном пакете Gaussian на высокопроизводительном вычислительном комплексе факультета ПМ-ПУ в параллельном режиме вычислений. При этом явно учитывалась геометрическая и электронная структура свободного фуллерена и его гидроксильированных производных.

Хорошо представлена литературная и теоретическая часть работы, почти все ссылки на оригинальные современные англоязычные публикации. Предложенная методика позволила вычислить конкретные характеристики систем, в дальнейшем их можно будет сравнить с экспериментальными данными.

В качестве пожелания хотелось бы видеть более полное исследование упругих свойств рассмотренных эндокомплексов.

Учитывая сложность поставленной задачи, трудности вычислений и хорошее оформление, я считаю, что представленная работа заслуживает оценки « Отлично ».

Рецензент  
Ст. преподаватель Каф МТЭР  
факультета ПМ-ПУ



Тумка О.А.