

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

на диссертационную работу Бурхонзода Амондуллои Саидали на тему **«КОМПЬЮТЕРНЫЙ АНАЛИЗ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ С ИОННЫМ ДОПИНГОМ СТРУКТУРЫ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ И КЛАССИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ»**, представленную на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности: 05.16.09 – Материаловедение (в нанотехнологии).

Характеристика научной и производственной деятельности соискателя

Бурхонзода Амондуллои Саидали 1994 года рождения. В 2017 году окончил физический факультет Таджикского национального университета по специальности «Вычислительные машины». В сентябре 2017 года начал работу в Таджикском техническом университете имени академика М.С. Осими в качестве ассистента кафедры «Информатика и вычислительная техника».

Бурхонзода А.С. начал свои исследования в 2017 г., уже с пятого курса обучения в университете, затем продолжил работу над диссертационным проектом по указанной тематике в качестве ассистента ТТУ им. акад. М.С. Осими, а с 2018 года в качестве соискателя кафедры физики вышеназванного университета.

За время работы Бурхонзода А.С. стажировался в ОИЯИ (ОБЪЕДИНЕННОМ ИНСТИТУТЕ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ,) г. Дубна, Московской обл., Российской Федерации, где диссертант тесно сотрудничает с Лабораторией нейтронной физики им И.М. Франка ОИЯИ, а также, с Университетом Васеда, Токио, Японии. То есть, работая над диссертационным проектом соискатель тесно сотрудничает в составе широкой международной коллаборации Таджикистан-Россия-Япония, что подчеркивает степень достоверности и важности полученных ими научных результатов, освещенности тематики исследования международной научной аудиторией. Результаты исследований Бурхонзода А.С. неоднократно докладывались на международных и республиканских конференциях и семинарах.

Бурхонзода А.С. является автором 24 научно-методических работ, в том числе 9 по теме диссертации. Из них 6 научных работ опубликовано в журналах, включенных в реестре ВАК-а при Президенте Республики Таджикистан.

Оценка диссертации

В диссертационной работе автором Бурхонзода Амондуллои Саидали выполнен огромный объем исследования по компьютерному анализу целого ряда функциональных наноматериалов, которые имеют значительный научно-практический интерес для инженерии дизайна и создания новых материалов в современной и будущей нанотехнологий. В диссертационной работе соискатель эффективно применяя комбинированные методы компьютерного молекулярно-динамического (МД) моделирования осуществил масштабные исследования металлооксидных материалов с эффектом ионного допирования (легирования) структуры, с последующим изучением их электронных, энергетических и кристаллических свойств, зон зарядовой проводимости и т.д. Исследование эффектов допирования чужих ионов в исходную кристаллических решётки функциональных материалов диссертантом Бурхонзода А.С. выполнено в рамках теории функционала плотности (ТФП) с целью определения энергетических параметров, значения всех видов энергии, оценка значений ширины запрещённой зоны, энергетических зон и плотности состояния, т.д. Следует отметить, что модификация структурных и функциональных свойств наноматериалов на основе эффектов допирования или легирования их структуры (замещения чужих ионов в исходной кристаллической решетке) является передовой областью в современном материаловедении и представляет значительный инженерно-прикладной интерес в микроэлектронике, химии и бионанотехнологий.

Развиваемая диссертантом исследования по теории функционала плотности реализованы посредством применения эффективных платформ компьютерного моделирования с программным кодом WEIN2k. По теме

диссертации соискателем исследованы структурные, электронные, геометрические и энергетические свойства ZrO_2 , где учтены нетривиальные процессы ионного допирования данного перспективного материала. С помощью программного пакета WIEN2k выполнены геометрические оптимизации структуры вышеназванного материала, в результате которого получены значения постоянной решетки и энергетические параметры системы. Получены зависимости параметров и объема решетки ZrO_2 , энергий ZrO_2 , расстояния между атомами в ZrO_2 от концентраций допированных ионов Y и Ti.

Далее диссертантом последовательно исследовались электронные свойства и состояния, энергетические характеристики оксидных систем с учетом нетривиальных процессов ионного допирования материалов. По результатам геометрической оптимизации систем вычислены значения координат всех атомов в элементарных ячейках $ZrO_2:Y$ и $ZrO_2:Ti$. Важно отметить, что использование функциональных материалов во многих приложениях сильно зависит от величины ширины запрещенной зоны материала. При этом, для оксидных материалов (типа диоксида циркония, ZrO_2) изучены зависимости запрещенной зоны от концентраций легированных (допированных) атомов Y и Ti. Установлены геометрическое и энергетическое зависимости оксидных систем от концентраций допантов (легированных атомов замещения).

Автореферат адекватно отражает основное содержание диссертации.

Считаю, что диссертационная работа Бурхонзода А.С. **«Компьютерный анализ функциональных материалов с ионным допингом структуры методами квантовой химии и классической молекулярной динамики»** удовлетворяет всем требованиям в соответствии с пунктом 116 «Порядка присвоения ученых степеней и присуждения ученых званий (доцента, профессора)» (постановление Правительства Республики Таджикистан от 26 ноября 2016 года, № 505 п.9-14, предъявляемым к кандидатским

диссертациям, а сам диссертант Бурхонзода Амондуллои Саидали заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.16.09 – Материаловедение (в нанотехнологии).

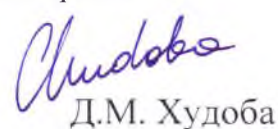
Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, профессор,
Ведущий научный сотрудник лаборатории
нейтронной физики им И.М.Франка
Объединенного института ядерных
исследований
e-mail: mirzo@jinr.ru



X.T. Холмуродов

Подпись Холмуродова Холмирзо Тагойкуловича удостоверяю.
Ученый секретарь Лаборатории нейтронной
физики им И.М.Франка Объединенного
института ядерных исследований



Д.М. Худоба

Лаборатория нейтронной физики имени И.М. Франка, ОИЯИ,
ул. Жолио-Кюри 6, г. Дубна, Московская обл., Россия, 141980
e-mail: dmn@nf.jinr.ru, тел.: +7 (49621) 6-50-96

