

ОТЗЫВ

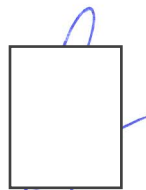
на автореферат диссертационной работы Залого А.Н.
«Автоматизация метода полнопрофильного анализа поликристаллов
с использованием генетических алгоритмов»,
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.01 – приборы и методы экспериментальной физики.

Диссертационная работа А.Н.Залого «Автоматизация метода полнопрофильного анализа поликристаллов с использованием генетических алгоритмов» посвящена развитию методов определения структуры поликристаллических материалов из данных порошковой рентгеновской дифракции. С конца 60-х годов прошлого столетия широкое распространение получил метод уточнения кристаллической структуры вещества, известный как метод Ритвельда, в котором вариацией структурных параметров осуществляется минимизация разности между экспериментально измеренной рентгенограммой и рентгенограммой, рассчитанной с использованием некоторой модели структуры. При этом проблема поиска исходной модели структуры, пригодной для уточнения, до настоящего времени не решена. Поэтому работа по применению мультипопуляционного параллельного генетического алгоритма (МПГА) для поиска структурной модели, оценки ее пригодности для уточнения структуры и дальнейшему проведению уточнения структуры обладает несомненной актуальностью.

Работа состоит из трех основных частей, в первой из которых рассмотрены существующие методы определения структуры из порошковых рентгенодифракционных данных, вторая содержит подробное описание созданного программного обеспечения и его тестирования с использованием известных структур. В третьей части приведены результаты определения и уточнения структуры комплексов платины и палладия с помощью реализованного алгоритма. По теме диссертации автором опубликованы 13 статей в российских и иностранных журналах и 11 тезисов докладов в сборниках трудов национальных и международных конференций. Программа структурного анализа с использованием МПГА имеется в свободном доступе на сайте ЦКП Сибирского Федерального Университета.

Работа производит весьма благоприятное впечатление. Диссертация является законченным исследованием, выполнена на очень высоком уровне. В ходе работы использованы вычислительные возможности суперкомпьютерного кластера. Достоверность полученных результатов и сделанных выводов не вызывает сомнений. Судя по автореферату, диссертация удовлетворяет требованиям п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Залого Александр Николаевич, без сомнения заслуживает присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.01 – приборы и методы экспериментальной физики.

Старший научный сотрудник лаборатории
методов синхротронного излучения, к.х.н.



М.Р.Шарафутдинов

Шарафутдинов Марат Рашидович
Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН
ул. Кутателадзе, 18,
630128, Новосибирск
Тел. (383) 332-40-02, E-mail: marats@inp.nsk.su

Подпись г. *Шарафутдинов М.Р.*
Заверяю *Абулешева С.В.*
Зав. канцелярией
ИХТТМ

