

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Щербаня Дмитрия Сергеевича «Моделирование инфракрасных спектров щелочно-галоидных кристаллов», представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

В настоящее время разработка технологических решений и развитие средств автоматизации, предназначенных для прогнозирования свойств функциональных материалов, представляют перспективные направления фундаментальных и прикладных исследований. Это обуславливает актуальность и практическую значимость развиваемого в диссертации научного направления. Диссертационная работа Д.С. Щербаня направлена на разработку совокупности вычислительных средств, позволяющих эффективно моделировать частотные диэлектрические характеристики щелочно-галоидных кристаллов. В числе важнейших результатов, полученных автором, можно отметить следующие. Сформулировано и обосновано решение задачи разработки наиболее эффективной модификации математической модели инфракрасных спектров щелочно-галоидных кристаллов. Предложена численная методика расчета параметров кристалла. Разработан программный модуль для решения проблемно-ориентированной задачи. Проведены расчеты поляризационных спектров и проверка адекватности результатов моделирования. Выявлены общие закономерности частотных диэлектрических характеристик щелочно-галоидных кристаллов по данным вычислительных экспериментов.

По тексту автореферата можно сформулировать отдельные замечания. Хотя научный стиль автореферата выдержан и структура соответствует общепринятым нормам, он содержит некоторые стилистические неточности. Так, например, не является корректным название рисунка 2 на странице 10: «Структурная схема процесса ионной поляризации модифицированной кибернетической модели». Несколько пространно представляется вывод по данным вычислительного эксперимента на стр. 14: «Спектр выглядит лучше, как с количественной, так и с качественной точки зрения» – следовало четко сказать о качественном соответствии результатов моделирования данным эксперимента, либо привести количественную оценку погрешности. Вопрос вызывает вывод о верификации результатов расчета: «Полученные результаты моделирования позволяют предположить адекватность расчетной методики» – проверено ли это предположение? Тем не менее, технические неточности и отсутствующие пояснения в автореферате не снижают достоинств диссертационной работы и важности полученных результатов.

В целом, можно отметить, что выполненная диссертационная работа достаточно полно обоснована, имеет законченный характер, обладает внутренним единством и представляет решение важной задачи, выполненной соискателем по научной специальности «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Достаточный научный уровень и квалификацию подтверждают научные публикации автора, в числе которых семь работ, опубликованных в научных изданиях, рекомендованных ВАК РФ, патенты на полезные модели и свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ. Научные результаты, полученные в диссертации, прошли апробацию на научных мероприятиях всероссийского и международного уровня.

Таким образом, можно заключить, что основные результаты, представленные в диссертации, достоверны и убедительны, обладают новизной, научной и практической значимостью. Диссертация Щербаня Дмитрия Сергеевича «Моделирование инфракрасных спектров щелочно-галлоидных кристаллов» отвечает требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Профессор кафедры  
«Математический анализ  
и моделирование»,  
д-р физ.-мат. наук, доцент

Масловская Анна Геннадьевна

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования «Амурский государственный университет»

675027, Амурская область,  
г. Благовещенск,  
Игнатьевское шоссе, 21.  
Тел. сот.: 89638168419.  
E-mail: [maslovskayaag@mail.ru](mailto:maslovskayaag@mail.ru)

