

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Квашнина Александра Геннадьевича «Компьютерный дизайн новых функциональных и конструкционных материалов с заданными физико-химическими свойствами для целенаправленного синтеза» на соискание учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа Квашнина А.Г. «Компьютерный дизайн новых функциональных и конструкционных материалов с заданными физико-химическими свойствами для целенаправленного синтеза» посвящена актуальной теме – компьютерному предсказанию и исследованию физических свойств новых сверхтвёрдых и сверхпроводящих материалов. В работе проведены исследования по предсказанию большого количества различных соединений, среди которых бориды, карбиды и нитриды переходных металлов, а также гидриды большого количества элементов.

Интересным результатом в работе Квашнина А.Г. является установление взаимосвязи между химическим составом и сверхпроводящими характеристиками бинарных гидридов металлов. Это стало возможным благодаря использованию большого набора теоретических методов, включая методы искусственного интеллекта. Этот результат является важным, поскольку он определяет наиболее перспективные области сверхпроводящих гидридов для дальнейшего экспериментального исследования.

К несомненному достоинству данной работы следует отнести сотрудничество с экспериментаторами, что позволило продемонстрировать возможность синтеза предсказанных соединений. Полученные экспериментальные результаты по исследованию сверхтвёрдого высшего бориды вольфрама открывают возможности потенциального использования этого соединения. Синтез сверхпроводящего гидрида тория – одно из наиболее ярких событий последнего времени в российской науке. Также представляют большой интерес результаты по предсказанию высших нитридов металлов при высоких давлениях, потенциальных высокоэнергетических материалов.

У меня нет существенных замечаний по автореферату. Не всегда из текста понятно где границы по давлению динамической стабильности предсказанных модификаций. Нет обсуждения парциального вклада электронов от атомов водорода и металла в плотность состояний сверхпроводящих гидридов. По-видимому, эти вопросы обсуждаются в самой диссертации. Имеется несколько опечаток (НТСП вместо ВТСП). Но все эти замечания несущественны.

Относительно небольшое число публикаций с лихвой компенсируется очень высоким уровнем научных журналов соответствующего профиля, что не дает сомневаться в достоверности выводов и защищаемых положений.

Считаю, что диссертационная работа Квашнина А.Г. является законченным научным исследованием и соответствует требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в Национальном исследовательском технологическом университете "МИСиС", предъявляемым к докторским диссертациям. Результаты и выводы, сформулированные в работе, имеют важное значение для развития нового направления исследований в данной области. Квашнин Александр Геннадьевич заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Федеральное государственное
бюджетное учреждение науки
«Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Вережагина
Российской академии наук»
108840, г. Москва, г. Троицк,
Калужское шоссе, стр. 14,
Директор,
Академик РАН
тел. +7(495)851 00 11
Email: brazhkin@hppi.troitsk.ru

18.01.2021



Вадим Вениаминович Бразкин

*Подпись В.В. Бразкина заверю
Зам. дир. ИФВД РАН К.Р. Литасов*