

Отзыв на автореферат

диссертационной работы Александра Геннадьевича Квашнина на тему «Компьютерный дизайн новых функциональных и конструкционных материалов с заданными физико-химическими свойствами для целенаправленного синтеза», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

На сегодняшний день во многих областях промышленности существует необходимость поиска и разработки новых материалов, обладающих улучшенными характеристиками по сравнению с используемыми. В первую очередь такая необходимость ощущается в добывающей промышленности и сильноточной электронике. Однако, разработка новых материалов традиционными методами требует большого количества времени и ресурсов. Решением по более эффективному поиску новых материалов с необходимыми свойствами может являться использование методов компьютерного материаловедения для прогнозирования структуры, исследования физических и физико-химических свойств новых соединений на компьютере с последующим экспериментальным синтезом наиболее перспективных.

Работа А. Г. Квашнина посвящена компьютерному поиску кристаллической структуры сверхтвердых и сверхпроводящих материалов с последующим исследованием их свойств как теоретическими, так и экспериментальными (в сотрудничестве с другими научными группами) методами.

В работе представлено детальное описание поиска новых сверхтвердых материалов среди боридов переходных металлов.

Результаты эволюционного поиска, проведенного с помощью программного пакета USPEX, показывают возможность существования нового соединения – пентаборида вольфрама. Теоретические исследования этого соединения показали, что оно обладает уникальным сочетанием твердости по Виккерсу и трещиностойкости, что говорит о потенциальном его использовании в добывающей промышленности в качестве основы для буровых резцов. Полученные теоретические данные позволили синтезировать это соединение и детально исследовать его кристаллическую структуру. Практическая значимость проведенного исследования подтверждается патентом на способ получения высшего борида вольфрама, который может использоваться в добывающей промышленности.

Другой не менее важной с практической точки зрения часть диссертации является предсказание новых сверхпроводящих соединений на основе гидридов металлов. Достижение сверхпроводимости без охлаждения до сверхнизких температур являлось недостижимой целью исследователей на протяжении долгих лет. Бинарные системы гидридов, стабилизированных сверхвысокими давлениями, являются одними из наиболее перспективных соединений, в которых ожидается наблюдение комнатной сверхпроводимости. В диссертации были подробно исследованы системы гидридов урана, тория, актиния и лантана как потенциальных высокотемпературных сверхпроводников.

В системе гидридов тория был предсказан декагидрид тория с рассчитанной критической температурой перехода в сверхпроводящее состояние выше 200 К при давлении 100 ГПа. Результаты теоретического исследования позволили синтезировать это соединение и измерить его сверхпроводящие характеристики в присутствии сильных

магнитных полей, что полностью подтвердило сверхпроводящую природа данного соединения.

Крайне интересным считаю проведенное исследование по установлению взаимосвязи между химическим составом и сверхпроводящими характеристиками бинарных гидридов. Анализ имеющихся теоретических и экспериментальных данных совместно с разработанной нейронной сетью позволили получить распределение сверхпроводящих характеристик гидридов элементов по таблице Менделеева и определить наиболее перспективные области для дальнейших экспериментальных исследований.

Хотел бы отметить несколько замечаний к автореферату

1. Не совсем удачные формулировки, касающиеся описания экспериментальных результатов, например, фразу «в сотрудничестве с Институтом физики высоких давления им. Л.Ф. Верещагина РАН и ООО «Газпромнефть НТЦ» экспериментально синтезирован сверхтвёрдый материал на основе предсказанного высшего борид вольфрама при температуре ~ 1000 К» лучше бы заменить на «в сотрудничестве с Институтом физики высоких давления им. Л.Ф. Верещагина РАН и ООО «Газпромнефть НТЦ» на основе предсказанного высшего борид вольфрама синтезирован сверхтвёрдый материал при температуре ~ 1000 К экспериментально».
2. Нет расшифровки аббревиатуры ПСХЭ в тексте автореферата.
3. Подписи внутри Рис 1. на разных языках (ЭНК и QHA)
4. На странице 17 приведена таблица 1 с экспериментально измеренными значениями. Мне кажется эта информация излишней, потому что автор непосредственно не измерял твердость (можно было ограничиться 2-3 цифрами и ссылкой).

Приведенные замечания носят рекомендательный характер и не влияют на высокий уровень автореферата и диссертационной работы в целом.

Считаю, что диссертационная работа Александра Геннадьевича Квашнина выполнена на высоком научном уровне. Достоверность результатов обеспечивается выбором методов и параметров расчета, связанных с границами их применимости. Актуальность работы подтверждается списком опубликованных автором работ в ведущих рецензируемых научных журналах.

Диссертационное исследование А. Г. Квашнина полностью соответствует требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в Национальном исследовательском технологическом университете "МИСиС", а ее автор, Александр Геннадьевич Квашнин заслуживает присвоения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния (физико-математические науки).

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН,
Лаборатория акустической микроскопии
119334, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4,
главный научный сотрудник,
доктор физико-математических наук
тел. +7 (495) 939-71-72
Email: chernol-43@mail.ru

Леонид Александрович Чернозатонский

05.02.2021

Ученый секретарь ИБФ РАН
К.З.М.



Диссертация РН