

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации КВАШНИНА А.Г. «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»

В настоящее время активно развивается новое направление материаловедения – предсказание и исследование новых соединений и материалов, стабильных при различных условиях окружающей среды с помощью различных численных методов компьютерного моделирования. Во многих областях промышленности разработка новых материалов при использовании методов и подходов компьютерного моделирования становится востребованным, т.к. позволяет проводить целенаправленный поиск более уникальных с необходимыми свойствами материалов. Диссертационная работа Квашнина А.Г. посвящена компьютерному предсказанию новых сверхтвёрдых и сверхпроводящих соединений, обладающих потенциалом практического использования. В связи с этим диссертационная работа Александра Геннадьевича Квашнина несомненно является актуальной и представляет большой интерес для практики.

Достижением автора следует считать детально проведенное систематическое исследование возможности образования сверхтвёрдых боридов вольфрама с применением эволюционного алгоритма USPEX, предназначенного для предсказания кристаллических структур, и квантово-химических методов расчета. Полученные теоретические данные легли в основу экспериментальных исследований по созданию метода получения новых материалов на основе предсказанных высших боридов вольфрама. На способ получения сверхтвёрдого материала на основе высшего борид вольфрама для использования в добывающей промышленности был получен патент, что безусловно подтверждает практическую значимость проведенного исследования.

Исключительный интерес представляет последняя глава диссертации, посвященная обобщению данных о сверхпроводящих характеристиках различных гидридных систем, стабилизированных высокими давлениями. Использование методов статистического анализа, первопринципных расчетов и искусственного интеллекта позволили определить правила распределения сверхпроводящих характеристик гидридов по периодической системе химических элементов им. Д.И. Менделеева. Результаты теоретических исследований, безусловно, обладают новизной и практической значимостью, т.к. полученные данные определили направление для создания конкретных гидридных соединений и экспериментального определения их физических свойств.

Кроме этого, также можно отметить результаты, касающиеся обнаружения взаимосвязи между химическим составом и сверхпроводящими характеристиками бинарных гидридов металлов. Было показано, что с увеличением числа d -, f -электронов сверхпроводящие свойства гидридов металлов становятся менее выраженными. Автор объясняет этот эффект ослаблением химического связывания между атомами водорода при допировании электронов в подрешётку атомов водорода от атомов металла.

Замечания, которые возникли в ходе прочтения автореферата:

1. Неясно, что имеет в виду автор, когда пишет об учете энергии нулевых колебаний в вопросах определения стабильности систем: «Учёт энергии нулевых колебаний приводит к стабилизации нового соединения – пентаборида вольфрама...»; или «Вклад энергии нулевых колебаний учитывался только для термодинамически стабильных...» и т.д. Ведь при расчете термодинамических свойств любых систем всегда нужно учитывать энергию нулевых колебаний, т.к. нулевые колебания реально существуют. В связи с этим возник вопрос: если атомы водорода заменить на атомы

дейтерия, то что можно ожидать в термодинамических и сверхпроводящих свойствах многих рассматриваемых систем?

2. Соискателю стоило кратко указать в автореферате используемые методы расчета электронной структуры для понимания уровня точности полученных теоретических результатов.

3. Для обозначения атомов металла автор использует символ "Me". Согласно правилам, установленным химической номенклатурой ИЮПАК (IUPAC), таким символом обозначается метильная группа. Лучше было бы использовать символ "M". Сокращения ВТСП, НТСП, ПСХЭ, ЭФВ, SCDFТ даны без расшифровки. В статьях № 5, 11, 14 из списка основных публикаций по теме диссертации отсутствуют названия журналов.

4. Текст автореферата содержит орфографические и пунктуационные ошибки/опечатки (например, "...пародоразрушающим инструментом...", "...можно заменить, что..."), неудачные выражения: «в разделе 5.3 был проведён целенаправленный синтез декагидрида тория... или в разделе 6.3.2 диссертации было проведено изучение сверхпроводящих...». Наверное, лучше было написать : ...в этих разделах были представлены результаты....

Замечания носят уточняющий характер, не подвергают сомнению результаты исследований и не занижают квалификационный и творческий уровень соискателя.

Основываясь на материале, изложенном в автореферате, и на публикациях автора, входящих в число рекомендованных ВАК и индексируемых базами Webofscience и Scopus, считаю, что диссертационная работа «Компьютерный дизайн новых функциональных и конструкционных материалов с заданными физико-химическими свойствами для целенаправленного синтеза» Александра Геннадьевича Квашнина выполнена на высоком научном уровне. 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 неорганической химии им. А.В. Николаева

Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН)

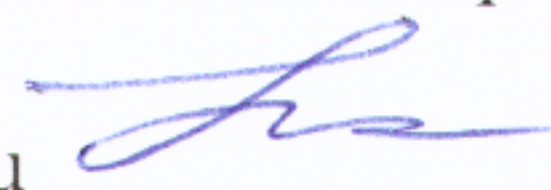
Лаборатория физической химии конденсированных сред

630090, Новосибирск, Пр. Академика Лаврентьева, 3,

Заведующий лабораторией физической химии конденсированных сред,

доктор физико-математических наук,

Тел. +7 383 330-75-31, email: sgk@niic.nsc.ru



Светлана Геннадьевна Козлова

Подпись Козловой С.Г. заверяю

18.01.2021

Подпись Козловой С.Г.
заверяю Гerasimov O.A.
Ученый секретарь ИНХ СО РАН
" 18 " 01 2021

