

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 может служить использование методов компьютерного моделирования для прогнозирования структуры, исследования физических свойств новых соединений с последующим экспериментальным синтезом наиболее перспективных.

В работе А. Г. Квашниным представлено подробное и систематическое исследование новых сверхтвердых материалов среди боридов переходных металлов. Результаты эволюционного поиска показывают возможность существования нового высшего борида вольфрама –  $WB_5$ . Теоретические исследования показали, что  $WB_5$  проявляет уникальное сочетание твердости по Виккерсу и трещиностойкости, что говорит о возможности использования в добывающей промышленности в качестве основы для буровых резцов вместо традиционного победита. На основе теоретических данных были проведены эксперименты по синтезу нового материала на основе пентаборид вольфрама. Детальное исследование структуры синтезированных образцов показало, что соединение имеет состав  $WB_{5-x}$ . Практическая значимость проведенного исследования подтверждается полученным патентом на способ получения высшего борид вольфрама.

Другой не менее важной с практической точки зрения частью 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. Наиболее интересной частью 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, что определяет области наиболее перспективных гидридов для дальнейших экспериментальных исследований.

Из замечаний в ходе прочтения автореферата следует отметить, что при вычислении твердости материалов используются модели Ляхова-Оганова и Манжика-Оганова. При этом вторая модель фактически является развитием первой. Наверное, было бы более показательно применять две несвязанные между собой модели.

Считаю, что диссертационная работа Александра Геннадьевича Квашнина выполнена на высоком научном уровне. Актуальность работы подтверждается списком опубликованных автором работ в ведущих рецензируемых научных журналах, приведенных в автореферате. Достоверность результатов обеспечивается выбором

методов и параметров расчета, связанных с границами их применимости. 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 физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина  
Российской академии наук»  
108840, г. Москва, г. Троицк,  
Калужское шоссе, стр. 14,  
ведущий научный сотрудник  
д.ф.-м.н.  
тел. +7(495)851 00 11  
Email: fomin314@gmail.com

Юрий Дмитриевич Фомин

08.02.2021

Подпись Ю. Д. Фомина  
удостоверено

Членский секретарь ИФВД РАН  
к. ф.-м.н. Т. В. Власова

