

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»

Поиск и разработка новых материалов, обладающих улучшенными физическими свойствами по сравнению с традиционно используемыми материалами, является одной из важнейших составляющих научно-технического прогресса. Наряду с экспериментальными исследованиями, разработка новых материалов требует проведения глубокого теоретического анализа. Компьютерное моделирование существенно повышает эффективность поиска и сокращает время разработки новых материалов. Современные методы компьютерного моделирования позволяют с высокой точностью предсказывать кристаллическую структуру новых материалов с заданными свойствами, их свойства и термодинамические условия синтеза. Получаемые данные используются для проведения экспериментов.

Диссертационная работа Квашнина А.Г. посвящена компьютерному предсказанию новых материалов, относящихся к классу сверхтвердых и сверхпроводящих. Физические свойства предсказанных соединений были исследованы с помощью современных методов компьютерного моделирования. В работе показано, что предсказанные соединения обладают потенциалом практического использования.

Одним из наиболее важных результатов считаю комплексное исследование высших боридов вольфрама, которые позволили разработать способ получения нового материала для применений в качестве инструментальных материалов широкого спектра назначений. Помимо этого, полученные данные позволили построить диаграммы твердость по Виккерсу - трещиностойкость твердых и сверхтвердых материалов, которые имеют большое практическое значение. В области сверхпроводящих материалов в работе А.Г. Квашнина основное внимание уделено новому классу высокотемпературных сверхпроводников – гидридам металлов. Исследовано большое количество гидридных систем, наиболее перспективные из которых были впоследствии синтезированы на основе данных моделирования. Полученные данные были детально проанализированы и на основании сопоставления с известными данными, полученными другими авторами, выявлены основные закономерности распределения сверхпроводящих характеристик гидридов химических элементов, которые позволяют определять гидридные системы с наибольшей критической температурой, близкой к комнатной.

В диссертации Квашнина А.Г. проведены исследования высокого уровня, о чем свидетельствуют и значительное число опубликованных работ авторов издания, рекомендованных ВАК и индексирующихся базами Web of Science и Scopus. 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
научное учреждение «Технологический
институт сверхтвердых и углеродных материалов»
Лаборатория физических свойств наноструктур
108840, г. Москва, г. Троицк,
ул. Центральная, 7а.
Главный научный сотрудник,
доктор физико-математических наук
тел. +7 (499) 400 62 25
Email: buga@tisnum.ru

Буга Сергей Геннадьевич

Подпись г.н.с. дф.-м.н. С.Г. Буги удостоверяю
Ученый секретарь ФГБНУ ТИСНУМ
К.т.н.



09.02.2021

Д.В. Батов