

## Отзыв

на автореферат диссертации **Луговского Андрея Вячеславовича «Исследование из первых принципов фазовой стабильности и упругих свойств переходных металлов при сверхвысоких давлениях»**, представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - «Физика конденсированного состояния»

Автореферат А.В. Луговского посвящен актуальным вопросам механической и фазовой стабильности металлических материалов при сверхвысоком давлении. Автором с помощью численных расчетов в рамках теории функционала плотности изучены особенности упругого поведения ОЦК фаз ниобия, молибдена, вольфрама и ГПУ фазы рутения. Расчеты покрывают широкий интервал давлений, вплоть до давлений, сравнимых по величине с модулем объёмного сжатия. Их результаты хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными. В ходе исследования получены новые интересные результаты: дано квантово-механическое объяснение механизма фазового перехода ОЦК-ДГПУ в молибдене, расчетным путем обнаружена особенность поведения упругой постоянной  $C'$  в ОЦК ниобии при высоком давлении. Следует отметить теоретическую цельность и последовательность развиваемого подхода к вычислению упругих свойств напряженных металлов. В работе реализованы два способа расчёта упругих постоянных, использующих тензор деформаций Лагранжа. Для объяснения причин наблюдаемых явлений А.В. Луговским рассчитывается и анализируется электронная структура металлов, привлекаются литературные данные о динамике решётки.

По автореферату можно сделать небольшое замечание. Уравнение состояния вольфрама, рассчитанное автором, хорошо согласуется с данными эксперимента. Однако при предельно высоких давлениях, где эксперимент не проводился, расчет заметно отличается от опубликованных ранее результатов, вычисленных методом полного потенциала. Было бы полезно в рамках настоящей теоретической схемы повторить расчет методом полного потенциала, что выявило бы причину расхождения.

Указанный недостаток не сказывается на общем хорошем впечатлении от работы и ценности её результатов. Ознакомление с авторефератом не оставляет никаких сомнений, что диссертация А. В. Луговского представляет собой законченную работу, выполненную на высоком научном уровне. Она полностью отвечает требованиям ВАК, а соискатель заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - «Физика конденсированного состояния».

Главный научный сотрудник  
Физического института им. П.Н. Лебедева РАН,  
доктор физ.-мат. наук

Ю. А. Успенский

Подпись Ю.А. Успенского удостоверяю:

И.О. Ученого секретаря  
Физического института им. П.Н. Лебедева РАН



М.М. Цвентух

119991 ГСП-1 Москва, Ленинский проспект, д.53, ФИАН, к. 129,  
телефон: +7(499) 135-75-11, эл. почта: uspenski@lpi.ru