

Отзыв

официального оппонента на диссертационную работу Луговского Андрея Вячеславовича «Исследование из первых принципов фазовой стабильности и упругих свойств переходных металлов при сверхвысоких давлениях», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - «Физика конденсированного состояния».

Уровень современного первопринципного моделирования позволяет исследовать материалы с точностью, приближающейся к экспериментальным работам. В совокупности с последними достижениями техники параллельных компьютерных вычислений методы квантово-механических расчётов дают возможность эффективно проводить оценки свойств широкого круга материалов при условиях, приближенных к реальным. Тем не менее, остаётся не мало вопросов о вычислениях свойств материалов в недоступных или труднодоступных для эксперимента условиях. Расчёты при высоких давлениях и температурах из первых принципов предъявляют высокие требования как к инструментам расчёта – реализации теории функционала плотности и описанию потенциала, так и к технике расчёта. Несомненно, такие работы являются очень актуальными.

В работе Луговского А. В. «Исследование из первых принципов фазовой стабильности и упругих свойств переходных металлов при сверхвысоких давлениях» рассмотрен ряд проблем изучения свойств твёрдых тел под давлениями, сравнимыми с величиной объёмного модуля сжатия переходных металлов. Автор использует современную и надёжную реализацию функционала электронной плотности и современные приближения обменно-корреляционного потенциала. Работа обладает научной новизной и актуальностью. Результаты работы могут быть использованы в технике высоких давлений и для анализа возможностей

современных расчётных техник для вычислений при экстремальных условиях. Развитые в работе техники значительно расширяют возможности метода вычисления упругих свойств методом малых конечных деформаций по сравнению с предыдущими работами на эту тему.

Диссертация логично и просто структурирована. Работа разделена на введение, три главы, заключение и список литературы. Работа изложена на 118 страницах и оформлена согласно требованиям ВАК.

Во введении приведены стандартные для диссертационной работы сведения: цель и задачи исследования, разработанность темы диссертации, практическая ценность, научная новизна, защищаемые положения и основные результаты работы. Обозначены объекты исследования – ряд переходных металлов пятой, шестой и восьмой групп периодической системы элементов, как хорошо изученных под давлением, так и не исследованных в гигапаскальном диапазоне: рутения, молибдена, вольфрама и ниобия. Изложен личный вклад автора и его соавторов в публикациях по теме диссертации.

В первой главе автором сделан достаточно полный обзор литературы на тему исследования. Большое внимание в работе уделено различным техникам расчёта упругих постоянных и применению этих величин для оценки структурной стабильности твёрдых тел. Автором введён необходимый теоретический аппарат для подобных исследований. Рассмотрены критерии механической стабильности, приведены необходимые сведения из теории динамической стабильности и теории мягкой фононной моды, описан теоретический аппарат теории деформационных фазовых переходов. Далее автором кратко описаны экспериментальные методы получения упругих постоянных и исследований при высоких и сверхвысоких давлениях. В главе также проведён обзор литературных данных об упругих свойствах, механической, динамической и электронной стабильности объектов исследования.

Методика работы описана автором во второй главе диссертации. Для вычисления

упругих постоянных кристаллов изучаемых материалов автор использует значения энергии и напряжения, вычисленные методом функционала плотности. В работе для этих целей использован надёжный и современный научный пакет VASP. Выбранные параметры расчёта и приближения, использованные автором, позволяют ожидать высокой точности полученных результатов. Описанные методики расчёта упругих постоянных под давлением расширяют возможности применения метода конечных деформаций для исследования твёрдых тел.

В третьей главе приводятся результаты работы. Глава состоит из разделов, каждый из которых посвящён результатам расчёта одного из изученных в работе материалов. Для каждого из переходных металлов рассчитаны и проанализированы уравнение состояния, упругие постоянные второго и третьего порядка, критерии механической стабильности и, в некоторых случаях, электронная структура. Основные выводы по работе приведены в заключении.

Работа производит положительное впечатление. Автором успешно решены поставленные задачи описания свойств переходных металлов под давлением. Получены новые данные об упругих свойствах выбранных объектов под давлением. Особый интерес представляют результаты, демонстрирующие механизм фазовых превращений под давлением с учётом особенности динамики решётки и электронной структуры исследуемых материалов. Также важным является расширение возможностей применения метода конечных деформаций к металлам с гексагональной кристаллической решёткой.

По работе возникли следующие замечания и вопросы:

- 1) В случае молибдена и вольфрама интересно было бы исследовать механическую стабильность конкурирующей фаз, в том числе стабилизирующейся с давлением ДГПУ фазы. Подобные расчёты не приведены в работе.
- 2) Автор обращает внимание на важность выбора диапазона и шага деформации при расчёте упругих постоянных, однако в тексте этот вопрос освещён недостаточно

подробно.

3) Вывод о важности учёта деформации при описании особенностей упругих свойств вблизи топологического фазового перехода в ниобии является интересным, но небесспорным. Ясность в вопрос могло бы внести применение хорошо разработанного аналитического аппарата, позволяющего оценить влияние такого перехода на упругие свойства.

4) Текст диссертации содержит опечатки, в некоторых случаях затрудняющие чтение работы. Автореферат написан более тщательно.

Диссертация Луговского Андрея Вячеславовича на соискание степени кандидата физико-математических наук «Исследование из первых принципов фазовой стабильности и упругих свойств переходных металлов при сверхвысоких давлениях» является завершённым научным исследованием. Выводы диссертации обоснованы, результаты расчётов получены с достаточно высокой точностью и подтверждены сравнением с опубликованными теоретическими и экспериментальными данными. Работа выполнена на высоком научном уровне, посвящена актуальным проблемам современной физики конденсированного состояния и удовлетворяет всем критериям новизны, достоверности и практической значимости. Автореферат полностью отражает основное содержание диссертации.

Представленные в работе результаты опубликованы в ведущих российских и зарубежных физических журналах, разрешенных ВАК РФ, и доложены на российских и международных конференциях.

Диссертационная работа Луговского Андрей Вячеславовича «Исследование из первых принципов фазовой стабильности и упругих свойств переходных металлов при сверхвысоких давлениях» полностью удовлетворяет требованиям раздела II Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24.09.2013 г. Автор работы, Луговской Андрей

Вячеславович, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - «Физика конденсированного состояния».

Профессор “Московского государственного университета информационных технологий, радиотехники и электроники ” (МИРЭА)

д.ф.-м.н., проф.

М.С.Блантер

М.С.Блантер

4 декабря 2015г.

Москва, ул. Стромынка 20, моб. 8-915-250-83-74

mike.blanter@gmail.com

