

## **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»**

Исследование фазовой стабильности твёрдых тел при экстремальных статических давлениях является сложной экспериментальной задачей. Соответствующие измерения имеют высокую себестоимость и трудны в исполнении. Вместе с тем наблюдается явный интерес к таким экспериментам, и доступными для исследования становятся всё более высокие давления. Численное моделирование материалов при высоких степенях сжатия имеет важное значение в этой области. Наиболее эффективным показал себя метод первопринципного моделирования. Существует не один пример как подтверждённых экспериментально предсказаний поведения материалов под давлением с помощью теоретических вычислений, так и удачных теоретических объяснений наблюдаемых под давлением явлений. Исходя из вышеперечисленного, актуальность диссертационной работы Луговского А. В. не вызывает сомнения.

Работа содержит достаточное количество новых научных данных о зависимости упругих постоянных переходных металлов, а также их электронных свойств под давлением. Вывод о достоверности результатов работы может быть сделан по результатам сравнения рассчитанных данных с доступными экспериментальными значениями. Значения регулирующих точность параметров расчётов представленных в работе, превышают величины обычно используемые при исследованиях по данной тематике. Выбор столь высоких значений определяется спецификой задачи: в работе рассчитываются упругие постоянные высших порядков. Выбор объектов исследования – переходных металлов с характерными кристаллическими решётками согласуется с тенденциями в области исследования материалов при сверхвысоких статических давлениях.

Представленные результаты доложены на международных и российских конференциях и опубликованы в виде научных статей в реферируемых журналах, входящих в список ВАК.

Диссертационная работа состоит из введения, трёх глав, заключения, списка литературы из 52 наименований и приложения. Работа изложена на 118 страницах и оформлена согласно требованиям ВАК.

Во введении обосновывается актуальность работы, сформулированы цель и задачи работы, определены её научная новизна, практическая ценность, приводятся защищаемые положения и основные результаты, а также изложен личный вклад автора. В первой главе,



имеющей вводный характер, рассматриваются теоретические основы применяемых в работе методов. Даются различные определения тензоров деформации, приводятся сведения о термодинамическом описании деформированного тела, вводятся понятия механической и динамической стабильности. Во второй главе описаны использованные в работе методы. Первая часть главы посвящена описанию реализации теории функционала плотности, использованной в работе, приводятся параметры расчёта. Во второй части главы описываются методы расчёта упругих постоянных. Описываются стандартные и широко используемые методы, а также техники, использованные в рамках данной работы включая реализованные автором методы вычисления упругих постоянных высших порядков. В третьей главе приводятся основные результаты работы. Представлены параметры уравнения состояния, упругие постоянные второго и третьего порядка исследованных металлов. На основе

полученных данных и сведений из литературы для молибдена описан механизм фазового превращения при сверхвысоких давлениях. Рассмотрены электронные свойства рутения и ниобия. В заключении сформулированы основные выводы по работе.

В целом автор успешно решил ряд задач, относящихся к методам вычисления упругих постоянных и изучению фазовой стабильности твёрдых тел. Наиболее интересными результатами, на мой взгляд, являются выводы о механизме фазового превращения в молибдене и подробное описание упругих свойств ниобия вблизи электронного топологического перехода.

Вместе с тем при прочтении диссертации возник ряд вопросов и замечаний:

- 1) Текст диссертации представлен с большим количеством опечаток, в том числе в названии разделов (раздел 2.7.1, 2.7.2) и заключении (пункт 4).
- 2) Список сокращений и обозначений значительно упростил бы чтение диссертации.
- 3) Электронные свойства вольфрама и ниобия описываются лишь “тезисно”. И хотя значительные изменения электронной структуры, как и качественные эффекты, связанные с ними, для молибдена и вольфрама давлением не ожидаются, подробное описание электронных свойств сделало бы анализ более последовательным.
- 4) Получены интересные данные об особенностях топологического фазового перехода в ниобии под давлением и в присутствии деформации, однако не дана количественная оценка полученного эффекта, хотя формализм для аналитической оценки влияния изменения плотности электронных состояний достаточно развит.

Представленная диссертация является завершённым научным исследованием. Полученные в работе результаты были опубликованы в ведущих российских и зарубежных физических журналах и доложены на российских и международных конференциях. Выводы диссертации обоснованы и подтверждены сравнением с опубликованными теоретическими и экспериментальными данными. Работа выполнена на высоком научном уровне и посвящена актуальным проблемам современной физики конденсированного состояния и удовлетворяет всем критериям новизны, достоверности и практической значимости. Автореферат полностью отражает основное содержание диссертации.

В целом, полагаю, что диссертационная работа «Исследование из первых принципов фазовой стабильности и упругих свойств переходных металлов при сверхвысоких давлениях» полностью удовлетворяет требованиям, сформулированным в разделе II Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24.09.2013 г., предъявляемым к

кандидатским диссертациям, а её автор, Луговской Андрей Вячеславович, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Заместитель директора, старший научный  
сотрудник Отделения теоретической физики  
Федерального государственного Бюджетного учреждения  
науки Физический институт им. П.Н. Лебедева  
РАН, кандидат физико-математических наук

*Иванов* О. В. Иванов

119991 ГСП-1 Москва, Ленинский проспект, д.53, ФИАН,

Телефон: +7(499)135 7511

e-mail: [ivanov@lpi.ru](mailto:ivanov@lpi.ru)

ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ

*И.О.* Ученый секретарь



*Иванов* / *Иванов* *И.О.*