

Отзыв

на автореферат диссертации 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»

В диссертационной работе Луговского А. В. рассматривается актуальная тема современной физики твёрдого тела – стабильность и свойства материалов при сверхвысоких давлениях. Получение статических давлений в гигапаскальном диапазоне доступно для экспериментальных исследований уже более 20 лет, тем не менее, такие измерения остаются сложной задачей. Теоретические исследования в этом случае позволяют решить несколько важных задач одновременно. Расчёты позволяют определить интересные для реального измерения объекты, определить фундаментальные причины уже наблюдаемых явлений, а также получить данные о свойствах, измерение которых в экспериментальных условиях затруднительно. Так данные о измерение упругих постоянных при сверхвысоких давлениях практически отсутствуют в литературе. Таким образом, рассматриваемая работа, безусловно, является актуальной.

Автор использует современную технику расчётов в рамках теории функционала плотности, реализованную в программном пакете VASP. Выбранные инструмент и подобранные параметры расчётов не вызывают нарекания. Выбранный диапазон давления 0-600 ГПа соответствует возможностям последних достижений техники создания статических давлений методом алмазных наковален. В работе автор развивает методику расчета упругих постоянных под давлением методом конечных деформаций. Автором показаны различия между зависимостями упругими постоянными под давлением, полученными с помощью этой техники и с помощью метода бесконечно малых деформаций. Отмечено, что различия проявляются вблизи структурной неустойчивости ОЦК фаз вольфрама и молибдена. Автор также обобщил методику расчёта упругих постоянных методом конечных деформаций, обобщив её на кристаллы с гексагональной решёткой. В работе методика применена к задаче вычисления упругих постоянных ГПУ рутения под давлением. В работе реализован и протестирован на примере ОЦК вольфрама метод расчёта упругих постоянных под давлением из соотношения напряжение -- конечная деформация. Наиболее интересным результатом является исследование упругих свойств ОЦК фазы ниобия вблизи электронного топологического перехода. Автором получен ряд новых важных данных об этом явлении.

Объём и содержание автореферата соответствует требованиям ВАК и позволяет получить достаточно полное представление о проделанной работе.

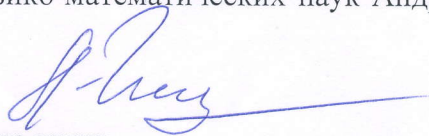
По автореферату можно привести следующие замечания: автор не рассматривает влияния и возможности применения упругих постоянных третьего порядка, хотя такое применение возможно, например, для оценки скорости звуковых колебаний с малой амплитудой. Следует отметить, что текст автореферата не свободен от грамматических ошибок, описок, сомнительных терминов и неточностей. Так на рис.3 на графиках плотности электронных состояний при различных давлениях не приведены величины давлений.

Данные замечания не влияют на общее положительное впечатление от прочтения автореферата.

Оценивая диссертацию, можно сказать, что она представляет собой самостоятельное и завершённое исследование, выполненное с применением современных расчетных методов. Высказанные замечания не затрагивают каким-либо серьёзным образом ни одно из защищаемых положений. Достоверность и обоснованность результатов диссертационной работы не вызывает сомнений и подтверждается публикациями в таких журналах как УФН, Journal of Applied Physics, Journal of Alloys and Compounds. Результаты диссертации представляют несомненный интерес для многих специалистов, работающих в этой области.

Оценивая диссертацию Луговского А. В. следует признать, что она удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Отзыв составлен профессором, доктором физико-математических наук Андреем Михайловичем Ионовым.



Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт физики твердого тела Российской академии наук (ИФТТ РАН), 142432, МО, г.

Черноголовка, ул. Академика Осипяна, д. 2,

e-mail: adm@issp.ac.ru телефон: 8 (496) 522-81-60

Подпись А.М.Ионова заверяю

Ученый секретарь ИФТТ РАН

В.Н.С., д.ф.-м.н.



Г.Е.Абросимова