

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Мосягина И. Ю. «Исследование нелинейных упругих свойств металлов пятой группы в рамках теории функционала плотности», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Работа посвящена теоретическому изучению упругих постоянных второго и более высокого порядка при давлениях, величина которых сравнима либо существенно превышает модули упругости исследуемых материалов. Актуальность темы определяется тем, что поведение материалов при экстремальных условиях является в настоящее время важным научным направлением, а на сегодняшний день подобные исследования с помощью доступных экспериментальных методов всё ещё остаются технически сложной задачей.

Методы теоретического моделирования, базирующиеся на первопринципных электронных расчетах (то есть без использования подгоночных параметров), в настоящее время получают все более широкое распространение как эффективное средство исследования структуры и физических свойств материалов. Для расчёта упругих постоянных в рамках теории функционала плотности принято применять метод, основывающийся на тензоре бесконечно-малых деформаций. Вследствие известных ограничений данный метод не может быть использован для изучения упругих свойств при степенях сжатия, соответствующих давлениям, величина которого сравнима с модулем упругости изучаемого материала.

В работе приводится алгоритм расчёта упругих постоянных второго и более высокого порядка, основанный на использовании тензора конечных деформаций Лагранжа. Приводится детальный алгоритм проведения подобного расчёта и конкретные выражения для разложений свободной энергии Гиббса по степеням компонент тензора деформации в случае кристаллов кубической симметрии. Также приводятся стандартные для данного типа работ проверки на сходимость в зависимости от выбора псевдопотенциала, энергии обрезания и плотности сетки интегрирования по зоне Бриллюэна. В тех областях давлений, где это целесообразно, проводятся сравнения между стандартным методом расчёта упругих постоянных и приведённым в работе модифицированным методом.

Полученные результаты согласуются с известными экспериментальными данными. Особый интерес представляет вывод о роли изменения электронной структуры и ЭТП в поведении упругих постоянных в зависимости от давления.

В качестве замечаний следует отметить:

- из текста автореферата не ясно, проводилось ли сравнение полученных результатов для псевдопотенциалов, специально сгенерированных для задач подобного рода, а также в зависимости от выбора обменно-корреляционного потенциала.
- Рассчитанные упругие модули обычно весьма чувствительны к выбору числа k -точек. Не ясно, проверялась ли сходимость результатов по числу k -точек.

В целом, судя по содержанию автореферата, диссертация выполнена на высоком уровне и отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Мосягин И. Ю., достоин присвоения ему ученой степени кандидата физико-математических наук.

Директор ЗАО «Институт квантового
материаловедения»
д. ф.-м.н.



Ю.Н. Горностырев