

## ОТЗЫВ

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

Диссертационная работа И. Ю. Мосягина посвящена актуальной проблеме – разработке методики расчета упругих постоянных второго и более высокого порядка под нагрузкой и исследованию нелинейных свойств кристаллических твердых тел из “первых принципов” в рамках теории функционала плотности с помощью теории конечных деформаций Лагранжа. В связи с развитием технологии получения высоких давлений практический интерес вызывает необходимость знания упругих постоянных второго и более высокого порядка под давлением для исследуемых материалов. При этом для описания упругих свойств недостаточно линейной теории упругости, а необходимо учитывать конечные деформации кристаллов и ангармоничность потенциалов межатомного взаимодействия. Разработанный автором формализм был применен для исследования упругих постоянных, уравнений состояния и возможности деформационного фазового перехода в ОЦК металлах - ниобии, тантале и молибдене в диапазоне давлений 0-600 ГПа. Для расчета полной энергии деформированных кристаллов использовался первопринципный код VASP, который основан на методе функционала электронной плотности. Все расчёты производились с использованием полуустовных псевдопотенциалов с повышенными параметрами, сгенерированными методом проекционных присоединенных плоских волн, с учётом обменно-корреляционных эффектов в приближении GGA-PBE.

На мой взгляд наиболее интересным результатом работы является разработка методики расчёта упругих постоянных под давлением, величина которого сравнима с модулем упругости исследуемого материала. Сравнение эффективных упругих постоянных второго порядка  $c'$  и  $c_{44}$ , рассчитанных с помощью разработанной в данной работе методики и с помощью метода бесконечно-малых деформаций для ОЦК молибдена и ОЦК ниобия в диапазоне давлений 0–200 ГПа, свидетельствует о наличии нелинейных упругих эффектов и существовании топологического электронного перехода.

Согласно автореферату результаты исследования по теме диссертации опубликованы в реферируемых научных изданиях и были доложены на всероссийских и международных конференциях.

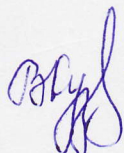
В качестве замечания стоит отметить следующее. Обычно код VASP дает существенную погрешность в определении сдвиговых модулей, а иногда и в определении модуля всестороннего сжатия. В автореферате не приведены экспериментальные и полученные теоретические значения упругих постоянных второго порядка ( $c_{11}$ ,  $c_{12}$ ,  $B$ ).

Сделанное замечание на умаляет заслуг соискателя и не влияет на общую положительную оценку. Считаю, что работа соответствует всем требованиям,



предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор – Игорь Юрьевич Мосягин, безусловно, заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Заведующий лабораторией  
наноструктурных поверхностей и  
покрытий Федерального государственного  
автономного образовательного учреждения  
высшего образования  
«Национальный исследовательский  
Томский государственный университет»  
к. ф-м.н., доцент



Кузнецов Владимир Михайлович

634050, г. Томск, пр. Ленина, 36  
+7 (3822) 52-98-44, [www.tsu.ru](http://www.tsu.ru), [kuznetsov@rec.tsu.ru](mailto:kuznetsov@rec.tsu.ru)

12.03.2015

*подпись уполномоченного*  
ЗАМ. НАЧ.  
УД  
М.Б. УДАЛОВА

