

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

В диссертации Мосягина И. Ю. рассматривается получение упругих постоянных второго и более высокого порядка под высоким давлением – задача, чрезвычайно важная для изучения упругих свойств материалов при экстремальных условиях в виду сложности проведения экспериментальных исследований.


Автором реализован модифицированный метод изучения упругих постоянных в рамках теории функционала плотности, основывающийся на тензоре конечных деформаций Лагранжа. Явное включение членов более высоких порядков в деформационные соотношения позволяет изучать упругие постоянные второго, третьего и четвертого порядка под давлениями, сравнимыми с модулем упругости изучаемого материала. В работе используется программный пакет VASP для первопринципных расчётов, основывающихся на теории функционала плотности и методе замороженного остова. Показаны оптимальные параметры расчёта и критерии выбора подходящего псевдопотенциала. На примере о.ц.к. ниобия, о.ц.к. тантала и о.ц.к. молибдена в работе приводятся рассчитанные упругие постоянные второго и третьего порядка как функции давления в диапазоне 0-600 ГПа. Показано, что точности метода недостаточно для расчёта упругих постоянных четвертого порядка. В рамках применимости стандартного метода приводятся сравнения между рассчитанными упругими постоянными второго порядка как функциями давления для кристаллов молибдена и ниобия.

По автореферату можно сделать следующие замечания:

- помимо явного сравнения с доступными экспериментальными данными по упругим постоянным, возможно было изучить, как полученные данные согласуются со скоростями распространения звука в исследованных в работе материалах;
- из текста автореферата неясно, насколько возможно применение методов для кристаллов с другими видами симметрии;
- обзор литературы целесообразно было бы расширить описанием экспериментов, используемых для определения упругих постоянных высших порядков.

Судя по автореферату, диссертация является законченной научно-исследовательской работой, удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 01.04.07, а ее автор Мосягин И. Ю. заслуживает присвоения ему ученой степени кандидата физико-математических наук.

Заведующий лабораторией отдела ДЛС ИОФ РАН
к.ф.-м.н.

 КУЛАТОВ Э.Т.

Подпись Кулатова Э.Т. заверяю:
Ученый секретарь ИОФ РАН
д.ф.-м.н.



 АНДРЕЕВ С.Н.