

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»

Диссертация И. Ю. Мосягина посвящена изучению упругих свойств материалов в условиях экстремально высокого давления. Экспериментальные исследования в этой области являются очень сложными, что стимулирует использование теоретических и расчетных методов и определяет актуальность представленной работы.

В первой главе дан обзор литературы по упругим свойствам материалов и первопринципным методам расчёта. Кратко изложена теория функционала плотности, на базе которой выполнены все численные расчёты. Во второй главе рассмотрены теоретические методы определения упругих постоянных. Описан стандартный подход, часто используемый в первопринципных расчётах упругих свойств, обсуждены его ограничения и недостатки. Для кристаллов с кубической симметрией приведены деформационные схемы, позволяющие вычислить упругие постоянные 2-ого порядка. Дан вывод основных формул усовершенствованного метода, основанного на тензоре конечных деформаций Лагранжа, позволяющего рассматривать нелинейные упругие свойства материалов под давлением.

В третьей главе приводятся детали первопринципного вычисления упругих постоянных 2-ого и более высокого порядка под давлением с помощью описанного метода. Показана важность выбора корректных значений энергии обрезания и плотности сетки для интегрирования по зоне Бриллюэна. В четвёртой главе рассмотрена зависимость упругих постоянных металлов Nb, Ta и Mo от давления, рассчитанная в интервале 0 - 600 ГПа с помощью данного метода. Результаты расчёта сравнены с результатами, полученными с помощью стандартного метода бесконечно-малых деформаций в области применимости последнего.

По работе можно сделать 2 замечания. 1) Первопринципные расчеты выполнены с использованием метода псевдопотенциала. Было бы желательно также провести проверочные расчеты с полным потенциалом, менее чувствительные к высокому давлению. 2) Из автореферата неясно, насколько усложняется формализм в случае анизотропных кристаллов и кристаллов с несколькими атомами в элементарной ячейке.

Указанные недостатки не снижают общей высокой оценки диссертации, которая, судя по автореферату, представляет собой законченную научно-исследовательскую работу, удовлетворяющую всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям. Нет сомнений, что И.Ю. Мосягин заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 «физика конденсированного состояния».

Зав. сектором «Теория сверхпроводимости»
Физического института им. П.Н. Лебедева РАН
доктор физ.-мат. наук

Подпись Ю.А. Успенского заверяю



Ю.А. Успенский

и.о. ученого секретаря ФИАН Иваненко О.М.