

## 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

Тема диссертационной работы, связанная с теоретическими исследованиями в области изучения материалов при экстремальных условиях, является востребованной в связи с технической сложностью проведения подобных экспериментальных исследований. В работе рассматриваются упругие свойства кристаллов кубической симметрии при давлениях в диапазоне 0-600 ГПа.

В диссертации проводится обзор методов изучения упругих постоянных и их сравнительный анализ. Показывается, что стандартно применяемый метод, основывающийся на методе бесконечно-малых деформаций, не может быть использован для изучения материалов при давлениях, сравнимых с модулями упругости исследуемого материала.

В работе описывается модификация стандартного метода, основанная на методе тензора конечно-малых деформаций Лагранжа, что позволяет рассчитывать упругие постоянные второго и более высокого порядка при давлениях, превышающих по величине модуль упругости исследуемого материала. Для реализации в рамках пакета первопринципных расчётов VASP приводятся рекомендации по выбору параметров расчёта и приводится детальный алгоритм вычисления упругих постоянных второго и более высокого порядка в заданном диапазоне изменения давления. На примере о.ц.к. ниобия и о.ц.к. молибдена проводятся сравнения рассчитанных упругих модифицированного метода со стандартным, в диапазоне давлений, целесообразного для применимости стандартного метода.

По автореферату можно сделать следующее замечание:

- из текста не ясно, использовались ли в работе гибридные псевдопотенциалы либо псевдопотенциалы, специально сгенерированные для изучаемого диапазона давлений;
- проводились ли исследования точности расчёта упругих постоянных с помощью других пакетов первопринципных вычислений, не использующие приближения замороженного остова.

Несмотря на отмеченные недостатки, диссертация представляет собой законченную НИР, удовлетворяющую требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, и соискатель, Мосягин И. Ю., заслуживает присвоения ему ученой степени кандидата физико-математических наук.

Старший научный сотрудник ОТФ  
Физического института им. П.Н. Лебедева РАН  
кандидат физ.-мат. наук

Подпись О.В. Иванова заверяю



О.В. Иванов

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