

“УТВЕРЖДАЮ”

ВРИО директора

**Федерального государственного
бюджетного учреждения науки**

**“Институт спектроскопии
Российской академии наук”**

д. ф. – м. н., проф. Задков В. Н.



ОТЗЫВ

ведущей организации «Институт спектроскопии Российской академии наук (ИСАН)» на диссертационную работу

Луговского Андрея Вячеславовича

«Исследование из первых принципов фазовой стабильности и упругих свойств переходных металлов при сверхвысоких давлениях», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа А. В. Луговского посвящена исследованию из первых принципов фазовой и механической стабильности при сверхвысоких давлениях. Автором выбрана актуальная тема исследования упругих свойств переходных металлов при сверхвысоких давлениях, что становится ясным из последних публикаций по данной тематике в ведущих научных изданиях. Техника получения высоких и сверхвысоких, превышающих объёмный модуль материала, давлений стремительно развивается уже долгое время. В последние несколько лет наблюдается резкий скачок в величине доступных экспериментально давлений. Вместе с тем, публикации по этой тематике содержат информацию о новых важных явлениях, в том числе фазовых и электронных топологических переходах, уникальной механической стабильности. Важную роль при описании этих новых явлений играют

расчёты методом функционала плотности. Подобные расчёты не ограничены возможностями экспериментального оборудования, даже самого современного. Вместе с тем первопринципное моделирование позволяет достичь понимания особенностей электронной структуры материалов и даёт возможность обобщать полученные знания на новые объекты. Такие исследования, безусловно, важны для теоретического предсказания свойств новых материалов. Таким образом, актуальность темы диссертации А. В. Луговского не вызывает сомнения.

Обзор литературных данных по теоретическому описанию деформированного состояния и упругих свойств твёрдых тел автором выполнен в достаточном для диссертационной работы объёме. Обзор сведений о теории механической, динамической и фазовой стабильности твёрдых тел вводит все использованные в работе понятия по данным вопросам. Обзор как экспериментальных, так и теоретических данных по объектам исследования включает анализ результатов всех значимых работ по этой теме за последнее время. В целом, обзор литературы позволяет заключить, что автор хорошо представляет актуальные проблемы области исследования к настоящему моменту.

В работе автор развивает технику расчёта упругих свойств. Такой подход, в отличие от распространённой методики бесконечно малых деформаций, позволяет исследовать нелинейные упругие свойства материала. Таким образом, с одной стороны может быть учтено влияние ангармонизма на механические свойства исследуемого объекта, с другой стороны методика позволяет получать упругие постоянные второго порядка без учёта нелинейных вкладов, что потенциально позволяет более точно изучать механическую стабильность материалов.

Для расчёта значений полной энергии и механических напряжений, необходимых для вычисления упругих свойств исследуемых объектов, автором выбран современный пакет первопринципных вычислений VASP. Использование пакета хорошо освещено в литературе. Применяемая

реализация теории функционала плотности и необходимых приближений позволяет заключить, что проведённые автором расчёты достаточно точны для реализации поставленных задач. Описание техники и параметров расчётов делает приведённые в работе расчёты воспроизводимыми, а развитые методики возможными к применению к новым объектам.

В качестве объекта исследования автором выбраны переходные металлы с ОЦК и ГПУ структурой пятой, шестой и восьмой групп периодической системы. В работе изложены новые интересные подробности фазового превращения ОЦК-ДГПУ в молибдене и отмечена важная роль смягчения упругих постоянных в этом переходе. На примере ОЦК вольфрама рассмотрены результаты использования новой методики вычисления упругих постоянных, ранее не применявшейся к расчётам под давлением. Новой также является реализация методики расчёта упругих свойств материалов с ГПУ кристаллической структурой под давлением с использованием теории конечных малых деформаций. Представленные результаты расчёта упругих постоянных ГПУ рутения показывают замечательную стабильность этого материала к сжатию и деформации. Материал может быть использован как эталонный объект, как в экспериментальных, так и в теоретических работах. Стоит отметить, что изучение сжатия переходных металлов с ГПУ структурой являлось предметом исследования последних экспериментальных работ, в которых сообщалось о достижении рекордных сверхвысоких давлений. Важность учёта влияния особенностей электронной структуры на механические свойства материалов также показана в обсуждении результатов исследования ОЦК ниобия под давлением. Продемонстрировано новое явление – смягчение упругой постоянной C' под давлением. Кратко описанное в имеющейся литературе смягчение упругой постоянной C_{44} описано в диссертационной работе подробно. Автором продемонстрированы новые интересные данные о влиянии деформации на электронный топологический переход в ниобии.

По итогам работы можно заключить, что цели и задачи представленного исследования, выполнены. В работе получены новые и научно значимые результаты, ценные как для области компьютерного моделирования свойств материалов, так и для экспериментального исследования при экстремальных давлениях. Исследование выполнено на современном уровне, полученные данные являются достоверными, сделанные выводы непротиворечивы. Результаты работы могут служить основой для практических разработок.

По диссертации необходимо сделать следующие замечания.

1. Автор отмечает интересное поведение соотношений Коши с ростом давления в молибдене и вольфраме, однако не комментирует, связано ли изменение характера сил с механизмом наблюдаемых в работе фазовых превращений.
2. С ростом производительности современных вычислительных систем становятся актуальными методы расчёта, использующие полнопотенциальные приближения. Было бы крайне интересно увидеть сравнение с результатами подобных расчётов в представленной работе.

Кроме того, имеются определённые редакционные погрешности, в некоторых случаях затрудняющие чтение работы. Сделанные замечания не снижают хорошего впечатления от работы. Результаты работы интересны и обладают достаточной актуальностью. Результаты работы прошли апробацию на российских и международных конференциях. Основной материал работы представлен в четырех научных статьях, опубликованных в изданиях, входящих в список ВАК.

Результаты работы могут быть использованы в Институте физики высоких давлений РАН, ИАЭ НИЦ «Курчатовский институт», Институте металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, НИТУ «МИСиС» и др.

Основное содержание диссертационной работы полностью отражено в автореферате. Оформление диссертационной работы и автореферата отвечает требованиям ВАК. В целом, по содержанию, актуальности проблемы, научной новизне и практической значимости диссертационная работа соответствует требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а диссертант Луговской Андрей Вячеславович достоин присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния.

Отзыв заслушан и одобрен на заседании лаборатории спектроскопии наноструктур Института спектроскопии РАН, протокол №3 от 24.11.2015г.

Зав. лабораторией спектроскопии наноструктур
ФГБУН «Институт спектроскопии
Российской академии наук»
142190, Москва, г.Троицк
ул. Физическая, 5
к.ф.-м.н., профессор МФТИ
Тел: (495)851-08-81
e-mail: lozovik@isan.troitsk.ru

Ю.Е.Лозовик

Подпись зав.лаб. спектроскопии наноструктур Института спектроскопии
РАН проф.Ю.Е.Лозовика подтверждаю
Ученый секретарь ИСАН, к.ф.-м.н



Перминов Е.Б.