

“УТВЕРЖДАЮ”

Директор

Института спектроскопии РАН

чл.-корр. РАН Виноградов Е.А.

«02» марта 2015 г.



## ОТЗЫВ

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

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

Диссертационная работа И.Ю. Мосягина посвящена исследованию упругих свойств металлов пятой группы в широком диапазоне давлений- от атмосферных до величин, превышающие объёмный модуль упругости исследуемого материала.

Актуальность настоящей работы не вызывает сомнений. Это связано с тем, что экспериментальные методики, основанные на применении ячеек с алмазными наковальнями позволяют достичь давлений 500 – 600 ГПа, при этом представляется возможным изучение структуры фаз высокого давления в реальном времени с помощью дифракции синхротронного рентгеновского излучения. Таким образом, при больших степенях сжатия возможно проводить исследования структурных фазовых переходов, для чего требуется проработанная теория поведения упругих свойств под давлением. Упругие свойства являются прямым следствием формы межатомного потенциала. Для теоретического описания упругих свойств принято использовать тензор упругих деформаций, для определения которого применяют бесконечно-малые деформации. При сильных степенях сжатия данный подход может быть неточным. В своей диссертационной работе автор обходит этот

недостаток, рассматривая тензор конечных деформаций Лагранжа, что позволяет явно учитывать влияние агармоничности межатомного потенциала на упругие свойства исследуемого материала. В работе структурированно приводится методология проведения подобных исследований и на базе кристаллов с кубической симметрией приводятся детальные выкладки зависимостей свободной энергии от компонент тензора конечных деформаций. Автор демонстрирует применение реализованной им методики на примере металлов пятой группы - тантале, молибдене и ниобии.

В первой главе соискатель представляет литературный обзор по основам особенностей первопринципных расчётов для определения компонент тензора конечных деформаций. Рассматриваются связи характеристик твёрдого тела с компонентами тензора упругих постоянных, такие как критерии стабильности кристалла под нагрузкой и скорости распространения звука. Вторая половина главы отводится на необходимое для работ подобного рода теоретическое введение. Вводятся понятия и определения, используемые соискателем далее в работе, относящиеся к методам расчёта электронной структуры систем многих частиц, в частности, вводятся основные положения теории функционала плотности. Рассматриваются современные псевдопотенциалы и полуэмперические выражения для определения уравнения состояния недеформированного твёрдого тела. Показана также связь тензора упругих постоянных с соотношениями нагрузка-деформация. Обзор свидетельствует, что автор хорошо представляет суть исследуемой проблемы и состояние вопроса в данной научной области на настоящий момент.

Во второй главе подробно описаны современные теоретические методы расчета компонент тензора упругих постоянных. Автор начинает с приближения бесконечно-малых деформаций и соответствующего ему тензора деформаций Эйлера. Такое приближение стандартно применяется для определения упругих постоянных в рамках теории функционала плотности. Соискателем показаны ограничения, которые следуют из



использования подобного приближения, обычно накладываемые на задаваемые деформации. На примере кристаллов с кубической симметрией, приводятся конкретные разложения внутренней энергии кристалла в деформированном состоянии по степеням компонент тензора напряжений. Далее автор переходит к рассмотрению тензора конечных деформаций Лагранжа и объясняет необходимые дополнения к методологии расчёта упругих постоянных второго и более высоких порядков, возникающих при использовании такого подхода. Явное включение компонент деформации более высоких порядков позволяет изучать влияние сильных ангармонических эффектов на поведение упругих постоянных под давлением, при соблюдении необходимых условий на точность расчёта. В конце главы автор, на примере кристалла с кубической симметрией, приводит конкретные выражения для тензоров деформации и соответствующие им разложения свободной энергии нагруженного кристалла по компонентам тензора. Приводится алгоритм расчёта упругих постоянных как функций давления с использованием разработанной методологии.

В третьей главе автор приводит анализ критериев выбора оптимальных параметров расчёта, необходимых для того, чтобы разработанная методология имела достаточную предсказательную силу. Все примеры приводятся для реализации с применением пакета первопринципных расчётов VASP, но методология без труда может быть обобщена для использования любого другого первопринципного расчётного пакета. Тем не менее, выбор VASP в качестве основного расчётного пакета позволяет сделать вывод о высокой степени достоверности полученных результатов. В главе рассматривается влияние числа плоских волн на точность определения энергии деформированного состояния и компонент тензора упругих постоянных. Рассматриваются параметры генерации сетки интегрирования по зоне Бриллюэна и влияние выбора псевдопотенциала и энергии его

обрезания. В качестве исследуемых систем рассматриваются ОЦК ниобий и ОЦК ванадий.

В четвёртой главе автор приводит результаты применения разработанной методологии на примере ОЦК ниобия, ОЦК тантала и ОЦК молибдена. Все материалы рассматриваются автором в диапазоне давлений от 0 до 600 ГПа. Для всех рассматриваемых систем приводятся подробные сравнения рассчитанных упругих постоянных как функций давления с доступными экспериментальными данными. Более того, в диапазоне применимости приближения бесконечно-малых деформаций автор проводит сравнение между методами для ОЦК молибдена и ОЦК ниобия. Показано, что при давлениях, величина которых сравнима с объёмным модулем упругости исследуемого материала, рассчитанные упругие постоянные второго порядка различаются в среднем на 10-20 ГПа, что может служить индикатором наличия сильных нелинейных упругих эффектов.

Можно заключить, что цели и задачи, поставленные в работе, выполнены, полученные результаты непротиворечивы и объясняют наблюдаемые свойства исследуемых материалов. Результаты работы являются новыми, достоверными и могут служить основой для практических разработок. Большая значимость диссертационной работы обусловлена в том числе тем, что в ней получены некоторые данные, недоступные на настоящий момент для эксперимента.

По диссертации необходимо сделать несколько замечаний.

1. Соискатель рассматривает только системы с кубически симметричной кристаллической решёткой. Было бы интересно применить полученную методологию и для других сингоний.
2. Помимо этого, в работе рассматривены только монокристаллические системы, что сильно ограничивает применимость полученных результатов. Неясно, как обобщить разработанную методологию на случай более сложных кристаллических систем и сплавов.




Сделанные замечания не снижают очень хорошего впечатления от работы И. Ю. Мосягина, выполненной на высоком научном уровне. Основные выводы не вызывают сомнений. Основная цель работы достигнута полностью. Результаты работы доложены на всероссийских и международных конференциях, представлены в четырех научных статьях.

Результаты работы могут быть использованы в Институте спектроскопии РАН, ИАЭ НИЦ «Курчатовский институт», ИФТТ РАН, ФГУП «ВИАМ», Институт 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 полностью соответствует требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а диссертант Мосягин Игорь Юрьевич 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 № 1 от 2015 г

Зав. лабораторией спектроскопии  
наноструктур Института спектроскопии АН  
к.ф.-м.н., профессор МФТИ  
Отзыв утвержден на Ученом Совете ИСАН,  
протокол № 2 от 10.02.2015 г

 Ю. Е. Лозовик

Подпись зав. лабораторией  
проф. Ю. Е. Лозовика заверяю

Ученый секретарь  Е.Б. Перминов  
Института спектроскопии РАН  
к.ф.-м.н.