

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА ЮФУ801.01.06,

созданного на базе Научно-исследовательского института физики
федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего
образования «Южный федеральный университет»,
о диссертации на соискание ученой степени **доктора** наук

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 20.09.2023, № 31

О присуждении Горбенко Евгению Евгеньевичу ученой степени доктора
физико-математических наук.

Диссертация **«Динамическая теория решеток сжатых кристаллов
инертных газов в модели деформируемых атомов»** по специальности **1.3.8.**
Физика конденсированного состояния, принята к защите 14 июня 2023 года
(протокол № 18) диссертационным советом ЮФУ801.01.06, созданным на базе НИИ
физики ЮФУ по приказу 306-ОД от 01 ноября 2022 года.

Соискатель – **Горбенко** Евгений Евгеньевич, 1981 года рождения,
диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
«Теория атомных свойств сжатых кристаллов инертных газов» защитил в 2008 году
в диссертационном совете, созданном на базе Донецкого физико-технического
института имени А. А. Галкина Национальной академии наук Украины.

Диссертация выполнена на кафедре физики и методики преподавания физики
ФГБОУ ВО «Луганский государственный педагогический университет».

Научный консультант – отсутствует.

Официальные оппоненты: **Арефьева** Людмила Павловна, доктор физико-
математических наук, доцент, ФГБОУ ВО «Донской государственный технический
университет», доцент кафедры «Материаловедение и технологии металлов»;
Нефедев Константин Валентинович, доктор физико-математических наук,
профессор, ФГАОУ ВО «Дальневосточный федеральный университет», институт
наукоемких технологий и передовых материалов, директор департамента
теоретической физики и интеллектуальных технологий; **Москвин** Александр
Сергеевич, доктор физико-математических наук, профессор, институт естественных

наук и математики, профессор кафедры теоретической и математической физики, дали **положительные отзывы** на диссертацию.

По теме диссертации **автором опубликованы** 87 работ, в том числе: 20 статей в научных изданиях, входящих в Перечень научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени доктора наук, кандидата наук, представленных для защиты в диссертационные советы Южного федерального университета, индексируемых в международных базах научного цитирования Scopus и/или Web of Science, 21 статья, входящая в БД «РИНЦ», 2 главы в коллективных зарубежных монографиях из БД «Scopus» и 44 публикации автора представлены в сборниках материалов, трудах и тезисах конференций различного уровня и других изданиях. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации. Вклад автора в совместно опубликованные работы 12,73 п. л., а общий их объем по теме диссертации составляет 29,59 п. л. Наиболее значительные работы соискателя:

1. Interatomic potential and elastic constants of rare-gas crystals under pressure / E. V. Zarochentsev, V. N. Varyukhin, E. P. Troitskaya, Val. V. Chabanenko, **E. E. Horbenko** // Physica Status Solidi (b). – 2006. – Vol. 243. – No 12. – P. 2672-2686.

2. Ab initio расчеты фононных частот и связанных с ними свойств кристаллического Ne под давлением / Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, **Е. Е. Горбенко**, Н. В. Кузовой // Физика низких температур. – 2009. – Т. 35. – № 10. – С. 1041-1050.

3. Ab initio расчеты трехчастичного взаимодействия в криокристаллах под давлением / **Е. Е. Горбенко**, И. В. Жихарев, Е. П. Троицкая, В. В. Чабаненко, Н. В. Кузовой // Физика низких температур. – 2011. – Т. 37. – № 5. – С. 558-563.

4. Ab initio theory of the many-body interaction and elastic properties of rare-gas crystals under pressure / V. N. Varyukhin, E. P. Troitskaya, V. V. Chabanenko, **Ie. Ie. Gorbenko**, E. A. Pilipenko // Physica Status Solidi (b). – 2014. – V. 251. – No 4. – P. 774-787.

5. Adiabatic potential and elastic properties of compressed rare-gas crystals in the model of deformable atoms / V. N. Varyukhin, E. P. Troitskaya, **Ie. Ie. Gorbenko**, E. A. Pilipenko, V. V. Chabanenko // Physica Status Solidi (b). – 2015. – V.252. – No 4. – P. 709-720.

6. Многочастичное взаимодействие и деформация электронных оболочек атомов в динамике решетки сжатых атомарных криокристаллов / Е. П. Троицкая, **Е. Е. Горбенко**, Е. А. Пилипенко // Физика низких температур. – 2016. – Т. 42. – № 5. – С. 526-538.

7. Упругие свойства сжатых кристаллов инертных газов в модели деформируемых атомов / **Е. Е. Горбенко**, Е. П. Троицкая, Е. А. Пилипенко // Физика твердого тела. – 2017. – Т. 59. – № 1. – С. 126-133.

8. Абсолютная неустойчивость ГЦК-решетки кристаллов инертных газов под давлением / Е. П. Троицкая, Е. А. Пилипенко, **Е. Е. Горбенко** // Физика твердого тела. – 2019. – Т. 61. – № 1. – С. 154-162.

На автореферат поступили 6 положительных отзывов, в трех из которых имеются замечания. **Румянцев В. В.** (ДФТИ имени А. А. Галкина, Донецк) считает, что вместо термина «деформируемый атом»... «более удачно ... использовать термин «деформация электронных оболочек атомов» и то, что «интересно ... провести в рамках теории функционала плотности компьютерное моделирование зависимости электронной плотности КИГ от давления и получить соответствующие карты электронной плотности этих криокристаллов». **Самсонов В. М.** (ТГУ, Тверь) заметил, что «хотя кристаллы инертных газов находят некоторое применение ...», «их применение является весьма ограниченным. В связи с этим, следовало бы проанализировать, в какой степени результаты, разработанные методы и подходы могут быть распространены на другие системы ...»; кроме того, считает, что «не вполне удачно сформулирована цель работы...» и полагает «...что полученные новые результаты важнее, чем разработка методов...»; а также, что в пункте «Личный вклад автора» надо бы было «говорить, что, по крайней мере, некоторые результаты получены лично соискателем, а не просто при его участии...». **Юрченко В. М.** (ДФТИ имени А. А. Галкина, Донецк) сожалеет, что «...в диссертации отсутствуют расчеты термодинамических и упругих свойств сжатого гелия, который в серии благородных газов стоит на первом месте...» и задал вопрос: «какова физическая причина введения перенормировки модулей Бирча и Фукса?».

В отзывах **Исаева В. А.** (КубГУ, Краснодар), **Каллаева С. Н.** (ИФ имени Х. И. Амирханова» ДФИЦ РАН, Махачкала) и **Умхасовой З. С.** (КНИИ имени Х. И. Ибрагимова РАН, Грозный) замечаний и вопросов не обнаружено.

Выбор официальных оппонентов обосновывается тем, что **Арефьева Л. П.** является специалистом в области анизотропии поверхностной энергии и барического коэффициента поверхностной энергии полиморфных фаз кристаллов. **Нефедев К. В.** является специалистом в области высокопроизводительных алгоритмов для решения задач физики конденсированного состояния: изучении поведения термодинамических параметров, критических явлений и природы фазовых переходов и создал серию программных комплексов для численного моделирования изучаемых процессов. **Москвин А. С.** является специалистом в теории кристаллического поля, молекулярно-кластерном описании атомов в

кристаллах, электронно-колебательных взаимодействиях, обменных и обменно-релятивистских взаимодействиях, сверхтонких взаимодействиях, современных зонных методах описания электронной структуры и энергетического спектра сильно-коррелированных систем.

**Диссертационный совет отмечает, что в результате выполненных соискателем исследований предложено выражение для короткодействующего потенциала отталкивания в виде степенного разложения интеграла перекрытия электронных волновых функций соседних атомов инертных газов в их решетке и предложен вид трехчастичного межатомного взаимодействия без вариационных и подгоночных параметров на основе *ab initio* расчетов короткодействующего отталкивания на основе метода Хартри – Фока; выявлено влияние трехчастичного взаимодействия и деформации электронных оболочек на фононный спектр и динамическую неустойчивость кристаллов инертных газов при высоком давлении; рассчитаны термодинамические величины для кристаллов инертных газов при различных давлениях и температурах на основе динамической матрицы с учетом деформации дипольного типа электронных оболочек в парном приближении; доказано, что трёхчастичные параметры деформации электронных оболочек атомов того же порядка величины, что и квадрупольные; рассчитаны модули упругости сжатых Ne, Ar, Kr и Xe с учетом многочастичных сил и деформации электронных оболочек квадрупольного типа в хорошем согласии с экспериментом; показано, что для кристаллов каждого инертного газа зависимость отклонения от соотношения Коши является результатом двух конкурирующих типов взаимодействий – многочастичного и квадрупольного и доказана важность учета деформации электронных оболочек атомов при расчете свойств кристаллов инертных газов под давлением.*

**Теоретическая значимость исследования определяется доказанностью следующих научных положений: 1) об учете эффектов деформации электронных оболочек атомов дипольного типа в парном и трехчастичном приближениях, который приводит к размягчению «критических» колебаний и динамической неустойчивости ГЦК-кристаллов инертных газов в условиях высокого давления при расчете фононных частот; 2) о возрастающем вкладе деформаций электронных*

оболочек дипольного типа в теплоемкость сжатых кристаллов инертных газов Ne, Kr, Xe, и особенно Ar; 3) об учете вклада трехчастичного и квадрупольного взаимодействий, который практически не влияет на объемный модуль B_{11} , но дает основную поправку в сдвиговый модуль B_{12} , в то время как в модуль B_{44} основной вклад дает квадрупольное взаимодействие; 4) о линейной зависимости модулей упругости от давления, которая нарушается при учете трехчастичного и квадрупольного взаимодействий в расчетах на основе парного потенциала при высоком давлении, что приводит к наблюдаемому экспериментально превращению в нуль модуля упругости B_{44} для ксенона при 75 ГПа, обеспечивая переход ГЦК - ГПУ; 5) об индивидуальной для каждого из кристаллов инертных газов зависимости отклонения от соотношения Коши: для неона, криптона и ксенона вклады двух конкурирующих взаимодействий – квадрупольного и многочастичного – с приемлемой точностью компенсируют друг друга, а в упругих свойствах кристаллического аргона преобладает многочастичное взаимодействие. Компенсация взаимодействий в случае Ne, Kr и Xe дает незначительную барическую зависимость $\delta(p)$ в абсолютном согласии с экспериментом; 6) о том, что построенная модель динамики решетки сжатых кристаллов инертных газов, включающая параметры трехчастичного взаимодействия и деформации электронных оболочек, адекватно описывает поведение кристаллов инертных газов под давлением в согласии с экспериментом.

**Применительно к проблематике диссертации результативно с учетом деформации электронных оболочек атомов квадрупольного типа получено выражение для адиабатического потенциала кристаллов инертных газов, параметры которого выражаются через матричные элементы гамильтониана их электронной подсистемы; выявлено влияние трехчастичного взаимодействия в короткодействующем потенциале отталкивания и деформации электронных оболочек дипольного и квадрупольного типа на фононный спектр, динамические и термодинамические свойства сжатых кристаллов инертных газов и рассчитаны согласующиеся с экспериментом термодинамические и упругие свойства кристаллических неона, аргона, криптона и ксенона при высоких давлениях.*

Значение полученных результатов для практики связано с возможностью использования сжатых кристаллов инертных газов в качестве хладагентов, рабочей

среды для передачи большого гидростатического давления при низких температурах, ядерного горючего для лазерного или электронно-лучевого метода запуска термоядерной реакции, гранулированного твердого топлива для тепловых двигателей. В связи с указанными применениями изученных кристаллов инертных газов важно теоретическое обоснование возможности получения новых материалов с новыми физическими и химическими свойствами при использовании высокого давления. Полученные результаты могут быть применены к расчетам фононных спектров, упругих и термодинамических свойств сжатых кристаллов, имеющих электронную оболочку инертных газов с различным типом химической связи.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила обоснованность научных положений, основных результатов и выводов работы, которая обеспечивается согласованностью полученных теоретических результатов с экспериментальными данными, их непротиворечивостью с литературными данными; идея исследования базируется на анализе и обобщении опыта ученых в области физики конденсированного состояния; при этом использованы известные апробированные и разработанные соискателем новые вычислительные методики и установлено, что полученные результаты не противоречат известным результатам независимых источников и современным научным представлениям физики конденсированного состояния, в том числе физики твердого тела.*

Лично соискатель определил цель и задачи исследования, а также участвовал в выборе способов их решения; провел численные расчеты и анализ полученных результатов; собрал и обобщил в виде аналитического обзора результаты теоретических и экспериментальных исследований по теме диссертации; сформулировал научные положения, выносимые на защиту, участвовал в определении новизны, практической значимости и выводов по работе, в подготовке публикаций и на всех стадиях исследования. Автором на основе выведенных им аналитических выражений создан комплекс компьютерных программ и проведены расчеты термодинамических и упругих свойств сжатых кристаллов Ne, Ar, Kr и Xe.

На заседании 20.09.2023 диссертационный совет отметил, что рассматриваемая диссертация соответствует критериям п. 2 «Положения о

присуждении ученых степеней в федеральном государственном автономном учреждении высшего образования «Южный федеральный университет» и принял решение присудить Горбенко Е. Е. ученую степень доктора физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них 7 докторов наук по научной специальности рассматриваемой диссертации, участвующих в заседании, из 21 человека, входящего в состав Совета (дополнительные члены в состав Совета не вводились), проголосовали: за – 15, против – 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель диссертационного
совета ЮФУ801.01.06 _____ Тер-Оганесян Никита Валерьевич

Ученый секретарь диссертационного
совета ЮФУ801.01.06 _____ Гегузина Галина Александровна
22.09.2023

