

ОТЗЫВ

*об автореферате диссертационной работы Горбенко Евгения Евгеньевича
«Динамическая теория решеток сжатых кристаллов инертных газов
в модели деформируемых атомов», представленной на соискание
ученой степени доктора физико-математических наук по
специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния*

Данная диссертационная работа посвящена развитию неэмпирической динамической теории кристаллических решеток с деформируемыми атомами в дипольном и квадрупольном приближениях и ее применению к прогнозированию упругих и термодинамических характеристик кристаллов инертных газов при высоких (мегабарных) давлениях. Принято считать, что кристаллы инертных газов – простейший тип молекулярных кристаллов, свойства которых достаточно хорошо описываются леннард-джонсовской моделью межатомного взаимодействия. Однако при повышении давления физические и химические свойства материалов существенно изменяются, и полуэмпирические подходы становятся неприменимыми, поскольку изменение энергии кристалла при таком сжатии сопоставимо с его энергией связи. Соответственно, актуальность первопринципного описания состояния вещества при сверхвысоком давлении не вызывает сомнений.

Новизна результатов, полученных соискателем, обусловливается тем, что им предложен новый метод представления короткодействующего потенциала отталкивания в виде степенного разложения, основывающегося на рассмотрении интеграла перекрытия электронных волновых функций соседних атомов; предложена и апробирована простая форма, позволяющая учитывать трехчастичные взаимодействия без вариационных и подгоночных параметров; новые методы и подходы использованы для теоретического обоснования возможности получения новых материалов с улучшенными физическими и химическими свойствами с помощью высокого давления.

Следует особо отметить, что обычно методы *ab initio* и метод функционала плотности обычно используются лишь для численных расчетов с использованием готовых компьютерных программ. В данном же случае такие расчеты являлись составной частью нового и завершенного теоретического подхода к

прогнозированию динамики решетки кристаллов инертных газов, а сама диссертация представляет результаты вполне завершенных научных исследований.

Вместе с тем, по автореферату имеются некоторые замечания:

1. Хотя кристаллы инертных газов находят некоторое применение (автор автореферата отмечает их применение для передачи внешнего давления), все же их применение является весьма ограниченным. В связи с этим, следовало бы проанализировать, в какой степени результаты, полученные в данной диссертации, разработанные методы и подходы могут быть распространены на другие системы, в частности, - на кристаллы с другим типом химической связи, т.е. на металлические и полупроводниковые кристаллы;
2. Не вполне удачно сформулирована цель работы: «создание методов теоретического описания основного состояния, энергетических спектров фононов, термодинамических величин и упругих свойств сжатых кристаллов инертных газов». Я полагаю, что полученные новые результаты важнее, чем разработка методов, поскольку именно результаты подтверждают адекватность методов;
3. В пункте «Личный вклад автора» говорится, что его вклад заключается в участии на всех стадиях исследования. Полагаю, что по крайней мере некоторые результаты получены лично соискателем, а не просто при его участии. Вместе с тем, то, что Горбенко Е.Е. старался отметить всех, кто помогал ему в выполнении исследований – безусловно положительный момент автореферата;

Сделанные замечания и пожелания не снижают общее положительное впечатление от автореферата. Учитывая актуальность темы, новизну и практическую значимость полученных результатов, считаю, что диссертация Евгения Евгеньевича Горбенко в полной мере отвечает требованиям действующего Положения о присуждении ученых степеней в ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», предъявляемым к докторским диссертациям, а её автор заслуживает

присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

4 09 1923

Согласен на обработку моих персональных данных

Доктор физико-математических наук, профессор,
Заслуженный работник высшей школы РФ,
профессор кафедры общей физики
Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Тверской государственный университет»
(Адрес: 170002, Тверь, Садовый пер., 35, учебный корпус №3,
тел.: +7 4822 58-14-93, e-mail: Samsonov.VM@tversu.ru)

Самсонов

Самсонов Владимир Михайлович

Подпись В.М. Самсонова
удостоверен.

Начальник



И. Ю. Каткова