

Отзыв на автореферат

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.

Диссертация Е.Е. Горбенко посвящена *ab initio* исследованию роли многочастичного взаимодействия и деформации электронных оболочек атомов в формировании упругих и термодинамических свойств сжатых кристаллов инертных газов в широком интервале давлений. Автором построена неэмпирическая версия описания межатомного взаимодействия, основанная на квантово-механической модели деформируемых и поляризуемых атомов. В рамках этой модели, на основе точных расчетов кулоновских интегралов, предложена простая форма трехчастичного неэмпирического потенциала, выраженная через интегралы перекрытия атомных орбиталей. Развитая теория позволяет вычислить короткодействующий потенциал отталкивания индивидуально для каждого кристалла ряда Ne - Xe с учетом многочастичного и квадрупольного взаимодействий.

Как это следует из автореферата, в диссертации Е.Е. Горбенко получены следующие важные результаты:

1. Учет эффектов деформации электронных оболочек атомов дипольного типа, приводит к размягчению «критических» колебаний и динамической неустойчивости ГЦК-кристаллов инертных газов в условиях высокого давления при расчете фононных частот.

2. Вклад деформации электронных оболочек дипольного типа в теплоемкость сжатых кристаллов инертных газов растёт с увеличением внешнего давления для Ne, Kr и Xe, и наиболее значителен в Ar.

3. С учетом трехчастичного и квадрупольного взаимодействий в расчетах на основе парного потенциала при высоком давлении линейная зависимость модулей упругости от давления нарушается. Это приводит к наблюдаемому экспериментально превращению в нуль упругого модуля B_{11} для ксенона при 75 ГПа, обеспечивая ГЦК-ГПУ переход.

4. Зависимость отклонения от соотношения Коши индивидуальна для каждого из кристаллов инертных газов: для неона, криптона и ксенона вклады двух конкурирующих взаимодействий - квадрупольного и многочастичного - с неплохой 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 отклонения от соотношения Коши в абсолютном

согласии с экспериментом.

Всё выше перечисленное, а также список конференций, где были апробированы полученные в диссертации результаты, свидетельствуют об актуальности диссертационного исследования Горбенко Е.Е.

По уровню решаемых задач, научной новизне и объему полученных результатов диссертационная работа Горбенко Евгения Евгеньевича «Динамическая теория решеток сжатых кристаллов инертных газов в модели деформируемых атомов» отвечает всем требованиям действующего Положения о присуждении ученых степеней в ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», предъявляемым к докторским диссертациям, а её автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности **1.3.8. Физика конденсированного состояния.**

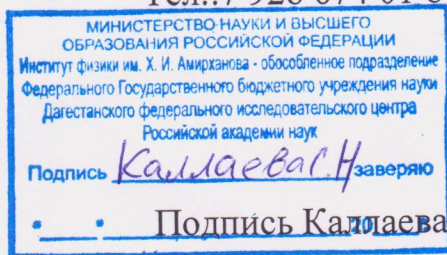
29.08.2023

Согласен на обработку моих персональных данных

 Каллаев Сулейман Нурулисламович,
доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник,
федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Институт физики им. Х.И.
Амирханова» Дагестанского федерального
исследовательского центра РАН, заведующий
лабораторией теплофизики и термоэлектричества

(Адрес: 367015, Республика Дагестан, г. Махачкала, ул. М.Ярагского, 94,

Тел.: 7 928 674 01 81, e-mail: kallaev-s@rambler.ru)



Подпись Каллаева Сулеймана Нурулисламовича

заверяю

Руководитель «Институт физики им. Х.И. Амирханова» ДФИЦ РАН

Хизриев К.Ш.

