ОТЗЫВ

официального оппонента д.ф.-м.н. А.С. Москвина на диссертационную работу **ГОРБЕНКО Евгения Евгеньевича «ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ РЕШЕТОК СЖАТЫХ КРИСТАЛЛОВ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ В МОДЕЛИ ДЕФОРМИРУЕМЫХ АТОМОВ»**, представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Кристаллы инертных газов (КИГ), атомарные криокристаллы – Ne, Ar, Kr и Xe, благодаря своей простой структуре, являются уникальными объектами для изучения многих фундаментальных проблем физики конденсированных сред, связанных с динамикой кристаллических решеток, для разработки и апробации новых вычислительных методов.

Сжатые КИГ широко используются в экспериментальной технике как среды, передающие давление, изучение их термодинамических и упругих свойств представляет большой научный и практический интерес. Экспериментальные исследования свойств КИГ под очень высоким давлением ставят ряд теоретических проблем, включая учет эффектов многочастичного взаимодействия и деформации электронных оболочек атомов в динамике решетки. Решению этих проблем посвящено диссертационное исследование Е.Е. Горбенко. На основе неэмпирической версии динамической теории кристаллических решеток с деформируемыми атомами в дипольном и квадрупольном приближениях им исследуются многочастичные взаимодействия и деформация электронных оболочек вследствие смещения ядер, что позволяет не только выяснить природу формирования упругих и термодинамических свойств КИГ при больших давлениях, но и сделать ряд научно обоснованных предсказаний. Всё это говорит об актуальности диссертационной работы Е.Е. Горбенко "Динамическая теория решеток сжатых кристаллов инертных газов в модели деформируемых атомов".

Диссертация состоит из Введения, пяти разделов, заключения, девяти приложений, списка публикаций, списка литературы и изложена на 210 страницах, включая 28 рисунков и 19 таблиц. Список цитированной литературы содержит 128 наименований.

Во Введении обоснована актуальность, сформулированы цели и задачи диссертационного исследования, обсуждается предмет и объекты исследования, формулируется научная новизна, практическая и теоретическая ценность, положения, выносимые на защиту.

В первом разделе приведен краткий обзор модельных потенциалов и неэмпирических расчетов, использующихся для изучения свойств КИГ под давлением и без него.

Во втором разделе автором разрабатывается, названная им «*ab initio*», теория многочастичного взаимодействия, основанная на учете вклада дипольных и квадрупольных флуктуаций и представления потенциальной энергии короткодействующих сил в виде степенного ряда по интегралам перекрытия волновых функций электронов соседних атомов.

Двухцентровые кулоновские интегралы были рассчитаны на основе известных таблиц Клементи-Роегги. Найденные при этом закономерности были использованы для аппроксимации трех- и четырехцентровых интегралов произведениями соответствующих интегралов перекрытия. Автором проведены расчеты фононных дисперсионных кривых КИГ и выявлены эффекты деформации электронных оболочек и трехчастичных взаимодействий.

В третьем разделе приведены результаты теоретического исследования динамики решеток сжатых КИГ в модели деформируемых атомов, явно учитывающей деформацию электронных оболочек дипольного типа в парном приближении. На основе неэмпирического короткодействующего потенциала отталкивания путем интегрирования по точкам в зоне Бриллюэна в гармоническом приближении рассчитываются энергия нулевых колебаний, среднеквадратичное смещение, удельная теплоемкость и температура Дебая сжатых ГЦК-Ne, Ar, Kr и Xe.

Четвертый раздел в основном посвящен выяснению роли деформации электронных оболочек атомов квадрупольного типа в нарушении соотношения Коши для различных КИГ. Как современные *ab initio* расчеты, так и расчеты на основе эмпирических потенциалов не могут качественно воспроизвести отклонение от соотношения Коши $\delta(\rho)$ для кристаллов типа КИГ. Главной причиной нарушения соотношения Коши являются как многочастичные взаимодействия, так и взаимодействия, связанные с деформацией электронной оболочки атома. В кристаллах типа КИГ, где каждый атом является центром симметрии, только квадрупольные члены приводят к нарушению соотношения Коши. Автором в развитие теории К.Б. Толпыго для ионных кристаллов и КИГ в рамках единого подхода показана роль многочастичных короткодействующих взаимодействий и квадрупольной деформации электронных оболочек атомов при ядерных смещениях в эффекте нарушения соотношения Коши для КИГ.

В пятом разделе в модели деформируемых и поляризуемых атомов исследуются упругие свойства сжатых кристаллов инертных газов Ne, Ar, Kr и Xe. Рассчитаны модули упругости Фукса второго порядка и их производные по давлению, коэффициент упругой анизотропии Зенера с учетом трехчастичного взаимодействия и деформации электронных оболочек квадрупольного типа в широком интервале давлений, а также соотношения Коши для всего ряда Ne-Xe. Также проведено сравнение с экспериментом и результатами расчетов других авторов.

В целом диссертация Е.Е. Горбенко представляет собой пример комплексного исследования роли многочастичных короткодействующих взаимодействий, дипольной и квадрупольной деформации электронных оболочек атомов в особенностях динамики решетки, термодинамических и упругих свойствах кристаллов инертных газов. Автором в рамках квантово-механической модели деформируемых и поляризуемых атомов предложена пригодная для количественного описания форма адиабатического потенциала кристаллов инертных газов, параметры которого выражаются через матричные элементы гамильтониана электронной подсистемы на волновых функциях кристалла в основном и возбужденном состояниях, а также интегралы перекрытия электронных функций. Развиваемый подход позволил выявить влияние трехчастичного взаимодействия на динамику решетки, динамические и термодинамические свойства кристаллов инертных газов в экстремальных условиях, рассчитать и провести сравнение с экспериментом большой совокупности термодинамических и упругих свойств кристаллических неона, аргона, криптона и ксенона в широком интервале давления. Среди основных конкретных результатов диссертации отметим расчет в рамках развиваемой модели упругих модулей всего ряда сжатых КИГ, которые находятся в хорошем согласии с экспериментом, что доказывает важность учета деформации электронных оболочек при расчете атомных свойств КИГ под давлением а также доказательство сравнимого вклада трехчастичных эффектов и эффектов квадрупольной деформации электронных оболочек атомов, что говорит о необходимости их совместного учета, в частности, для объяснения отклонения от соотношения Коши. Безусловно интересен вывод о возможном вкладе эффектов деформации электронных оболочек атомов в наблюдаемую неустойчивость ГЦК-фазы.

В качестве замечаний по диссертации Е.Е. Горбенко я хотел бы отметить следующее:

1. Прежде всего, на мой взгляд, автор диссертации не совсем удачно использует термин «*ab initio*» для расчета потенциала короткодействующего отталкивания, хотя речь идет о достаточно известной «квантово-механической модели деформируемых и поляризуемых атомов». Термин «*ab initio*» сегодня практически без вариантов относится к расчетам, основанным на использовании теории функционала плотности (DFT), тем более, что автор часто упоминает этот термин именно в связи с DFT.
2. Автор диссертации «обходит» вопрос о точности своих «*ab initio*» расчетов, которые фактически основаны на использовании приближенных модельных подходов. В связи с этим возникает вопрос о смысле «сверхточных» численных данных таблиц Б, В, Г, Д, Ж, З, И приложения и других таблиц в диссертации.
3. У меня есть некоторые замечания к итоговым результатам диссертации (стр.152-154). Прежде всего, хотелось бы видеть не просто результаты, а выводы. В целом в этих

результатах плохо просматривается их оригинальность, в частности, это касается пунктов 1 и 2, тем более, что их можно было бы и объединить. Форма изложения выводов 4 и 5 указывает на малость вкладов трехчастичных взаимодействий и деформаций электронных оболочек. На этом фоне несколько странным выглядит фраза "...и приводит к улучшению согласия с экспериментом."

4. К сожалению, у меня есть серьезные претензии к оформлению диссертации и, особенно, автореферата. Это касается и многочисленных технических погрешностей, и многочисленных проблем с грамматикой, и стиля изложения ("коэффициенты члена отталкивания, трудная формула, приложение Ж, здесь x представляет собой электрон в атоме, представленное суммирование, имеет умножение элементов, Имеем, что второй член"...), ошибка в R_u (стр.78), ошибки в написании иностранных слов, авторов (Тейллер !?) и названий статей – см. ссылку [30]). Автор не смог остановиться на определенном выборе аббревиатуры (DFT-ТФП, LDA-ПЛП, МВА-ЕАМ,...). В этом смысле показателен Рис.4.4, на котором к тому же вместо анонсированного автором пятиугольника находим только шестиугольник. Чтению диссертации и автореферата мешает отсутствие в ряде формул пояснения введенных величин, или, наоборот, присутствие отсутствующих в формулах параметров (см. 1.5).

Тем не менее, в целом указанные недостатки не влияют на общую положительную оценку диссертации. Диссертация является законченной научно-исследовательской работой, в которой содержится решение целого ряда задач, имеющих важное значение для физики конденсированного состояния в направлении развития теоретических исследований динамики решетки, термодинамических и упругих свойствах кристаллов инертных газов. В этом плане ее результаты представляют несомненный интерес как для теоретиков, так и экспериментаторов. По целям, содержанию и методам исследования диссертационная работа соответствует избранной специальности – физика конденсированного состояния. Достоверность результатов диссертации обосновывается использованием хорошо известных и апробированных теоретических методов физики конденсированного состояния, сравнением результатов с экспериментальными данными и независимыми литературными данными.

Представленные материалы хорошо отражены в публикациях, прошли апробацию на многочисленных конференциях. Несмотря на некоторую небрежность оформления, автореферат в целом соответствует содержанию диссертации.

Диссертационная работа ГОРБЕНКО Евгения Евгеньевича «ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ РЕШЕТОК СЖАТЫХ КРИСТАЛЛОВ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ В МОДЕЛИ ДЕФОРМИРУЕМЫХ АТОМОВ» соответствует критериям, которым должна отвечать