

Отзыв

на автореферат диссертации 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

Разработка и возможности использования новых функциональных материалов занимают сегодня значительную область экспериментальных и теоретических исследований физики конденсированного состояния. Особый интерес представляет изучение состояния твердых тел под высоким давлением, при котором усиливается межатомное взаимодействие (изменение энергии кристалла при сжатии сопоставимо с его энергией связи) и, как следствие, значительно изменяются физические и химические свойства материала.

Спектр исследований, которые проведены автором в рамках развиваемого первопринципного теоретического описания состояния вещества при сверхвысоком давлении, стимулируется необходимостью решения прикладных задач, например, проблем в геофизике, связанных с получением сведений о структуре и упругих свойствах конденсированных веществ в недрах Земли, которые находятся под мегабарным давлением и недостижимы для непосредственного наблюдения.

Большое значение имеет построение теорий в рамках динамики кристаллических решеток, разработка и тонкая настройка соответствующих вычислительных методов. Удобными модельными структурами в данном случае являются атомарные криокристаллы инертных газов (КИГ) – Ne, Ar, Kr и Xe, которые используются также в экспериментальной технике в качестве сред, передающих давление. Значительный интерес представляет изучение термодинамических и упругих свойств КИГ. Экспериментальные исследования свойств КИГ под очень высоким давлением ставят ряд проблем, которые способствуют созданию соответствующих теорий (в частности, в динамике кристаллической решетки).

Решение некоторых важных аспектов обозначенных выше проблем содержит представленное данным авторефератом диссертационное исследование. В работе на основе неэмпирической версии динамической теории кристаллических решеток в дипольном и квадрупольном приближениях исследуются многочастичные взаимодействия и деформация электронных оболочек атомов вследствие смещения их ядер. В частности,

это позволяет разобраться в природе и соотношении тех сил, которые формируют упругие и термодинамические свойства КИГ при больших давлениях.

Из вышесказанного следует, что предложенное в работе построение первопринципной теории, которая позволяет последовательно в рамках единого подхода количественно и в хорошем согласии с имеющимися экспериментальными данными описывать свойства кристаллических тел в большом диапазоне давлений - **актуально**. Полагаю, что сформулированная в связи с этим **цель работы**: создание методов теоретического описания основного состояния, энергетических спектров фононов, термодинамических величин и упругих свойств сжатых кристаллов инертных газов в модели деформируемых электронных оболочек атомов – **достигнута**.

Основной момент **научной новизны** заключается в том, что впервые в широкой области давления построена динамическая теория кристаллических решеток инертных газов, основанная на *ab initio* потенциале отталкивания с учетом многочастичных взаимодействий и деформации электронных оболочек в дипольном и квадрупольном приближениях

Достоверность полученных результатов определяется тем, что они получены с использованием в расчетах методов и методик теоретической и математической физики, надежность и обоснованность которых многократно подтверждена. Особенно при этом необходимо отметить сопоставление результатов, полученных в диссертационной работе модельных расчетов, с данными экспериментальных исследований и. результатами других авторов. **Обоснованность** представленных результатов также сомнений не вызывает, поскольку они хорошо представлены публикациями в научных изданиях и доложены на соответствующих научных форумах.

В целом полученные в рамках диссертационного исследования результаты достаточно **перспективны**, поскольку они расширяют возможности использования КИГ 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 диссертации дано теоретическое обоснование возможности получения с помощью высокого давления новых функциональных материалов с новыми физическими и химическими свойствами.

В качестве **замечания** отмечу:

- термин «деформируемый атом», на мой взгляд, имеет слишком общее значение, более удачно в данном случае использовать термин – «деформация электронных оболочек атомов»,

- интересно было бы провести в рамках теории функционала плотности компьютерное моделирование зависимости электронной плотности КИГ от давления и получить соответствующие карты электронной плотности этих криоокристаллов.

Несмотря на замечания (которые, скорее – предложения к продолжению исследований), считаю, что представленная авторефератом диссертационная работа Горбенко Е.Е. соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. - физика конденсированного состояния.

«__» июля 2023г.

Доктор физ.-мат. наук

(по специальности 1.3.8. - физика конденсированного состояния), профессор,
зав. отделом теории динамических свойств сложных систем

ФГБНУ ДонФТИ им. А.А. Галкина



В.В. Румянцев

ФГБНУ Донецкий физико-технический институт им А.А. Галкина

283048, Донецк, ул. Р. Люксембург. 72

Тел.: +7 949 427 8198

E-mail: vladimir.rumyantsev2011@yandex.ru

Я, Владимир Васильевич Румянцев, на обработку персональных данных,
приведенных в данном документе, согласен:



В.В. Румянцев

Подпись В.В. Румянцева у д о с т о в е р я ю;

Ученый секретарь ФГБНУ ДонФТИ им А.А. Галкина

канд. техн. наук



О.В. Прокофьева