

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу

Пилипенко Катерини Олександрівни

"Багаточасткова взаємодія та пружні властивості стиснених атомарних кріокристалів", представлену на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла.

В останні роки, завдяки бурхливому розвитку обчислювальної техніки і появи ефективних розрахункових методів, можливості теоретичних досліджень в області моделювання властивостей твердих тіл значно розширилися. У повній мірі це відноситься до аналізу впливу високих тисків на пружні характеристики таких об'єктів. При цьому створення і розвиток відповідних теоретичних уявлень вимагає експериментальної перевірки їхніх висновків на реальних кристалах. Слід зауважити, що таку перевірку необхідно починати з найбільш простих матеріалів без додаткових труднощів, пов'язаних із складним характером сил взаємодії між частинками, що утворюють кристалічну решітку. Найбільш відповідними об'єктами в цьому сенсі є ван-дер-ваальсовські атомарні кристали.

Деякою перешкодою на цьому шляху є існування таких кристалів при кімнатних температурах лише в газоподібному стані, що відбилося і в їх назві - отверділі інертні гази або кріокристали. Але зараз експериментальна техніка досягла вже такого рівню, що стали можливими виміри основних фізичних параметрів до 100 ГПа і навіть більше. Зокрема, рівняння стану кристалічного неону було визначено до 240 ГПа, пружні властивості аргону - до 70 ГПа, а в ксеноні було знайдено структурний перехід при 75 ГПа і перехід діелектрик-метал при 132 ГПа. Відтворити чисельно ці результати і є завданням повноцінної теорії, яка претендує на детальний мікроскопічний опис характеристик конденсованого стану. Таким чином, тема дисертаційної роботи К.О. Пилипенко є, безумовно, **актуальною**.

Що стосується **практичної значущості** виконаних автором досліджень, то вона обумовлена тим фактом, що атомарні кріокристали - це найбільш

перспективні матеріали для використання в якості передатного середовища в умовах високого тиску, оскільки при цьому вони зберігають свою структуру і властивості.

В дисертації К.О. Пилипенко розвинена неемпірична версія квантово-механічної теорії деформованих та поляризованих атомів (модель К.Б.Толпиго) для дослідження пружних властивостей атомарних кріоцисталів з урахуванням багаточасткової взаємодії. Динамічна теорія кристалічних решіток на основі адіабатичного наближення була запропонована спочатку К.Б. Толпиго для іонних і валентних кристалів, а потім вже була поширена на кристали інертних газів. Через те, що атоми останніх мають замкнуті оболонки і не є зарядженими, головну роль в утворенні кристалічної решітки, як і в інших молекулярних кристалах, грають порівняно слабкі сили Ван-дер-Ваальса, які виникають внаслідок взаємної деформації атомів. Саме розгляд ефектів деформації та їх ролі у формуванні пружних властивостей стиснутих кристалів неону, аргону, криптону та ксенону і відрізняє дисертаційну роботу К.О. Пилипенко від інших теоретичних досліджень, які зазвичай обмежувалися аналізом пружних взаємодій в кристалічній решітці на основі емпіричних потенціалів або *ab initio* розрахунків.

Структура дисертації Пилипенко К.О. досить стандартна. Вона складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків і бібліографічного опису, що включає 108 найменувань, з яких сім робіт були виконані автором за темою дисертації.

У вступі дисертант обґрунтовує актуальність теми досліджень, мету та задачі роботи, формулює основні результати, які винесено на захист, аналізує їх наукову та практичну цінність, в також приводить дані щодо апробації дисертації і публікації основних результатів дисертації.

Огляд літератури свідчить про добре знання автором сучасного стану теоретичних та експериментальних досліджень властивостей атомарних кріоцисталів, яке дозволило їй чітко і переконливо сформулювати основні завдання роботи та методи їх вирішення. В основу дисертації покладено

теорію К.Б.Толпиго, яка носить першопринципний характер, оскільки базується на послідовному квантово-механічному виводі атомної взаємодії, а не на модельних уявленнях. Параметри теорії виражаються через матричні елементи гамільтоніана електронної підсистеми, побудовані на хвильових функціях атомів кристала в основному та збудженому станах. Основні етапи отримання адіабатичного потенціалу представлені дисертантом в Додатку.

Другий, третій і четвертий розділи даної роботи є оригінальними.

Наукова новизна основних результатів полягає в наступному:

1. На основі методу Хартрі-Фока в базисі атомних орбіталей, що точно ортогоналізовані на різних вузлах кристалу, досліджено внесок багаточасткової взаємодії в короткодійний потенціал відштовхування. На підставі розрахованих кулонівських інтегралів запропоновано простий вираз для трьохчасткового потенціалу без добіркових або варіаційних параметрів.

2. Вперше в рамках адіабатичного потенціалу разом з багаточастковою взаємодією була врахована ще й деформація електронних оболонок атомів квадрупольного типу, що має принципове значення для дослідження властивостей кріокристалів в умовах високого тиску. Виявилось, що в стисненому аргоні переважає багаточасткова взаємодія, і саме тому цей кріокристал найбільш адекватно описується в теоретичних роботах інших авторів. Що стосується неону, криптону і ксенону, то в них рівним чином важливі як багаточасткова взаємодія, так і квадрупольна деформація електронних оболонок атомів.

3. Були розраховані модулі пружності Бірча і Фукса, коефіцієнт пружної анізотропії Зенера і відхилення від співвідношення Коші для всього ряду стиснених кристалів Ne-Xe в дуже доброму узгодженні з експериментальними даними. Вперше показано, що індивідуальна залежність відхилення від співвідношення Коші для кожного з досліджених кристалів є результатом двох конкуруючих взаємодій - багаточасткової і квадрупольної, яка проявляється в деформації електронних оболонок атомів квадрупольного типу при зміщеннях ядер.

Таким чином, здобувачем вперше було отримано ряд науково обґрунтованих результатів, які мають важливе значення для розуміння ролі трьохчасткової взаємодії і ефектів квадрупольної деформації електронних оболонок атомів при формуванні пружних властивостей атомарних кріокристалів. Складність виконаних теоретичних розрахунків вимагала від неї глибокого знання апарату квантової механіки. Фізична та математична строгість розгляду, всебічна контрольованість зроблених наближень і, нарешті, узгодженість теорії з експериментом дають підставу зробити висновок про **достовірність** результатів дисертації.

При загальній позитивній оцінці дисертації К.О. Пилипенко слід висловити наступні зауваження:

1. Було би дуже корисним розглянути ефекти деформації електронних оболонок в короткодіючому потенціалі відштовхування. На жаль, це не було зроблено.

2. На мій погляд, треба було би більш детально описати обчислювальні методи, використані автором, зокрема, метод розрахунку кулонівських інтегралів. Це можна було би винести в додаток до роботи.

3. Бажано було би врахувати трьохчасткові далекодіючі сили, тим більш, що в моделі К.Б. Толпиги вони виходять з єдиних позицій поряд із взаємодією Ван-дер-Ваальса і, більш того, в Додатку А до дисертації наведено їх вигляд.

4. Розрахунки баричної залежності відхилення від співвідношення Коші, краще було би привести і в більш широкому інтервалі тисків, а не обмежуватися тільки відповідними експериментальними значеннями.

5. Текст дисертаційної роботи написано, в основному, чітко і послідовно, але часом зустрічаються огріхи. Наприклад, для константи Ван-дер-Ваальса використовуються різні позначення: C - у першому розділі, B - у другому і третьому розділах. Одні й ті самі вирази для хвильових функцій наведено двічі - спочатку на стор.27, а потім на стор. 63-64. Зведений рис. 4.8

перенасичений інформацією, що ускладнює його сприйняття. Все це слід врахувати автору в майбутньому.

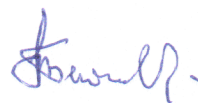
Окремі зауваження, наведені вище, не стосуються суті дисертаційної роботи, основних висновків і наукових положень, що виносяться на захист. Вони мають рекомендаційний характер і не впливають на загальну позитивну оцінку дисертації К.О. Пилипенко, а також не піддають сумніву достовірність отриманих автором результатів і основних висновків.

Результати даної роботи опубліковані в закордонних і українських наукових фахових виданнях і доповідалися на багатьох міжнародних конференціях і семінарах.

Автореферат правильно відображає основний зміст і структуру дисертації.

На мою думку, дисертація К.О. Пилипенко повністю відповідає всім вимогам, які пред'являються до кандидатських дисертацій, в тому числі, пунктам 9, 11 і 12, що стосуються «Порядку присудження наукових ступенів і присвоєння звання старшого наукового співробітника», а її автор, Катерина Олександрівна Пилипенко, без сумніву, заслуговує присудження їй наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 - фізика твердого тіла.

Офіційний опонент:
завідувач лабораторії динаміки електронних процесів в гібридних структурах
Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова
НАН України,
доктор фізико-математичних наук



М.О. Білоголовський

Підпис Білоголовського М.О. засвідчую:

Вчений секретар Інституту металофізики
ім. Г.В. Курдюмова НАН України,
канд. фіз.-мат. наук



Є.В. Кочелаб