

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.

1. Актуальність дисертації.

Атомарні кріокристали (кристали інертних газів – Ne, Ar, Kr, Xe), в порівнянні з іншими кристалами, являють собою відносно просту систему для вивчення, оскільки в елементарній комірці містять один атом із замкнутими електронними оболонками. Це робить їх зручними об'єктами для вивчення ряду фундаментальних проблем поведінки твердого тіла за умови високого тиску. До таких проблем відносяться врахування багаточасткової взаємодії і ефектів деформації електронних оболонок атомів в динаміці ґратки.

Різні фізичні властивості кристалів інертних газів при невеликих тисках ~ 2 ГПа добре описуються за допомогою *ab initio* або емпіричних парних потенціалів. Врахування трьохчасткових потенціалів в якості невеликої поправки дає змогу досягти дуже хорошої згоди теорії і експерименту. При високих тисках введення і точний розрахунок нецентральної багаточасткової сил стає принципово важливим.

Численні теоретичні та експериментальні дослідження пружних властивостей атомарних кріокристалів при високому тиску (більш 10 ГПа) пов'язані з тим, що вони застосовуються в якості передатних середовищ в комірках алмазних ковадл (DAC- diamond-anvil cell).

Застосування Бріллюенівської спектроскопії спільно з методом DAC відкрило нові можливості для інтенсивного експериментального дослідження пружних властивостей атомарних кріокристалів в широкому інтервалі тиску. Отримані в останнє десятиліття результати точних вимірювань поставили під сумнів можливість адекватного опису поведінки стиснених кристалів інертних газів за допомогою існуючих *ab initio* теорій на основі теорії функціонала густини (ТФГ) або використовуваних емпіричних потенціалів.

Тому завдання побудови із перших принципів послідовної, кількісної теорії, яка дозволила б регулярно в рамках єдиної схеми розраховувати пружні властивості кристалів ряду Ne-Xe в широкому інтервалі тисків є своєчасним і має безперечне практичне значення. Це завдання ставиться і вирішується в дисертації Пилипенко К.О. «Багаточасткова взаємодія і пружні властивості стиснених атомарних кріокристалів». У роботі досліджуються

ролі багаточасткової взаємодії і деформації електронних оболонок атомів у формуванні пружних властивостей досліджуваних систем при всебічному стисненні.

Все вищесказане свідчить про актуальність теми дисертаційної роботи Пилипенко К.О. Дана робота виконана у відділі теорії магнетизму і фазових переходів Донецького фізико-технічного інституту ім. О.О. Галкіна НАН України і відповідає держбюджетним темам відділу.

2. Основні наукові результати дисертації та їх новизна.

Рецензована дисертація складається із вступу, чотирьох розділів, висновків, списку цитованої літератури, що складається з 108 найменувань та 1 додатка. Загальний обсяг дисертації становить 125 сторінок, включаючи 16 рис. і 9 таблиць.

У першому розділі дисертації виконано критичний огляд емпіричних і першопрінципних методів розрахунку фізичних властивостей кристалів інертних газів. Основним і найбільш простим методом розрахунку з перших принципів в сучасній фізиці є теорія функціонала густини. Проте вважається, що наближення локальної густини в ТФГ погано описує системи пов'язані слабкими силами Ван-дер-Ваальса, тому застосовність ТФГ до атомарних кріокристалів викликає сумнів. Особливу увагу приділено квантово-механічній теорії деформованих і поляризованих іонів, розробленої К.Б.Толпиго для неметалевих кристалів, яка лежить в основі дисертаційної роботи. Основні етапи отримання адиабатичного потенціалу винесені в Додаток. Відмінною рисою моделі К.Б.Толпиго є розгляд деформаційних ефектів при зміщеннях ядер. Для атомарних кріокристалів вони відіграють першочергову роль, оскільки сили притягання (сили Ван-дер-Ваальса) є результатом взаємної деформуючої дії атомів один на одного. Це робить модель К.Б. Толпиго найбільш прийнятною при розрахунку, властивостей кристалів інертних газів, котрих підвергли всебічному стисненню.

Слід зазначити наочність і зручність таблиці, представленої в кінці першого розділу, в якій наведені найбільш цікаві теоретичні та експериментальні роботи з дисертаційної теми за останні 15 років.

У другому розділі дисертації проведено *ab initio* дослідження короткодіючих багаточасткових сил, пов'язаних з перекриттям електронних оболонок в атомі в наближенні Хартрі-Фока в базисі атомних орбіталей, точно ортогоналізованих на сусідніх атомах кристала. Показано, що вклади двох-, трьох- і чотирьохатомних взаємодій в енергію кристала виражаються через добуток елементів ортогоналізуючої матриці і двох-, трьох- і чотирьохцентрових кулонівських інтегралів. При цьому останні виражаються через інтеграли перекриття i /або міжатомну відстань з коефіцієнтами, які

повільно змінюються з відстанню. Аналіз поведінки цих багатоцентрових інтегралів на основі точних розрахунків двохцентрових кулонівських інтегралів дозволив дисертанту отримати просту форму трьохчасткової взаємодії, яка не має ні підгінних, ні варіаційних параметрів. Її коректність перевірена в ході порівняння з кращими емпіричними потенціалами, що були представлені в роботах харківських вчених, на основі яких отримано рівняння стану в прекрасній згоді з експериментом в широкому інтервалі тиску. Крім цього, на прикладі Ar, була продемонстрована достатність врахування короткодійних трьохчасткових сил для адекватного опису пружних властивостей легких кристалів інертних газів при високих тисках.

У третьому розділі розглянуто деформацію електронних оболонок атома квадрупольного типу. У гармонійному наближенні параметри теорії були виражені через матричні елементи гамільтоніана на хвильових функціях основного і збудженого станів електронів атомів. Потім, на підставі розрахунків з використанням табличних значень хвильових функцій 2p- і 3s-електронів ізолюваного атома Ne, було дано обґрунтування моделі і наближення для визначення параметрів квадрупольної деформації електронних оболонок атомів. Ці параметри виражаються через інтеграл перекриття і його похідні аналогічно трьохчастковим параметрам. На підставі того, що параметри трьохчасткової і квадрупольної взаємодій мають один порядок величин, автором зроблено висновок про необхідність спільного врахування цих взаємодій при розрахунку різноманітних властивостей стиснених атомарних кріоцисталів. Отримано гарну згоду розрахованих пружних властивостей з експериментом для кристалічного Ne.

Четвертий розділ, на мій погляд, є центральним у дисертації. У ньому методи розрахунку, розроблені та апробовані для легких кристалів інертних газів в попередніх розділах, застосовуються для розрахунку модулів Бірча важких кристалів інертних газів, модулів Фукса, коефіцієнта пружного анізотропії Зенера і відхилення від співвідношення Коші всього ряду кристалів Ne-He в широкому інтервалі тисків. Проведене докладне дослідження впливу трьохчасткових сил і ефектів квадрупольної деформації електронних оболонок на різні пружні властивості атомарних кріоцисталів вигідно відрізняє представлену роботу від аналогічних робіт інших авторів, в яких трьохчасткові сили описуються за допомогою неконтрольованих наближень або підгінних параметрів, а деформація електронних оболонок або враховується недостатньо, або повністю ігнорується. Гарна згода результатів розрахунку дисертації з експериментом справляє приємне враження, особливо для баричної залежності відхилення від співвідношення Коші. З теоретичної точки зору відхилення від співвідношення Коші цікаве

тим, що воно не містить параметрів парної взаємодії, що дозволило дисертанту досліджувати трьохчасткову взаємодію і ефекти квадрупольної деформації електронних оболонок атома в найбільш рафінованому вигляді. У роботі показано, що відхилення від співвідношення Коші носить індивідуальний характер для кожного з кристалів ряду Ne-Xe. У разі кристалічного Ag переважає багаточасткова взаємодія, а в Ne, Kr і Xe вклади багаточасткової та квадрупольної взаємодій, з хорошою точністю компенсуються, що забезпечує слабку зміну відхилення від співвідношення Коші із зростанням тиску у повній відповідності з експериментом.

3. Обґрунтованість та достовірність.

Достовірність результатів другого, третього і четвертого розділів, отриманих на основі квантово-механічної моделі деформованих і поляризованих атомів, досягається за рахунок детального обґрунтування використовуваних наближень, а також порівнянням отриманих результатів з експериментальними даними і результатами інших теоретичних робіт. Наукові положення і висновки логічно обґрунтовані.

Таким чином, результати, отримані в дисертаційній роботі, представляють наукову цінність для розвитку даного напрямку фізики твердого тіла.

4. Наукова та практична значимість.

Отримані результати можуть бути використані для розвитку фундаментальних уявлень про природу і співвідношенні сил, що формують пружні властивості стиснених атомарних кріоцисталів. Практична значимість запропонованої теорії полягає в тому, що в ній досліджено властивості кріоцисталів в екстремальних умовах і намічені шляхи розвитку подібної теорії для інших кристалів. Це особливо важливо у зв'язку з зростаючим числом пристроїв, що використовують речовини за умови надвисокого тиску.

5. Зауваження за змістом дисертації.

5.1. Одне і те ж позначення застосовується для різних величин.

Наприклад, P – дипольний момент (див. стор. 26) і ортогоналізуюча матриця (стор. 42); B – модуль пружності (стор. 31) і константа Ван-дер-Ваальса (стор. 55).

5.2. Друге зауваження, носить скоріше характер побажання, полягає в тому, що в дисертації не представлено розрахунок пружних властивостей стисненого Ne.

5.3. Для повноти картини, можна розглянути модулі пружності Браггера та їх похідні, дослідити модулі вищих порядків, що легко зробити, маючи в наявності розраховані модулі Фукса як функцію тиску.

5.4 Цікаво було б побачити рис. рівняння стану, яке неявно представлено в таблицях дисертації.

5.5 Недостить повно обґрунтована зацікавленість автора до співвідношення Коші. Адже відомо, що це співвідношення, як здається опоненту, фактично, ні в якій системі не виповнюються.

Всі вищесказані зауваження мають характер побажання і не впливають на позитивну оцінку дисертації.

Робота виконана на хорошому науковому рівні, основні результати дисертації своєчасно і досить повно опубліковані в реферованих журналах і доповідалися на наукових конференціях, у тому числі і міжнародних.

Автореферат повно і правильно відображає основний зміст дисертації.

6. Висновок.

Оцінюючи дисертаційну роботу в цілому, необхідно зробити висновок, що за актуальності тематики, обґрунтованості та достовірності висновків і положень, новизні отриманих результатів та їх науковому і практичному значенню дисертація К.О. Пилипенко "Багаточасткова взаємодія та пружні властивості стиснених атомарний кріоцисталів", безсумнівно, задовольняє всім вимогам МОН України, що пред'являються до кандидатських дисертацій, а її автор заслуговує присудження їй наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 - фізика твердого тіла.

доктор фізико-математичних наук, професор,
провідний науковий співробітник
відділу теоретичної фізики
Фізико-технічного інституту
температур ім. Б.І. Веркіна
НАН України



Сиркін Є.С.

