

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу **Мусихина Анатолия Евгеньевича**

“ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ПЛОТНОСТЬ ФОНОННЫХ СОСТОЯНИЙ

МОНОКРИСТАЛЛОВ Li_2MoO_4 , CaMoO_4 , BaWO_4 , $\text{Na}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ ”, представленную на

соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

по специальности 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника.

Экспериментальные исследования теплоемкости в широкой области низких температур для монокристаллов молибдатов и вольфраматов щелочных металлов, а также исследование возможности получения информации о плотности фононных состояний при использовании этих прецизионных данных и определение на этой основе других важных характеристик кристаллов, составляющие основу диссертации Мусихина А.Е., являются одним из актуальных направлений в физике конденсированного состояния.

Автором впервые получены экспериментальные данные о теплоемкости монокристаллов Li_2MoO_4 , CaMoO_4 , BaWO_4 и $\text{Na}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ в широкой области низких температур. Для изучаемых объектов вычислены изобарные термодинамические функции. Использовано физически обоснованное описание теплоемкости вблизи нуля.

Предложен алгоритм численного решения обратной задачи, в рамках которого из низкотемпературной теплоемкости восстанавливается плотность фононных состояний. Показана возможность и точность вычисления характеристических температур, связанных с моментами плотности состояний. Продемонстрирована возможность описания с высокой точностью гармонической части решеточной теплоемкости, что позволяет вычислять изохорную теплоемкость и термодинамические функции во всей области существования твердой фазы.

Исследуемые объекты являются перспективными материалами для создания криогенных сцинтилляционных болометров для поиска редких ядерных процессов, а полученные автором данные дают возможность прогнозировать рабочие характеристики таких болометров.

Оригинальный метод численного решения обратной задачи имеет общий характер и может быть использован при исследовании широкого класса твердых тел. Развиваемый автором метод численного решения обратной задачи может быть применен и при решении других физических задач.

Таким образом, тема диссертационной работы Мусихина А.Е. несомненно **актуальна** и представляет **практическое значение**.

Несомненным достоинством работы является сочетание эксперимента и теоретического анализа. Такой комплексный подход к решению рассматриваемой задачи обеспечивает высокую степень **достоверности и убедительности** полученных автором новых результатов в области исследования теплофизических свойств молибдатов и вольфрамов щелочных металлов.

По результатам работы опубликовано 31 работа, из них 12 работ в рецензируемых журналах (из перечня ВАК).

Диссертационная работа по содержанию и структуре отвечает требованиям, предъявляемым ВАК к научно-квалификационным работам на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка литературы и изложена на 212 страницах, включая 21 таблицу и 77 рисунков. Список цитированной литературы содержит 231 наименование.

Во введении обоснована актуальность, сформулирована цель работы и поставлены задачи исследования, определены выбранные для достижения поставленных целей методы и подходы. Обозначена научная новизна, теоретическая и практическая ценность работы, апробация результатов. Приведены положения и результаты, выносимые на защиту.

В первой главе (Литературный обзор) сделан очень подробный обзор методов экспериментального исследования и теоретического описания теплоемкости и плотности фононных состояний твердых тел. Рассмотрены существующие подходы к восстановлению плотности фононных состояний, их преимущества и недостатки.

Основные результаты диссертации представлены в главах 2-3.

Во второй главе описан предлагаемый автором метод численного решения обратной задачи вычисления плотности фононных состояний из низкотемпературной теплоемкости. Описаны требования к исходным данным о теплоемкости, основные этапы реализации метода и его ограничения. Приводятся результаты тестирования и проверки работоспособности развиваемого метода на модельных объектах различной степени сложности.

В третьей главе приведены результаты экспериментального исследования теплоемкости монокристаллов Li_2MoO_4 , CaMoO_4 , BaWO_4 и $\text{Na}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ и получение на их основе термодинамических и других характеристик исследуемых объектов.

К наиболее интересным существенным результатам, на мой взгляд, относятся:

- результаты экспериментального исследования теплоемкости методом вакуумной адиабатической калориметрии, вычисления термодинамических функций монокристаллов ряда молибдатов и вольфрамата в широкой области низких температур;

- усовершенствованный в данной работе метод численного решения обратной задачи и компьютерная программа, позволяющая вычислять огибающую плотности фононных состояний;
- алгоритм вычисления энергии нулевых колебаний на основе экспериментальных данных по теплоемкости;
- результаты расчета плотности фононных состояний и получения на ее основе физико-химических характеристик исследуемых объектов.

Работа является законченным исследованием и выполнена автором самостоятельно на высоком научном уровне. Проведенные научные исследования и результаты, полученные на их основе, **новы и практически значимы**. Представленные в работе исследования **достоверны**, выводы и рекомендации **хорошо обоснованы**.

Вместе с тем работа не свободна от недостатков, по поводу которых можно высказать ряд замечаний:

- В Заключение (стр. 188, пункт 4) сказано, что “В рамках разрабатываемого метода численного решения обратной задачи восстановления плотности фононных состояний твердого тела на основе его низкотемпературной теплоемкости создана *компьютерная программа*, позволяющая вычислять огибающую плотности состояний.” Однако никаких деталей этой программы или ссылки на нее в работе не приводится.
- Как указывает автор “Предлагаемый в настоящей работе метод чувствителен к характеристикам образцов, а также к точности измерения теплоемкости с учетом точности выделения ее решеточной компоненты. ... необходимо корректно выделить вклад электронной, магнитной, аномальной и других компонент.” Неправильный учет этих вкладов может существенно повлиять на результат вычисления плотности состояний. С объектами исследований автору “повезло” – в них нет ни электронного, ни магнитного вкладов в теплоемкость. На тестируемых материалах (меди и других) автор использовал литературные данные теплоемкости с уже вычтенными дополнительными вкладами. Было бы интересно посмотреть, как точность выделения этих вкладов влияет на результат определения фононной плотности состояний. Зачастую основной задачей исследований является именно корректное выделение электронного, магнитного, аномального и других вкладов в теплоемкость. Особенно это важно в низкотемпературной области, где решеточная теплоемкость наиболее чувствительна к тонким деталям фононного спектра.
- Во всех исследованных кристаллах автор обнаружил низкочастотный пик в плотности состояний. Присутствие низкочастотного пика автор связывает с тем, что “в хорошо

упорядоченной структуре кристалла колеблются некоторые фрагменты структуры как единое целое, так как масса таких фрагментов может быть значительной, частота колебаний таких фрагментов может быть достаточно мала. Такое поведение ожидаемо для кристаллов, имеющих хорошо упорядоченную структуру в дальнем порядке.” Утверждение, на мой взгляд, довольно расплывчато и не объясняет физических причин явления именно в этих кристаллах. Что это за “некоторые фрагменты структуры”, ведь структура кристаллов хорошо установлена?

- В целом диссертация оформлена хорошо, хотя встречаются некоторые технические погрешности. Например, на однотипных Рисунках 2.9, 3.7, 3.23, 3.38, 3.50 – “Отклонения $\Delta g^{(k)}(\omega)$ ряда решений $g^{(k)}(\omega)$ от усредненной плотности состояний $g(\omega)$ для ..., где k – номер` расчета (от 1 до 8).” отсутствует легенда. То же касается и рисунков 3.9, 3.24, 3.39, 3.51.

В целом указанные замечания не влияют на общую положительную оценку диссертации. Диссертация является законченной научно-исследовательской работой, в которой содержится решение задач, имеющих важное значение для физики конденсированного состояния. По целям, содержанию и методам исследования диссертационная работа соответствует избранной специальности - теплофизика и теоретическая теплотехника.

Представленные материалы хорошо отражены в публикациях, прошли апробацию на многочисленных конференциях. Автореферат соответствует содержанию диссертации.

Диссертационная работа **Мусихина Анатолия Евгеньевича “ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ПЛОТНОСТЬ ФОНОННЫХ СОСТОЯНИЙ МОНОКРИСТАЛЛОВ Li_2MoO_4 , CaMoO_4 , BaWO_4 , $\text{Na}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ ”**, соответствует критериям, которым должна отвечать кандидатская диссертация согласно п. 9 “Положения о порядке присуждения ученых степеней”, утвержденных постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 (с изменением от 21.04.2016 № 335), а ее автор **Мусихин Анатолий Евгеньевич** заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника.

Я, Горев Михаил Васильевич, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой Мусихина Анатолия Евгеньевича и их дальнейшую обработку.

5