

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.

Диссертационная работа Мусихина Анатолия Евгеньевича посвящена актуальной проблеме в области материаловедения оксидных кристаллов – получению термодинамических характеристик на основе экспериментальных данных для монокристаллов молибдатов и вольфраматов щелочных и щелочно-земельных металлов.

При этом были измерены теплоемкости монокристаллических образцов выращенных в ИНХ СО РАН молибдатов лития и кальция, и вольфраматов натрия и бария в широкой области температур (от 6 до 310 К) методом адиабатической калориметрии.

Автором проведен анализ поведения теплоемкости и получены данные о термодинамических функциях, таких как энтропия, энтальпия и энергия Гиббса, а также развит подход для решения обратной задачи восстановления плотности фононных состояний на основе теплоемкости. В работе А.Е. Мусихина проведены вычисления плотности фононных состояний и отработан алгоритм вычисления изобарных термодинамических функций и оценка температуры Дебая при 0 К для исследуемых кристаллов.

Автором обнаружена особенность в поведении теплоемкости связанная с наличием низкочастотного пика в плотности фононных состояний. Показана возможность вычисления характеристических температур, и описания гармонической части теплоемкости решетки для вычисления изохорной теплоемкости и термодинамических функций твердой фазы. Представлен алгоритм вычисления и получены данные об энергии нулевых колебаний изученных монокристаллов.

Тематика исследований Мусихина Анатолия Евгеньевича является **актуальной** и имеет **практическое значение**.

Достоверность полученных результатов обеспечивается применением комплекса современных экспериментальных и теоретических физико-химических методов исследования, а также тщательным анализом используемых методик.

Материалы исследования опубликованы в 12 статьях в рецензируемых журналах (из перечня ВАК, в том числе 2 в российских и 10 в зарубежных) и 19 тезисах докладов на российских и международных конференциях.

Диссертация по структуре и содержанию в полной мере отвечает требованиям, предъявляемых ВАК к научно-квалификационным работам на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка литературы на 212 страницах, включая 21 таблицу, 77 рисунков и список цитируемой литературы из 231 наименования.

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

В первой главе проведен обзор литературы, включая экспериментальные и теоретические методы определения теплоемкости и плотности фононных состояний твердых тел. Проведен анализ развитых к настоящему времени методов по восстановлению плотности фононных состояний, их возможности и недостатки.

Во второй главе раскрыты основные особенности, ограничения и этапы реализации численного решения обратной задачи вычисления плотности фононных состояний из данных о теплоемкости кристаллов. Приводятся теоретические методы получения других термодинамических функций и проводится тестирование развиваемых методов на модельных объектах. Сопоставляются восстановленные из расчетов термодинамические данные с другими литературными источниками.

В третьей главе автором приводятся результаты экспериментов для получения надежных и точных данных о теплоемкости выбранных монокристаллов, ее анализе, вычисление плотности фононных состояний, сопоставление с имеющимся литературными данными и восстановлении других термодинамических величин на этой основе.

В заключении сформулированы основные результаты и выводы проведенных экспериментальных и теоретических исследований.

К наиболее существенным результатам данной работы относятся:

- экспериментальные данные о теплоемкости монокристаллов молибдата лития, молибдата кальция, вольфрамата бария и дивольфрамата натрия полученные на адиабатическом калориметре в области низких температур, позволившие получить характеристики кристаллов в том числе температуру Дебая при $T \rightarrow 0\text{K}$.

- развитие метода численного решения обратной задачи с учетом привязки к экспериментальным данным при низких температурах и физически обоснованным ограничениям при высоких температурах.

Представленная диссертационная работа является законченным исследованием и выполнена на высоком научном уровне. Проведенные экспериментальные и теоретические исследования и результаты, полученные на их основе, являются **новыми и практически значимыми**. Представленные в работе исследования **являются достоверными**, а выводы и рекомендации **хорошо обоснованными**.

В автореферате достаточно подробно отражено основное содержание диссертации, включающей разделы: введение, теоретическая и экспериментальная части, результаты и их обсуждение и заключение, в котором суммированы все основные результаты и выводы исследования.

В работе на наш взгляд, имеются незначительные недочеты.

1. В тексте диссертации проведен детальный анализ поведения теплоемкости исследованных кристаллов во всем исследованном интервале температур и рассчитаны, в том числе, значения температуры Дебая при $T \rightarrow 0$ (см. стр.

102), но в заключении и в автореферате автор пишет, что это «позволило достоверно определить температуру Дебая при нуле для исследованных кристаллов...», хотя экспериментальные данные начинаются с 6К. Каковы, на взгляд автора, были бы отклонения оцененных им значений температуры Дебая при 0К, если бы удалось провести измерения при более низких температурах?

2. Из текста не вполне ясно, является ли восстановление плотности фононного спектра, только по данным о теплоемкости кристаллов, корректно поставленной обратной задачей? Особенно в «среднетемпературном диапазоне».

3. Как примеси могут сказываться на теплоемкости монокристаллических образцов при низких температурах, и соответственно влияют ли они на восстановленный фононный спектр при «нулевых температурах»? И как это сказывается на других термодинамических функциях, значения которых были рассчитаны по данным о теплоемкости.

4. В оформлении есть небольшие недочеты, например для рисунков 2.8 и 2.9, 3.6 и 3.7 указывается, что «масштаб шкалы по оси ординат на ... одинаковый», что противоречит данным приведенных на самих рисунках.

Сделанные замечания не снижают ценности представленных в диссертации экспериментальных и теоретических результатов и не влияют на положительную оценку самой диссертации. Диссертация Мусихина А.Е. является законченным научным исследованием, содержащим достаточное количество нового экспериментального и теоретического материала, и посвящена решению задач, имеющих важное значение для физики конденсированного состояния. По поставленным целям, содержанию и методам исследования диссертационная работа соответствует избранной специальности: «теплофизика и теоретическая теплотехника».

Представленные в диссертации материалы хорошо отражены в научных публикациях и прошли апробацию на конференциях. Автореферат отражает содержание диссертации.

Диссертационная работа **Мусихина Анатолия Евгеньевича** «Теплоемкость и плотность фоонных 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 г. (с изменением от 21.04.2016 №335), а соискатель **Мусихин Анатолий Евгеньевич** заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.14 – «теплофизика и теоретическая теплотехника».

Я, Мешалкин Аркадий Борисович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой Мусихина Анатолия Евгеньевича и их дальнейшую обработку.

Официальный оппонент,
Мешалкин Аркадий Борисович,
Доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник
Лаборатории термодинамики веществ и материалов
ФГБУН Института теплофизики Сибирского отделения РАН

Почтовый адрес:
630090, г. Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, 1;
E-mail: kaplun@itp.nsc.ru
Тел. +7 (383) 3165033

 Мешалкин Аркадий Борисович

15.01.2021

Подпись Мешалкина А.Б. заверяю
Ученый секретарь ИТ СО РАН, к.ф.-м.н.



 М.С. Макаров