

Autonomous Non-Profit Organization for Higher Education
Skolkovo Institute of Science and Technology
Russian Federation, 121025, Moscow, Bolshoy Boulevard 30, bld. 1
Telephone +7 495 280 1481

Professor Artem R. Oganov, FRSC MAE

Member of Academia Europaea
Fellow of the Royal Society of Chemistry
Fellow of American Physical Society
Fellow of Mineralogical Society of America

<http://uspex-team.org>

E-mail: a.oganov@skoltech.ru

Москва, 21 января 2021 г.

Отзыв на автореферат кандидатской диссертации Мусихина Анатолия Евгеньевича «Теплоемкость и плотность фононных состояний монокристаллов Li_2MoO_4 , CaMoO_4 , BaWO_4 , $\text{Na}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ », представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника.

Термодинамические функции и динамика решетки находятся в самом центре теории твердого тела. Одной из ключевых функций является плотность фононных состояний – но к сожалению, ее экспериментальное определение непростое. В данной работе разработан и применен метод реконструкции плотности фононных состояний на основе экспериментальных теплоемкостей. В работе выполнен очень интересный и глубокий анализ проблемы, автор показал отличное понимание предмета и знание литературы. Как метод, так и полученные результаты представляют большой интерес. Очень хорошо, что разработанный метод применен как к сцинтилляторным материалам (наиболее интересным для автора работы), так и к совершенно другим с точки зрения динамики решетки фазам (органическим солям). Было бы крайне интересно и дальше расширить круг объектов – например, на высокотемпературные сверхпроводники.

Несколько второстепенных замечаний.

1. В автореферате и диссертации отмечено, что разработанный метод позволяет рассчитывать энергию нулевых колебаний. На самом деле, можно тривиально определить энергию нулевых колебаний – напрямую из теплоемкости C_v , как интеграл от $T=0$ до бесконечной T : $E_{zp} = \int_0^\infty (C_v - 3nR) dT$. Этот интеграл сходится при не очень высоких конечных температурах и дает нулевую энергию E_{zp} .
2. На стр. 46 упоминаются расчеты плотностей состояния с помощью первопринципных расчетов совместно с методом Монте Карло – но ссылки даны на классические (не первопринципные) расчеты методом Монте Карло. Вероятнее всего, автор имел в виду «квантовый Монте Карло» - это продвинутый метод расчета полной энергии, из которой можно (с трудом) получить динамику решетки.
3. Для некоторых изученных соединений плотности состояний, полученные из теплоемкости, сравниваются с данными первопринципных расчетов. В идеале хотелось бы видеть это для всех соединений. Но это потребовало бы довольно сложных квантово-механических расчетов.

4. Можно предположить, что хорошие результаты могли бы быть получены, если бы вместо гистограммы плотности состояний был выбран более простой подход, где функция представлена в базисе – например, можно было бы использовать базис из двух дебаевских функций, равномерного «ящика», и нескольких гауссовых пиков. Это сократило бы число параметров на порядок. Пробовал ли автор такой подход?

Эти замечания второстепенны и никак не влияют на мою крайне положительную оценку и высокую ценность данной диссертации.

На основании выполненных автором исследований разработаны теоретические положения, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение, имеющее важное значение как для фундаментальной, так и для прикладной науки. Автор абсолютно заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности **01.04.14** – теплофизика и теоретическая тепломеханика.

Я, Оганов Артем Ромаевич, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации Мусихина Анатолия Евгеньевича, и их дальнейшую обработку.

Артем Ромаевич Оганов

Доктор физико-математических наук по специальности «кристаллография и минералогия».

Профессор Сколковского Института Науки и Технологий

Профессор РАН

Адрес: Сколковский Институт Науки и Технологий, Москва 121205, Большой бульвар 30 стр.1.

Телефон (495)-280-1481.

Email: a.oganov@skoltech.ru



Prof. Artem R. Oganov MAE FRSC

Member of Academia Europaea; Fellow of the Royal Society of Chemistry; Fellow of the American Physical Society; Fellow of the Mineralogical Society of America

21.01.2021

Подпись Оганова А.Р. подтверждена
Руководитель отдела
Кадрового администрирования

