

ОТЗЫВ

на диссертацию Феи Олега Дмитриевича
«Эволюционное предсказание структуры поверхностей кристаллов и объемных карбидов», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

Автор отзыва

ФИО: Квашнин Дмитрий Геннадьевич

Ученая степень: к.ф.-м.н.

Год присуждения ученой степени и научная специальность, по которой присуждена ученой степени: 2015, физическая химия

Ученое звание: -

Место работы (полное название организации в соответствии с Уставом, подразделение):
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук

Должность: старший научный сотрудник

Контактная информация: тел. 8-916-236-75-35, email: dgkvashnin@phystech.edu

Диссертационная работа Олега Дмитриевича Феи посвящена систематическому поиску новых метастабильных фаз углерода, реконструкций поверхностей оксида титана, кварта, кристобалита и стишовита с помощью эволюционных алгоритмов, реализованных в пакете USPEX.

Предсказание новых материалов с желаемыми свойствами является, на сегодняшний день, одно из основных задач материаловедения. Долгое время считалось невозможным решение задачи по поиску глобального минимума энергетического ландшафта. На сегодняшний день одним из эффективных способов поиска глобального минимума является использование генетических, или эволюционных, алгоритмов. В данной диссертационной работе проведено предсказание новых материалов различной структуры, ранее неизвестные реконструкции поверхностей, получено 90 структур нанокластеров кремнезема, а также была детально изучена устойчивость карбидов переходных металлов.

В результате исследования были получены следующие основные результаты:

- 1) Предсказано метастабильное семейство углерода, демонстрирующий полупроводниковые свойства и твердость 70-73 ГПа;
- 2) Получено правило формирования карбидов переходных металлов;

- 3) Предсказаны три реконструкции поверхности диоксида титана (011) – титанил-TiO₂, титанил-Ti₂O₃, MF(111)-TiO. Определены основные механизмы формирования предсказанных реконструкций;
- 4) Определены устойчивые реконструкции кристобалита, кварца и стишовита. Описаны структурные параметры кристаллической решетки. Кроме того, были с помощью эволюционного алгоритма были предсказаны две низкоэнергетические реконструкции α-кварца (001), одна из которых, подтверждается экспериментальными данными.

В ходе диссертационного исследования были получены новые актуальные научные результаты. Считаю, что тема диссертации имеет как научный, так и практический интерес, она соответствует основным направлениям фундаментальных исследований по приоритетным направлениям науки, технологии и техники. Считаю, что работа О.Д. Феи полностью соответствует требованиям, а Олег Дмитриевич Фея заслуживает присвоения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН
Лаборатория акустической микроскопии
с.н.с, к.ф.-м.н., Д.Г. Квашнин

04.04.2019

