

Заключение

диссертационного совета Д 212.141.17, созданного на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)»
Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 19 декабря 2018г. № 18

О присуждении Глушкову Владимиру Леонидовичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Расчет поверхностных характеристик металлов методом функционалов плотности» по специальности 01.04.07 — Физика конденсированного состояния принята к защите 10.10.2018 г. (протокол заседания № 16) диссертационным советом Д 212.141.17, созданным на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, 105005, г. Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1, приказ № 105/нк от 11.04.2012 г.

Соискатель Глушков Владимир Леонидович, 1987 года рождения.

В 2010 году соискатель окончил государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана». С 20.10.2010г. по 19.10.2013г. соискатель обучался в очной аспирантуре федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)». В настоящее время соискатель работает в должности ассистента кафедры физики научно-учебного комплекса «Фундаментальные науки» федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государ-

ственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» Министерство науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре физики научно-учебного комплекса «Фундаментальные науки» ФГБОУ ВО «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» Министерство науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель — кандидат физико-математических наук, доцент Еркович Ольга Станиславовна, ФГБОУ ВО «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)», доцент кафедры физики научно-учебного комплекса «Фундаментальные науки».

Официальные оппоненты:

Кондаков Олег Викторович доктор физико-математических наук, доцент, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Елецкий государственный университет им. И.А. Бунина», профессор кафедры физики;

Чаусов Денис Николаевич кандидат физико-математических наук, доцент, государственное образовательное учреждение высшего образования Московской области «Московский государственный областной университет», заведующий учебно-научной лабораторией теоретической и прикладной нанотехнологии дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого», г. Санкт-Петербург, в своем положительном отзыве, подписанном Апушкинским Евгением Геннадьевичем, доктором физико-математических наук, профессором, заведующим кафедрой экспериментальной физики, Макаровым Сергеем Борисовичем, доктором технических наук, профессором, директором института физики, нанотехнологий и коммуникаций и утвержденном Сергеевым Виталием Владимировичем, доктором технических наук, профессором, проректором по научной работе, указала, что диссертация Глушкова В.Л. является законченной научно-

квалификационной работой, выполненной на высоком уровне, в которой на основе проведенных автором исследований изложены новые сведения о методах расчета поверхностных свойств металлов в рамках метода функционала плотности с учетом взаимодействия с ионной решеткой и поправками на неоднородность электронного газа в приповерхностной области. Результаты диссертации могут найти применение при создании поверхности металла с заданными характеристиками, при исследовании взаимодействия излучения с веществом, теоретически полученные значения характеристик поверхности позволяют совершенствовать методы экспериментального анализа и диагностики поверхности.

Соискатель имеет 11 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 11 работ, из них в рецензируемых научных изданиях опубликованы 4 работы. Общий объем опубликованных работ по теме диссертации 9,0 п.л., из которых 5,2 п.л. принадлежат лично соискателю. Требования п.п. 11 и 13 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемые к публикации основных научных результатов диссертации, выполняются. Требования, установленные п. 14 действующего Положения о присуждении ученых степеней, соблюдаются. Сведения об опубликованных работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, достоверны.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Глушков В.Л., Еркович О.С. Учет влияния градиентных поправок кинетической энергии при расчете поверхностных характеристик металлов // Наноматериалы и наноструктуры – XXI век. 2018. Т. 9. №1. С. 8-18.
2. Глушков В.Л., Еркович О.С. Характеристики поверхности щелочных металлов с учетом дискретности кристаллической решетки и фриделевских осцилляций электронной плотности // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2017. Т. 73. №4. С. 75-89.
3. Глушков В.Л., Еркович О.С. Энергетические характеристики поверхностей щелочных металлов с учетом фриделевских осцилляций электронной плотности // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Сер. Физико-математические науки. 2014. Т. 206. №4. С. 9-18.

4. Глушков В.Л., Еркович О.С. Метод многочастичных функционалов плотности в описании двухкомпонентных систем // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2011. Т. 40. №1. С. 33-38.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы от: **Горелика В.С.**, доктора физико-математических наук, профессора, заслуженного деятеля науки Российской Федерации, главного научного сотрудника ФГБУН «Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук»; **Манько О.В.**, доктора физико-математических наук, ведущего научного сотрудника сектора теоретической радиофизики Отделения квантовой радиофизики им. Н.Г. Басова ФГБУН «Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук»; **Левина В.П.**, кандидата физико-математических наук, доцента, старшего научного сотрудника ФГБУН «Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН»; **Коротаева С.М.**, доктора физико-математических наук, главного научного сотрудника Центра геоэлектромагнитных исследований – филиала ФГБУН «Институт физики Земли им. О.Ю. Шмидта Российской академии наук»; **Хасаншина Р.Х.**, кандидата физико-математических наук, доцента, начальника лаборатории АО «Композит».

Все отзывы положительные. В качестве замечаний отмечено, что было бы целесообразно представить в виде графиков, а не в виде таблиц, результаты, полученные для значений поверхностной энергии щелочных металлов, а также для работы выхода электрона с поверхности и высоты потенциального барьера (Горелик В.С.); осуществить с опорой на полученные результаты описание адгезии различных металлов и металлических покрытий, что повысило бы прикладную значимость работы (Хасаншин Р.Х.); представить рассчитанные характеристики поверхности не только аналитически, но и графически, при рассмотрении вклада дискретности кристаллической решетки, а также рисунок, отображающий распределение электронной плотности, учитывающее осцилляции Фриделя (Коротаев С.М.); не рассмотрен вопрос о построении вида функционала, определяющего поверхностную энергию основного состояния электронного газа у поверхности металла (Манько О.В.).

В отзывах сделан вывод о том, что диссертация Глушкова Владимира Леонидовича отвечает требованиям, предъявляемым ВАК Минобрнауки РФ к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой сте-

пени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Выбор официальных оппонентов обоснован тем, что они являются компетентными специалистами в области физики конденсированного состояния (теоретическое исследование взаимодействия электромагнитного излучения с веществом в условиях магнитного квантования – Кондаков О.В., теоретическое и экспериментальное исследование нанокompозитов – Чаусов Д.Н.).

Выбор ведущей организации обоснован тем, что сотрудники ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» проводят передовые экспериментальные и теоретические исследования в области проблем разработки и использования перспективных материалов и технологий машиностроения и медицины, решают проблемы прецизионной физики атомно-молекулярных систем и квантовых корреляций немакроскопических систем, опирающихся, в том числе, на современные разработки в области физики конденсированного состояния.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана универсальная математическая модель, описывающая распределение электронной плотности $n(x)$ в приповерхностной области, учитывающая осцилляции электронной плотности;

предложен подход к расчету характеристик поверхности металла, учитывающий взаимодействие электронного газа с ионной решеткой и градиентные поправки в функционал поверхностной энергии;

доказано, что использование функции распределения электронной плотности, включающей осцилляции Фриделя, позволяет получить хорошее согласие рассчитанных и экспериментальных характеристик поверхности;

введены новые пробные функции распределения электронной плотности на границе раздела «металл-вакуум».

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказано, что колебания электронной плотности оказывают существенное влияние на значения поверхностных характеристик;

применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов) использованы

методы теории функционалов плотности, в рамках которых было получено аналитическое выражение зависимости электронной плотности от расстояния до границ поверхности металла, которое включает осцилляции Фриделя;

изложены доказательства того, что вычисленные значения поверхностной энергии тем меньше, чем более плотно упакованной является поверхностная грань; учет градиентных вкладов к обменно-корреляционным и кинетическим составляющим функционала поверхностной энергии улучшает согласие рассчитанных значений с экспериментальными данными для металлов с высокой электронной плотностью;

раскрыто несоответствие величины поверхностной энергии, полученной в модели однородного фона, экспериментальным значениям, из чего следует необходимость в корректировке данной модели путем включения электронного взаимодействия;

изучено влияние ориентации кристаллографических граней на значения поверхностной энергии, работы выхода электрона и высоты потенциального барьера для ряда металлов;

проведено уточнение функционала поверхностной энергии путем включения градиентных поправок высокого порядка в функционал кинетической и обменно-корреляционной энергий;

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

разработаны методы расчета электронной плотности, учета дискретности кристаллической решетки при вычислении характеристик поверхности;

определены границы применимости дискретной модели ионного остова в рамках теории функционала плотности при вычислении значения поверхностной энергии, работы выхода электрона и высоты потенциального барьера для поверхности металла, которые могут быть использованы при проектировании материалов с новыми характеристиками поверхности;

представлены рекомендации по выбору вида функционала поверхностной энергии для металлов с различным значением электронной плотности;

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

все теоретические положения и полученные результаты расчетов согласуются с опубликованными теоретическими и экспериментальными данными, заре-

комендовавшими себя в научном мире как наиболее достоверные;
идеи базируются на обобщении большого количества литературных данных и результатах, полученных различными, взаимно дополняющими методами;
использовано сравнение полученных результатов с экспериментальными и теоретическими данными других авторов;
установлено количественное совпадение полученных в работе результатов с независимыми экспериментальными и теоретическими данными (Матвеев А.В., Мамонова М.В., Прудников В.В., Фоменко В.С., Kiejna A., Sahní V.);
использованы современные методы обработки полученных результатов, соответствующие целям и задачам исследований.

Личный вклад соискателя состоит в: разработке представленных в диссертации моделей и их анализе, получении теоретических результатов по исследованию электронной структуры поверхности металла, сравнении результатов расчетов, в рамках разработанных моделей, с экспериментальными данными, в проведении анализа возможности использования полученных результатов исследований в практических приложениях, в апробации результатов исследования, а также в подготовке основных публикаций по выполненной работе.

Диссертационная работа соответствует пункту 1 паспорта научной специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Диссертационным советом сделан вывод о том, что диссертационная работа Глушкова Владимира Леонидовича «Расчет поверхностных характеристик металлов методом функционалов плотности» соответствует критериям, установленным п.п. 9 и 10 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. Она является самостоятельной завершенной научно-квалификационной работой, в которой содержится решение важной для физики конденсированного состояния научной задачи, связанной с описанием электронной структуры и поверхностных свойств металлов. Диссертация Глушкова В.Л. обладает внутренним единством, содержит новые научные результаты и положения, выдвигаемые для публичной защиты, и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку.

На заседании 19 декабря 2018 года диссертационный совет принял решение присудить Глушкову В.Л. ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них 14 докторов наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 15, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель

диссертационного совета

Коржавый Алексей Пантелеевич

Ученый секретарь

диссертационного совета

Лоскутов Сергей Александрович

Дата оформления Заключения 19 декабря 2018 года