

ОТЗЫВ официального оппонента
на диссертацию на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
Бибикова Антона Валентиновича
на тему: "Исследование квантовомеханическими методами влияния
химического окружения на электронный захват
ядрами в наноструктурах",
по специальности 01.04.16 – физика атомного ядра
и элементарных частиц

Влияние химической среды на характеристики ядерных процессов активно изучается ядерной спектроскопией. В то же время такие структуры, как фуллерены и фуллерены с помещенными внутрь них атомами являются популярным объектом современных исследований. К накопленным за десятилетия экспериментальным данным по распаду ядра ${}^7\text{Be}$ при К-захвате в разных химических средах недавно добавились данные о распаде ядра ${}^7\text{Be}$ в нанобъекте - фуллерене C_{60} . Таким образом, тема диссертации А.В.Бибикова, где теоретически исследуется распад ядра ${}^7\text{Be}$ при К-захвате в различных наноструктурах: фуллеренах C_{60} , C_{70} , C_{36} , кластерах металла бериллия, оксида и гидроксида бериллия, - несомненно является актуальной. В более общем ракурсе вопрос о воздействии фуллерена на помещенный в него атом является важным также для многих приложений, включая квантовые компьютеры. Интерес представляет использование фуллерена как своеобразного защитного чехла, изолирующего атом от внешних воздействий.

В своем исследовании по К-захвату ${}^7\text{Be}$ диссертант применяет разработанный им вариант метода Хартри-Фока для расчета электронных свойств молекул и наносистем, позволяющий проводить быстрые и высокоточные квантовомеханические расчеты "из первых принципов". Метод и пакет программ собственной разработки используют

дополнительное разложение по так называемому RI-базису («разложение единицы», сейчас этот метод чаще называют Density Fitting), позволяющее на порядки увеличить скорость счета и применять его к структурам, включающим до сотни атомов. Метод апробирован диссертантом на большом количестве молекулярных систем, включая задачу связывания молекулярного водорода в углеродных наноструктурах.

Диссертация состоит из введения, 6 глав, заключения и снабжена списком литературы.

Во введении обоснованы актуальность исследований и их новизна, сформулированы цели и перечислены основные результаты, выносящиеся на защиту.

В первой главе дан обзор экспериментальных данных по скорости распада ядра ${}^7\text{Be}$ в различных веществах, обсуждаются основные методы расчета электронных свойств молекул, описаны преимущества разработанного метода и возможности созданного пакета программ; отражен личный вклад автора в его разработку.

Во второй главе изложены основы используемого метода "разложения единицы", продемонстрирована его сходимость с увеличением базиса к результатам, полученным стандартными методами, на ряде молекул. Показано, что время счета может быть уменьшено на порядки без существенного ущерба для точности вычислений. При этом выигрыш в скорости оказывается тем больше, чем больше размер системы.

В третьей главе в качестве апробации метода рассмотрена актуальная задача хранения водорода и проведен пилотный поиск материалов, способных связывать водород без образования химической связи. Такое связывание требуется для эффективного хранения и при этом легкого высвобождения водорода из среды при использовании в качестве топлива для водородных двигателей. Предложены несколько молекулярных структур, на базе которых может быть построен материал, обеспечивающий нужные параметры связывания молекул водорода и необходимую плотность связанного водорода.

В четвертой главе рассмотрены эндодральные фуллерены C_{60} и C_{70} - с помещенным в их центре атомом ^7Be . Квантовомеханический расчет методом Хартри-Фока показал увеличение электронной плотности на ядре бериллия при помещении его внутрь фуллерена C_{60} . Аналогичный, но более слабый эффект получен и для фуллерена C_{70} . Подробно обсуждаются причины этого явления.

В пятой главе аналогично рассмотрен распад ядра ^7Be в фуллерене C_{36} . Меньший размер системы позволил провести более тщательное исследование энергетической поверхности молекулярной системы – выяснить оптимальную конформацию фуллерена C_{36} , найти для нее оптимальное положение атома бериллия внутри и вне фуллерена C_{36} . Для этой системы предсказано наибольшее время распада ядра ^7Be из всех исследованных соединений.

В шестой главе рассматривается распад ядра ^7Be в металлических кластерах бериллия и неметаллических оксида бериллия разного размера до ~100 атомов. Обсуждается различие в характере сходимости электронной плотности на ядре центрального атома. Отмечается более быстрая и стабильная сходимость для неметалла. Колебания плотности на ядре центрального атома металлического кластера объясняются эффектом "квантовой точки" и проиллюстрированы простым модельным расчетом. Для неметаллических кластеров оксида и гидроксида бериллия получена зависимость электронной плотности на ядре ^7Be от давления.

В диссертации получен целый ряд других интересных и новых результатов, среди которых можно отметить объяснение эффекта увеличения электронной плотности на ядре бериллия не отталкивающим потенциалом стенки фуллерена C_{60} , а формированием дополнительного узла волновой функции в притягивающем потенциале и предсказание существенного уменьшения скорости распада ^7Be в фуллерене C_{36} . Последнее представляет интерес для экспериментальной проверки.

Характеризуя диссертацию в целом, ее содержание находится на стыке ядерной физики, физики наноструктур и квантовой химии, а разработанный

диссертантом комплекс программ, может быть использован для исследования молекул большого размера и наносистем во многих научных центрах. Он позволяет существенно расширить область применения высокоточных *ab-initio* методов на системы, для которых раньше были доступны только полуэмпирические методы и метод функционала плотности. Проведенный детальный анализ и объем работ, охватывающих большое количество соединений и структур, вызывают уважение. Для диссертации характерно тщательное исследование сходимости используемых методов и точности получаемых результатов. Хорошо просматриваются направления дальнейшего развития тематики диссертации, что создает ощущение динамичной эволюции всей области.

Диссертация хорошо оформлена и написана, число опечаток минимально. Имеются замечания по тексту диссертации:

- Ясно, что существует температурная зависимость скорости распада ${}^7\text{Be}$, находящегося в химическом окружении. Этот вопрос в диссертации не обсуждается. Изменения энергии в рассматриваемых системах часто составляют доли электронвольта. Как может повлиять учет температуры на скорость распада в разных соединениях?

- Мне кажется неправильным, что в диссертации отсутствует хотя бы краткое описание метода Меллера–Плессета второго порядка (MP2), используемого автором и основанного на теории возмущений, а не на вариационном принципе. То же относится к используемому автором методу CASPT2.

- Хотя отдельно приведен список используемых аббревиатур, его явно не достаточно. В нем, по крайней мере, не хватает расшифровки обозначений для многочисленных типов молекулярных базисов, известных только узкому кругу специалистов по вычислительной квантовой химии.

- На рис. 4.2 для иллюстрации следовало бы изобразить для сравнения с результатом диссертанта схему уровней из работы [25], которая описывается словами в тексте. На рис. 4.5 представлен гладкий модельный потенциал с

указанными в тексте конкретными шириной и глубиной, но без указания формы.

Вместе с тем, указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования, которое выполнено на высоком научном уровне. Достоверность представленных результатов основывается на том, что они получены с помощью современных квантовомеханических методов, согласуются с имеющимися экспериментальными данными и теоретическими расчетами, опубликованы в ведущих мировых журналах. Автореферат адекватно отражает результаты диссертации. На базе материалов диссертации оформлен патент.

Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М. В. Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 01.04.16 – физика атомного ядра и элементарных частиц (по физико-математическим наукам), а также критериям определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М. В. Ломоносова, а также оформлена согласно приложениям № 5, 6 Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова.

Таким образом, соискатель Бибиков Антон Валентинович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.16 – физика атомного ядра и элементарных частиц.

Официальный оппонент:

Доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Московский государственный университет имени
М. В. Ломоносова», Научно-исследовательский институт ядерной физики
имени Д. В. Скобельцына,

Подразделение: Отдел электромагнитных процессов и взаимодействия
атомных ядер

Грум-Гржимайло Алексей Николаевич



30.11.2018 дата

Контактные данные:

тел.: +7 (495) 939 47 76 e-mail: grum@sinp.msu.ru

Специальность, по которой официальным
оппонентом защищена диссертация

01.04.04 – физическая электроника

Адрес места работы:

119991, ГСП-1, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 2

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Московский государственный университет имени
М. В. Ломоносова», Научно-исследовательский институт ядерной физики
имени Д. В. Скобельцына

Подразделение: Отдел электромагнитных процессов и взаимодействия
атомных ядер

тел.: +7 (495) 939 47 76 e-mail: grum@sinp.msu.ru

Подпись А. Н. Грум-Гржимайло удостоверяю:

Секретарь Ученого совета НИИЯФ и ОЯФ,
к.ф.-м.н., н.с.



Е. А. Сигаева