

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

д.ф.-м.н. Маврина Бориса Николаевича
о соискателе Перминовой Марии Евгеньевне

Перминова М.Е. поступила в аспирантуру ИСАН в 2011 г. по специальности 01.04.05 – оптика после окончания Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ». Обучение в аспирантуре Перминова М.Е. проходила в Лаборатории спектроскопии конденсированных сред Отдела спектроскопии твердого тела.

За время обучения в аспирантуре Перминова М.Е. изучила теорию функционала плотности (DFT), существующие эффективные методы расчета в приближении DFT в базисе плоских волн, способы вычисления различных физических свойств, а также методы построения норму сохраняющих псевдопотенциалов с учетом не только валентных, но и остовных электронов. Она освоила программные пакеты ABINIT для вычисления структурных, упругих, фононных и электронных свойств кристаллов из первых принципов и ORJUM для построения псевдопотенциалов в приближении локальной и обобщенной градиентной электронной плотности. Расчеты проводились как на персональном компьютере, так и на суперкомпьютере Межведомственного вычислительного центра. Для пост-обработки результатов вычислений из первых принципов также использовались несколько дополнительных программ, составленных в Лаборатории.

Выбор темы исследований в данной диссертационной работе был обусловлен расхождением опубликованных результатов расчета по кристаллам халькогенидов цинка с экспериментом. Учитывая, что

атом цинка в данных кристаллах содержит сильно коррелированные электроны, диссертанту было предложено исследовать причину расхождения, так как в предыдущих вычислениях не учитывались многочастичные эффекты, не исследовалась роль остовных электронов и гибридизация орбиталей цинка и халькогенов. В результате получено, что учет остовных электронов важен для корректного описания фононных свойств, а для электронных свойств существенным является учет многочастичного взаимодействия электронов.

По теме диссертации Перминова М.Е. имеет три публикации в журналах, рекомендованных ВАК, и лично участвовала в трех российских научных конференциях. Все представленные результаты в диссертации являются новыми. Перминова М.Е. участвовала на всех этапах проведения расчетов и оформления результатов в виде статей.

Таким образом, Перминову М.Е. можно охарактеризовать как специалиста по применению метода функционала плотности для анализа и предсказания физических свойств кристаллов и заслуживающего присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

Д.ф.-м.н.

21 мая 2016 г.

Б.Н. Маврин

Подпись главного научного сотрудника Б.Н. Маврина заверяю:

Ученый секретарь Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт спектроскопии РАН (ИСАН)

К.ф.-м.н.



Е.Б. Перминов