

УТВЕРЖДАЮ

Директор федерального государственного бюджетного
учреждения науки Институт физики твердого тела
Российской академии наук



Левченко Александр Алексеевич

« 21 » октябрь 2019 г

ОТЗЫВ

ведущей организации «Институт физики твердого тела Российской академии наук
(ИФТТ РАН)» на диссертационную работу

Мухамедова Бобуржона Ориф угли

«Теоретическое моделирование влияния магнитных эффектов на физические свойства сплавов и соединений на основе железа», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния

Понимание и предсказание физических характеристик материалов и их взаимосвязь с кристаллической и электронной структурой и магнетизмом является основополагающей задачей теоретического материаловедения и модельных расчетов. Моделирование в рамках теории функционала плотности позволяет достаточно надежно предсказывать физические свойства новых синтезируемых соединений и сплавов что на настоящем этапе является весьма актуальным.

Магнитные свойства являются одними из важных характеристик материалов для нужд современной технологии современной микроэлектроники и спинтроники. Электронная и магнитная структура тесно связаны с, например, термодинамической стабильностью, составом и упорядоченностью фаз. Поэтому, при использовании теоретического моделирования для определения фазовой стабильности необходимо учитывать возможные магнитные структуры и принимать во внимание конкуренцию между кинетической и обменной энергиями электронов проводимости и образование спин-упорядоченного состояния.

Одной из технологически важных групп материалов, для теоретического описания которых необходим учет магнетизма, являются сплавы и соединения на основе железа. Эти сплавы и соединения обладает огромным спектром применений, таких как магнито-мягкие и магнито-твердые материалы, и структуры для современной спинтроники.

Целью диссертационной работы является использование теории функционала плотности для моделирования магнитных явлений, включающих композиционный и температурно-вызванный беспорядок для описания технологически важных материалов. Для достижения данной цели были поставлены следующие задачи:

1. В рамках теории функционала плотности исследовать механизм возникновения магнитного эффекта близости в периодических мультислоях Fe/Fe_{0.30}V_{0.70}.
2. Исследовать склонность к спиновальному распаду в тройной системе Fe-Cr-Co. Оценить вклад конечных температур на магнитное состояние ОЦК сплавов Fe-Cr-Co и их склонность к спиновальному распаду
3. На примере интерметаллидов Zr-Fe разработать методику эффективного поиска термодинамических свойств материалов от $T = 0$ К для термодинамических баз данных нового поколения.

В качестве объектов исследования в диссертационной работе были рассмотрены системы соединений на основе железа: а) тройная система Fe-Cr-Co, в которой исследуется склонность к спиновальному распаду; б) гетероструктуры Fe/Fe-V, для которых объясняется механизм возникновения магнитного эффекта близости; в) интерметаллиды в системе Fe-Zr.

Диссертационная работа состоит девяти глав.

Во введении обосновывается актуальность проводимых исследований, формулируются цель и задачи диссертационной работы.

Первая глава посвящена методам теоретического описания магнитных систем в металлах. Особое внимание уделяется моделированию магнитно-неупорядоченных структур.

Во второй главе приводится литературный обзор по исследуемым материалам.

В третьей представлены основные положения теории функционала плотности.

В четвертой главе описываются методы решения уравнений ТФП. Здесь автор рассматривает метод точных орбиталей в приближении твердых сфер (маффин-тин орбиталей) и метод псевдопотенциалов.

В пятой и шестой главах автор приводит подробное описание методов моделирования химического и магнитного беспорядка, соответственно.

В седьмой главе проводится анализ спинодального распада в тройной системе Fe-Cr-Co. Исследуется влияние химического состава твердых растворов Fe-Cr-Co на их термодинамическую склонность к расслоению. Также приводится оценка температуры Кюри сплавов Fe-Cr-Co. Были рассмотрены сплавы в ферромагнитном и парамагнитном состоянии. Согласно теоретическим результатам с увеличением содержания Cr и Co увеличивается локальная склонность к спинодальному распаду.

В восьмой главе исследуется магнитный эффект близости в гетероструктурах Fe/Fe₃₀V₇₀. Приводятся данные намагниченности, локальных магнитных моментов и переноса заряда. Механизм возникновения магнитного эффекта близости объясняется эффектами локального окружения, которые способствуют переносу заряда через границу раздела гетероструктуры. Теоретические результаты подтверждаются экспериментальными измерениями рассеяния поляризованных нейтронов. Полученные результаты исследования представляют интерес в области спинтроники.

В девятой главе проводится теоретическое и экспериментальное исследование физических свойств интерметаллидов ZrFe₂ и Zr₃Fe. Теоретические результаты включают в себя вычисления динамики решетки, энергии магнонов, теплоемкости, коэффициента температурного расширения и т.д. Теоретические результаты используются для описания теплоемкости при низких температурах от $T = 0$ К до температуры Дебая. Для высокотемпературной области используются экспериментальные измерения дифференциальной сканирующей калориметрии. Измерения теплоёмкости интерметаллидов ZrFe₂ и Zr₃Fe в широком интервале температур приводятся впервые. Автор делает вывод, что такая комбинация теории и эксперимента может существенно сократить время поиска основных термодинамических уравнений начиная от $T = 0$ К для термодинамических баз данных.

Несомненным достоинством диссертационной работы является всестороннее исследование свойств указанных соединений на основе модельных расчетов в рамках теории функционала плотности и сравнение результатов с экспериментальными измерениями. Большинство результатов согласуется с экспериментальными данными, что доказывает достоверность проведенных расчетов, что подтверждает достоверность модельных расчетов. Рассмотренные автором методы моделирования позволяют весьма эффективно и адекватно описывать свойства магнитных материалов. Применение приближения когерентного потенциала для моделирования химического беспорядка

сплавов существенно сокращает время проводимых вычислений. Не вызывает сомнения актуальность и значимость проводимых исследований.

Однако по диссертационной работе следует сделать следующие замечания:

1. При исследовании склонности к спиновальному распаду в системе Fe-Cr-Co автор использует энергию смещения сплавов, которая рассчитывается относительно чистых компонентов сплава. Стоит отметить, что в рамках такого подхода не учитывается энергетический барьер, возникающий из-за появления энергии упругой деформации решетки, которая в свою очередь вызвана концентрационным различием продуктов спиновального распада.
2. В работе приводится достаточно подробное теоретическое и экспериментальное исследование намагниченности и магнитного эффекта близости в гетероструктурах Fe/Fe₃₀V₇₀. Однако, автор не приводит объяснения выбора данного материала, например, на чем основывается выбор химического состава сплава Fe-V.
3. Модельные расчеты фононных спектров соединений Zr₃Fe и ZrFe₂ показали, что температура Дебая в этих соединениях существенно меньше температуры Кюри. Экспериментальные исследования демонстрируют основной вклад спиновых волн в теплоемкость C_P при температурах близких к температуре Кюри. Однако модельные расчеты были проведены до температуры Дебая, что не позволяет выделить вклад магнитной системы в теплоемкость.

Кроме того, в тексте диссертации имеются орфографические и стилистические погрешности, в некоторых случаях затрудняющие чтение работы. Сделанные замечания, в основном относятся к форме представления материала и не снижают общей положительной оценки работы. Результаты работы интересны и обладают достаточной актуальностью.

По итогам диссертационной работы можно сделать вывод, что цели и задачи представленного исследования полностью выполнены. Диссертация написана автором самостоятельно, содержит новые научные результаты. Содержание глав и разделов диссертации достаточно подробно раскрывает актуальность решаемых автором задач, методы их решения и полученные результаты.

Представленная работа соответствует специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния. Автореферат и опубликованные работы полностью и правильно отражают содержание диссертации. Представленные результаты докладывались на российских и международных конференциях. Диссертация

Мухамедова Б.О. «Теоретическое моделирование влияния магнитных эффектов на физические свойства сплавов и соединений на основе железа» соответствует требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней НИТУ «МИСиС», предъявляемым к кандидатским диссертациям. Диссертация является завершенной научно-квалификационной работой, имеет научную и практическую новизну и значимость, а ее автор, Мухамедов Бобуржон Ориф угли, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния

Диссертация была заслушана на семинаре «Физика дефектов» и отзыв ведущей организации утвержден на Ученом совете Института Физики Твердого Тела Российской академии наук 18 октября 2019 года, протокол № 22.

Отзыв составил
Ведущий научный сотрудник
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института физики твердого тела Российской академии наук
Ионов Андрей Михайлович

