

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Мухамедова Бобуржона Ориф угли «Теоретическое моделирование влияния магнитных эффектов на физические свойства сплавов и соединений на основе железа», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

В исследовании Мухамедова Б.О. магнитные эффекты в материалах на основе железа изучаются путем первопринципного моделирования. В работе решается ряд важных задач: исследуется магнитный эффект близости в гетероструктурах $\text{Fe}/\text{Fe}_{0.30}\text{V}_{0.70}$, проводится анализ склонности к спиноподальному распаду в твердых растворах Fe-Cr-Co , а также на примере соединений Fe_2Zr и FeZr_3 предлагается методика эффективного определения термодинамических свойств твердых тел. Моделирование в рамках теории функционала плотности проводилось с использованием метода точных маффин-тин орбиталей и метода проектированных присоединенных плоских волн. Стоит особо отметить две особенности работы, демонстрирующие ее высокий научный уровень. Во-первых, точность используемых приближений и моделей подробно анализируется на основе имеющихся экспериментальных данных. Во-вторых, первопринципные расчеты комбинируются с термодинамическим моделированием, что позволяет делать реалистичные предсказания свойств магнитных материалов при конечных температурах. В частности, в работе уделяется особое внимание моделированию химического и магнитного беспорядка в сплавах.

В результате исследования было показано, что в ОЦК твердых растворах Fe-C-Co локальная тенденция к спиноподальному распаду увеличивается с увеличением концентрации Cr и Co . Для гетероструктур $\text{Fe}/\text{Fe}_{0.30}\text{V}_{0.70}$ были определены профили намагниченности и диапазон магнитного эффекта близости. Показано, что эффект близости в этих гетероструктурах возникает вследствие переноса заряда через границу раздела. Для соединений Fe_2Zr и FeZr_3 были определены стандартные энтропии, температурные коэффициенты объемного расширения и теплоемкости в широком интервале температур.

В диссертации было получено достаточное количество новых данных, которые могут представлять теоретической и практической интерес для производства магнито-твердых и конструкционных сплавов и материалов спинтроники.

Результаты работы были опубликованы в ведущих зарубежных научных журналах (*Acta Mater.*, *Applied Physics Letters*, *J. Alloys Compd.* и *Intermetallics*) и апробированы на международных конференциях. Теоретические результаты находятся в хорошем согласии с доступными в литературе экспериментальными данными, что указывает на достоверность теоретических результатов и надежность разработанных методов моделирования магнитных материалов.

В качестве замечания отмечу, что при исследовании термодинамики сплавов Fe-Cr-Co автор не обсуждает влияние вклада фононов на предсказанные фазовые диаграммы. Однако при исследовании термодинамических свойств интерметаллидов

Fe-Zr эти вклады были учтены. Также, не обсуждаются возможные эффекты неколлинеарности спина на термодинамику сплавов.

Из содержания автореферата можно сказать, что диссертация представляет собой завершенное научное исследование. Диссертационная работа по актуальности темы, новизне и значимости результатов удовлетворяет всем требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в Национальном исследовательском технологическом университете "МИСиС", предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Мухамедов Бобуржон Ориф угли, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

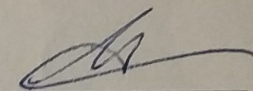
Старший преподаватель

Центр науки и технологии производства и преобразования энергии (Center for Energy Science and Technology, CEST)

Автономная некоммерческая образовательная организация высшего образования
«Сколковский институт науки и технологий»

Ph.D. (химическая физика)

старший преподаватель



Сергей Владимирович Левченко

Подпись заверяю

РУКОВОДИТЕЛЬ ОТДЕЛА
КАДРОВОГО АДМИНИСТРИРОВАНИЯ

