

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ЭКСПЕРТНОЙ КОМИССИИ

по защите диссертации **Мухамедова Бобуржона Ориф** угли «Теоретическое моделирование влияния магнитных эффектов на физические свойства сплавов и соединений на основе железа», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - «Физика конденсированного состояния» и состоявшейся в НИТУ «МИСиС» 17 декабря 2019 года.

Диссертация принята к защите Диссертационным советом НИТУ «МИСиС» 14.10.2019, протокол № 12.

Диссертация выполнена на кафедре теоретической физики и квантовых технологий и в лаборатории моделирования и разработки новых материалов НИТУ «МИСиС».

Научный руководитель – Абрикосов Игорь Анатольевич, д.ф.-м.н., профессор, ведущий эксперт лаборатории моделирования и разработки новых материалов, НИТУ «МИСиС».

Экспертная комиссия утверждена Диссертационным советом НИТУ «МИСиС» (протокол № 12 от 14.10.2019) в составе:

1. Мухин Сергей Иванович, профессор, д.ф.-м.н., заведующий кафедрой теоретической физики и квантовых технологий НИТУ «МИСиС» – председатель комиссии;
2. Векилов Юрий Хоренович, профессор, д.ф.-м.н., профессор кафедры теоретической физики и квантовых технологий НИТУ «МИСиС»;
3. Григорьев Павел Дмитриевич, д.ф.-м.н., старший научный сотрудник сектора электронных и оптических свойств твердых тел федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН;
4. Блантер Михаил Соломонович, профессор, д.ф.-м.н., профессор кафедры нанoeлектроники федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «МИРЭА - Российский технологический университет»;
5. Леонов Иван Васильевич, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник лаборатории оптики металлов федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН.

В качестве ведущей организации утверждено федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики твердого тела Российской академии наук, г. Черноголовка.

Экспертная комиссия отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– исследована надежность применения современных, основанных на теории функционала плотности, методов расчёта электронных и магнитных свойств с температурой, включая моделирование эффектов композиционного и магнитного беспорядка. В рамках данной работы использовался метод точных МТ-орбиталей ЕМТО и метод псевдопотенциала;

– показано, что локальная тенденция к спиноподальному распаду в ОЦК сплавах $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Co}_z$ усиливается с увеличением содержания Cr и Co. Данный результат наблюдается для ферромагнитных и парамагнитных сплавов;

– показано, что в гетероструктуре $\text{Fe}/\text{Fe}_{0.30}\text{V}_{0.70}$ магнитный эффект близости возникает за счет переноса заряда у границы раздела гетероструктуры;

– на примере интерметаллидов ZrFe_2 и Zr_3Fe предложена методика эффективного поиска термодинамических свойств материалов начиная от $T = 0$ К. Методика основана на объединении первопринципных расчетов с экспериментальными измерениями дифференциальной сканирующей калориметрии для получения зависимости теплоемкости в широком интервале температур.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

Из диссертационной работы следует, что применение приближения когерентного потенциала СРА для моделирования химического беспорядка позволяет адекватно предсказывать термодинамические свойства сплавов на основе железа. Вычисления электронной структуры сплавов в рамках метода ЕМТО-СРА требует значительно меньших вычислительных ресурсов, чем метод суперячеек. Важно отметить, что разработанные и опробованные в рамках данной диссертационной работы подходы могут быть использованы в дальнейшем для моделирования свойств широкого спектра материалов (магнитные сплавы, конструкционных стали для ядерной энергетики, материалы спинтроники).

Методика, реализованная в рамках теории функционала плотности в комбинации с экспериментальными измерениями теплоемкости, позволяет проводить эффективный поиск термодинамических свойств для материалов, включая магнитные материалы. Данная методика заключается в использовании теоретических данных в рамках квазигармонического приближения при низких температурах начиная от $T = 0$ К до температур Дебая, в то время как экспериментальные данные теплоемкости используются для высокотемпературных областей, начиная от температуры Дебая. Ценность данного

подхода заключается в существенном сокращении стоимости и времени поиска основных термодинамических свойств и уравнений для материалов в широком интервале температур, что представляет большой интерес для современных баз данных третьего поколения CALPHAD.

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

Исследования локальной тенденции к спинодальному распаду в ОЦК сплавах $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Co}_z$ могут представлять практический интерес для производства магнитотвердых сплавов Fe-Cr-Co, в которых высококоэрцитивное состояние достигается за счёт спинодального распада. Данные фазовой стабильности сплавов на основе Fe-Cr могут быть использованы в производстве конструкционных сталей для ядерной энергетики.

Определенный в работе профиль намагниченности в гетероструктуре $\text{Fe}/\text{Fe}_{0.30}\text{V}_{0.70}$ указывает, что диапазон магнитного эффекта близости составляет 3 Å. Теоретический профиль намагниченности хорошо согласуется с экспериментальными результатами, полученными измерением рассеяния поляризованных нейтронов. Учитывая возможность управления магнитным эффектом близости с помощью внешнего поля и тока, данные результаты представляют потенциальный интерес в спинтронике.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

По диссертационной работе автором опубликованы 4 работы в ведущих зарубежных журналах, индексируемых в наукометрических базах данных Web of Science и Scopus. Полученные результаты соотносились с данными доступных экспериментальных измерений, в том числе проводились экспериментальные измерения, в которых диссертант принимал непосредственное активное участие. Большинство теоретических результатов количественно и качественно согласуются с экспериментальными данными. Использование в расчетах программных пакетов, успешно примененных ранее, также указывает на достоверность теоретических результатов.

Личный вклад соискателя состоит в:

анализе литературных данных, выборе и применении теоретических подходов для решения поставленных задач, проведении компьютерных расчетов, анализе полученных результатов и подготовке научных публикаций в рецензируемых журналах. Помимо этого, автор также принимал участие в некоторых экспериментальных исследованиях интерметаллидов ZrFe_2 и Zr_3Fe .

Пункт 2.6 Положения о порядке присуждения степени кандидата наук в НИТУ «МИСиС» соискателем учёной степени не нарушен.

Диссертация Мухамедова Бобуржона Ориф угли соответствует критериям п. 2 Положения о порядке присуждения ученых степеней в НИТУ «МИСиС», так как в ней на основании выполненных автором исследований получена новая информация о термодинамических свойствах рассмотренных в работе материалов. Проведено исследование влияния эффектов магнитного упорядочения на физические свойства серии сплавов и соединений на основе железа. Показана надежность применения рассмотренных в работе первопринципных методов моделирования для предсказания физических свойств магнитных сплавов и соединений.

Экспертная комиссия приняла решение о возможности присуждения Мухамедову Бобуржону Ориф угли ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - «Физика конденсированного состояния».

При проведении тайного голосования экспертная комиссия в количестве 5 человек, участвовавших в заседании, из 5 человек, входящих в состав комиссии, проголосовала: за 5, против нет, недействительных бюллетеней нет.

Председатель Экспертной комиссии



С.И. Мухин

17.12.2019