

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Сыздыковой Айгерим «Первопринципное исследование систем с сильными эффектами решеточного ангармонизма», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния

В работе Сыздыковой А. методами современного первопринципного моделирования в рамках теории функционала электронной плотности исследуется динамика решетки нескольких технологически важных материалов с сильными эффектами ангармонизма: системы гидрида палладия с различной концентрацией водорода, магнитные фазы интерметаллического соединения FeRh и кристаллические  $\alpha$ - и  $\beta$ -фазы олова. На основе полученных в работе результатов исследуется фазовая и динамическая стабильность структур, а также рассчитываются термодинамические свойства.

Выбранное направление исследования (эффекты ангармонизма в твердых телах) и конкретные материалы, изученные в рамках данного направления, весьма интересны и являются важными как с точки зрения развития методологии, так и с точки зрения конкретных приложений. Эта важность отражена в том, что полученные результаты опубликованы в практически-ориентированном журнале Calphad в сотрудничестве с экспериментаторами.

В результате исследования системы Pd<sub>n</sub>H была показана сильная зависимость колебательных потенциалов гидридов палладия от концентрации водорода, а также обнаружен сильный ангармонизм и анизотропия колебаний водорода в подрешетке палладия. Показано, что при уменьшении концентрации водорода в системе Pd-H влияние ангармонизма уменьшается, а учет ангармонизма значительно улучшает описание динамики решетки данной системы.

При исследовании магнитных фаз соединения FeRh показано, что динамическая неустойчивость кубической B2 АФМ фазы FeRh исчезает при конечных температурах. Обнаружено, что динамика решетки обеих магнитных фаз сильно зависит от температуры, а также показана важная роль вклада колебательных степеней свободы в полное изменение энтропии при метамагнитном переходе в соединениях FeRh.

Для кристаллических фаз олова было показано, что LDA функционал лучше описывает свойства обеих фаз олова, а низкая скорость фазового  $\alpha \leftrightarrow \beta$  превращения объясняется очень большим энергетическим барьером между двумя фазами. Показано, что колебания атомов в  $\alpha$ -фазе почти гармоничны, а в  $\beta$ -фазе наблюдается сильный

ангармонизм, который приводит к динамической нестабильности данной фазы при расчете стандартными методами при  $T=0\text{K}$ , но учет нулевых колебаний стабилизирует  $\beta$ -фазу олова при  $T=0\text{K}$ . Для обеих фаз олова получены новые данные по теплоемкости в диапазоне температур от 0 до 300K.

В диссертации было получено достаточное количество новых данных, которые могут представлять теоретический и практический интерес для физики твердого тела. Результаты работы опубликованы в авторитетных научных журналах (журнал физика твердого тела, Calphad и Physical Review B) и апробированы на российских и международных научных конференциях.

В качестве замечания следует отметить следующее. Автор не обсуждает возможных эффектов конфигурационной энтропии в системе  $\text{Pd}_n\text{H}$  на ее термодинамику. Также утверждается, что приближение GGA "плохо описывает систему стехиометрического гидрида палладия", однако не приводится достаточных научных обоснований для такого утверждения. Наконец, при сравнении расчетных параметров решетки с экспериментальными данными не указывается, были ли учтены эффекты нулевых колебаний на параметры решетки.

Несмотря на эти недочеты, из содержания автореферата можно заключить, что диссертация представляет собой завершенное научное исследование. Диссертационная работа «Первопринципное исследование систем с сильными эффектами решеточного ангармонизма» по актуальности темы, новизне и значимости результатов соответствует всем требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней НИТУ «МИСиС», предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор, Сызыдкова Айгерим, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — «Физика конденсированного состояния».

Старший преподаватель,  
центра науки и технологии производства и преобразования энергии автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковский институт науки и технологий»

PhD (химическая физика),

Старший преподаватель

20 марта 2020 г.



Сергей Владимирович Левченко

Подпись Левченко Сергея Владимировича заверяю

Руководитель отдела  
кадрового администрирования

