

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»

Диссертационная работа Сыздыковой А. посвящена теоретическому исследованию ангармонизма колебаний решетки и его влияния на свойства материалов, в частности термодинамические. В качестве примера были рассмотрены системы: гидрида палладия с различной концентрацией водорода, магнитные фазы интерметаллического соединения FeRh и кристаллические α - и β - фазы олова. Этот вопрос является актуальным и представляет фундаментальный интерес, поскольку отклонение колебаний атомов от гармонического закона часто существенно влияет на свойства материалов при конечных температурах. Рассматриваемые материалы либо активно применяются в технологии (как олово), либо являются перспективными материалами, как гидриды.

Автореферат состоит из общего введения, краткого описания пяти глав диссертации, выводов по поставленным задачам и литературного обзора.

Для гидридов палладия H_xPd , ($x = 1, 4, 32$) обнаружен сильный ангармонизм потенциала водорода в октапоре при больших смещениях, который увеличивается с повышением концентрации водорода. При этом для относительно небольших смещений (менее 5% от постоянной решётки), потенциал достаточно хорошо описывается гармоническим приближением. Показано, что учёт более реалистичных смещений атомов при конечной температуре (методом TDEP) даёт более корректные частоты колебаний водорода, чем метод малых смещений. Однако по закону дисперсии выделить какую-то одну колебательную частоту затруднительно. Для этой цели скорее следовало бы использовать плотность колебательных состояний.

Обнаружено, что антиферромагнитная фаза FeRh динамически стабилизируется при конечной температуре. Показано, что колебательная энтропия, с учётом перенормировки фононного спектра при конечной температуре за счёт ангармонизма, может объяснять наблюдаемый фазовый переход.

Для α и β – олова представлены расчёты теплоёмкости, хорошо согласующиеся с экспериментальными данными и дополняющие их. Высказано предположение о том, что β фаза в рассматриваемом приближении стабилизируется за счёт нулевых колебаний. В

качестве замечания стоит отметить, что хотя в автореферате упомянут учёт нулевых колебаний, в тексте отсутствует описание методики данных расчётов. Метод температурно-зависимого эффективного потенциала основан на методе молекулярной динамики, которая является классической.

В целом поставленные задачи решены автором успешно. Полученные результаты являются новыми и опубликованы в реферируемых журналах, входящих в список ВАК, SCOPUS и WoS, а также были доложены на российских и международных конференциях. Основные выводы диссертации достаточно обоснованы и подтверждены сравнением с опубликованными теоретическими и экспериментальными данными. Работа удовлетворяет всем критериям новизны, достоверности и практической значимости.

Из содержания автореферата можно заключить, что диссертационная работа «Первопринципное исследование систем с сильными эффектами решеточного ангармонизма» 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».

ведущий научный сотрудник ФГУП
ВНИИА им. Н.Л. Духова, к.ф.-м.н.


М.П.

/ Коротаев Павел Юрьевич
«20» марта 2020

Подпись Коротаева П.Ю. заверяю
Учёный секретарь НТС ФГУП ВНИИА
им. Н.Л. Духова





/ Феоктистова Л.В.