

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ЭКСПЕРТНОЙ КОМИССИИ

по защите диссертации **Сыздыковой Айгерим** на тему «Первопринципное исследование систем с сильными эффектами решеточного ангармонизма», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния», и состоявшейся в НИТУ «МИСиС» 06 октября 2020 года.

Диссертация принята к защите Диссертационным советом НИТУ «МИСиС» 10.02.2020 г. (протокол №15) с изменениями от 13.04.2020г. (протокол №17) и 10.06.2020г. (протокол №19).

Диссертация выполнена на кафедре теоретической физики и квантовых технологий НИТУ «МИСиС». Научный руководитель – кандидат физико-математических наук Смирнова Екатерина Александровна, занимает должность доцента на кафедре теоретической физики и квантовых технологий НИТУ «МИСиС», является ведущим научным сотрудником лаборатории моделирования и разработки новых материалов НИТУ «МИСиС».

Экспертная комиссия утверждена Диссертационным советом НИТУ «МИСиС» 10.02.2020г. (протокол №15) с изменениями от 13.04.2020г. (протокол №17) и 10.06.2020г. (протокол №19) в составе:

1) Ховайло Владимир Васильевич – доцент, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник кафедры функциональных наносистем и высокотемпературных материалов НИТУ «МИСиС» – председатель комиссии;

2) Красильников Олег Михайлович – доцент, д.ф.-м.н., старший научный сотрудник кафедры теоретической физики и квантовых технологий НИТУ «МИСиС»;

3) Капуткина Наталия Ефимовна – доцент, д.ф.-м.н., профессор кафедры физической химии НИТУ «МИСиС»;

4) Блантер Михаил Соломонович – д.ф.-м.н., профессор кафедры нанoeлектроники федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «МИРЭА - Российский технологический университет»;

5) Разумовский Игорь Михайлович – д.ф.-м.н., главный научный сотрудник отделения металлических материалов и металлургических технологий акционерного общества «Композит».

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:

– обнаружены сильный ангармонизм и анизотропия колебаний водорода в гидриде палладия, а также сильная зависимость частот колебаний водородной подрешетки от концентрации водорода;

– показано, что при уменьшении концентрации водорода в системе Pd-H влияние ангармонизма уменьшается. Учет ангармонизма значительно улучшает описание динамики решетки;

– выявлено, что при конечных температурах динамическая нестабильность антиферромагнитной (АФМ) кубической фазы FeRh исчезает. Динамика решетки магнитных фаз FeRh сильно зависит от температуры и вклад ангармонизма в фазах различен;

– обнаружено, что вклад колебательных степеней свободы в полное изменение энтропии при метамагнитном переходе в FeRh является доминирующим;

– показано, что низкая скорость фазового $\alpha \leftrightarrow \beta$ превращения в олове объясняется очень большим энергетическим барьером между фазами. Динамика решетки α -фазы хорошо описывается в гармоническом приближении, в то же время использование гармонического приближения в β -фазе приводит к динамической нестабильности структуры при $T = 0$ К;

– показано, что учет нулевых колебаний стабилизирует колебательный спектр β -олова при $T = 0$ К.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

В диссертационной работе получены новые данные, позволяющие углубить понимание физических свойств исследуемых материалов, имеющих практическую значимость. Результаты работы вносят вклад в фундаментальное понимание свойств систем с сильным эффектом решеточного ангармонизма. В работе успешно применен новый метод температурно-зависимого эффективного потенциала для учета ангармонических эффектов. В диссертационной работе впервые получен полный фононный спектр стехиометрического гидрида палладия как при $T = 0$ К, так и при конечных температурах. Решена задача по оценке колебательного вклада в энтропию при фазовом переходе в соединении FeRh. Данная работа устраняет противоречие между экспериментальными и известными теоретическими данными о динамической неустойчивости кубической B2 АФМ фазы FeRh. Впервые смоделирован $\alpha \leftrightarrow \beta$ фазовый переход в кристаллическом олове. Получена величина энергетического барьера между фазами, которая объясняет низкую скорость фазового превращения.

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

- полученный в работе полный фононный спектр стехиометрического гидрида палладия при конечной температуре позволяет получить основные термодинамические параметры системы, что может представлять интерес для использования данного соединения в водородной энергетике;

- результаты диссертационной работы дополняют недостающие термодинамические данные по теплоемкости и значения стандартной энтропии для обеих фаз олова в широком диапазоне температур. Эти данные представляют большой интерес для современных баз данных CALPHAD третьего поколения.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

Все расчеты проводились с использованием современных методов и программных пакетов, которые весьма успешно и широко применяются в области первопринципных исследований и являются общепризнанными. Результаты расчетов, выполненных в рамках теории функционала электронной плотности, подробным образом сравнивались с результатами экспериментальных работ и теоретических работ других авторов. Большинство теоретических результатов количественно и качественно совпадают с экспериментальными данными

Личный вклад соискателя состоит в:

анализе литературных данных, выборе и применении методов для решения поставленных задач, проведении компьютерных расчетов, анализе полученных результатов и подготовке научных публикаций в рецензируемых журналах.

Материалы диссертации Сыздыковой А. опубликованы в 9 работах, из них 2 – в изданиях, входящих в перечень ВАК РФ и базы Web of Science/ Scopus.

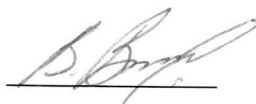
Пункт 2.6 Положения присуждения ученой степени кандидата наук, ученой степени доктора наук НИТУ «МИСиС» соискателем ученой степени не нарушен.

Диссертация Сыздыковой Айгерим соответствует критериям п. 2 Положения о порядке присуждения ученых степеней в НИТУ «МИСиС», так как в ней на основании выполненных автором исследований получены новые достоверные данные, позволяющие получить различные термодинамические свойства рассмотренных в работе материалов с сильным решеточным ангармонизмом.

Экспертная комиссия приняла решение о возможности присуждения Сыздыковой Айгерим 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 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель Экспертной комиссии



Ховайло В.В.