

Отзыв официального оппонента на диссертацию «Поиск новых соединений, изучение их стабильности и свойств с использованием современных методов компьютерного дизайна материалов», представленную Кругловым Иваном Александровичем на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния.

Диссертация посвящена поиску новых соединений, построению их фазовых диаграмм, изучению кристаллической структуры и свойств новых фаз, а также развитию новых методов, которые позволяют расширить возможности применяемых квантово-механических моделей. Данная работа является актуальной в современной физике твердого тела. В первой части работы представляются различные методы для расчета структуры материалы, зная лишь его химическую формулу. Подробно описаны принцип работы и основные особенности метода, который использовался автором – эволюционного алгоритма USPEX. Также в работе обосновывается использование межатомных потенциалов на основе машинного обучения, которые способны показывать скорость работы, сравнимую с классическими потенциалами, и точность, сравнимую с квантово-механическими моделями.

В диссертационной работе автор изучал возможность образования сверхпроводящих гидридов различных элементов под давлением. В последнее время эта область исследования привлекает все больший интерес в связи с открытием сверхпроводимости в H_3S , а также в LaH_{10} , с температурой перехода в сверхпроводящее состояние близкой к комнатной. В данной работе представлен метод, который позволяет с помощью алгоритма USPEX строить фазовые диаграммы в координатах состав-давление для различных бинарных систем, в том числе и сверхпроводящих гидридов. Так, автором была построена фазовая диаграмма для гидридов серы, которая отражает области стабильности различных фаз при давлениях от 0 до 200 ГПа. Также были обнаружены две новые фазы HS_2 и H_3S_2 , которые по энергии оказались стабильнее, чем ранее известные. Помимо гидридов серы, также исследовались гидриды железа и урана. Гидриды железа представляют интерес в связи с недавней экспериментальной работой, в которой было показано образование FeH_5 под давлением. Автором работы, помимо ранее

известных полигидридов железа, были обнаружены промежуточные фазы Fe_3H_5 , Fe_3H_8 и другие, а также новая фаза FeH_6 , которая оказалась стабильна в широком диапазоне давлений. Совпадение экспериментальных и теоретически рассчитанных уравнений состояния для гидридов железа FeH_{2-5} показывают высокую достоверность расчетных данных. В системе U-H были обнаружено семейство полигидридов урана UH_{5-9} , которые становятся стабильными при давлениях от 6 ГПа. Данные материалы имеют простую подрешетку урана (ГЦК или ГПУ) и подструктуры из водородов, образованные из H_8 -кластеров. В работе подробно описывается кристаллическая структура, динамическая стабильность, электронные и сверхпроводящие свойства ряда полигидридов урана. Отличительной чертой является то, что теоретические расчеты этих структур были подтверждены экспериментами в алмазных наковальнях. Так, были синтезированы гидриды урана $\text{UH}_{5,7,8}$, что подтверждает высокий уровень проделанной автором работы. Далее представлена работа, в которой вначале был проведен эксперимент, а затем – теоретическое обоснование полученных результатов: таким образом была описана фаза высокого давления сульфида бора. Рассчитанная с помощью USPEX кристаллическая структура отлично описывает дифракционные пики новой фазы, и также наблюдается хорошее согласие между уравнениями состояния.

В последней части обсуждается возможность использования межатомных потенциалов на основе алгоритмов машинного обучения для проведения молекулярно-динамических расчетов для решения широкого спектра задач. Автором был разработан новый такой потенциал, основанный на описании межатомных взаимодействий с помощью экспоненциальных функций, где в качестве алгоритма обучения использовалась линейная регрессия. С помощью разработанного потенциала была рассчитана плотность фононных состояний, энтропия, функция радиального распределения и, как итог, температура плавления для алюминия. Сравнение рассчитанных и экспериментальных значений показало высокую точность межатомного потенциала. В следующей части с его помощью была построена фазовая диаграмма урана до 800 ГПа и 15000 К. Для этого был построен целый класс потенциалов со средней ошибкой предсказания энергии не выше 10 мэВ/атом, что позволило с высокой точностью рассчитывать свободную энергию путем термодинамического интегрирования.

Научная новизна работы заключается в том, что впервые удалось обнаружить новые соединения, описать их структуру и свойства и построить фазовые диаграммы для гидридов серы, железа и урана. Более того, экспериментально было подтверждено существование предсказанных гидридов UH_5 , UH_7 и UH_8 . Также, впервые была обнаружена новая фаза высокого давления сульфида бора, которая отлично описывает экспериментальные данные. С помощью разработанного межатомного потенциала были также рассчитаны термодинамические свойства алюминия и впервые построена P-T фазовая диаграмма урана до 800 ГПа и 15000 К.

Представленная диссертационная работа является полностью законченной, ее достоверность подтверждается совпадением теоретически полученных и экспериментальных данных, а также публикациями в журналах, рецензируемых в системах Web of Science и Scopus (Journal of Applied Physics, Physical Review B Rapid Communications, Science Advances и др.) и большим числом докладов на российских и международных конференциях. Несмотря на высокий уровень представленной работы, отмечу некоторые замечания:

1. Цель работы: «Предсказать кристаллическую структуру и исследовать физические свойства новых материалов под давлением с использованием эволюционного алгоритма USPEX. Разработать методы построения P-T фазовых диаграмм с помощью потенциалов межатомного взаимодействия на основе алгоритмов машинного обучения» выглядит несколько глобально, поэтому желательно было бы сразу ограничиться в ней конкретными выполненными задачами диссертации, что и приводится автором в последующем абзаце.

2. Интересен результат предсказания сверхпроводимости гидридов железа FeH_5 и FeH_6 с T_c около 45 К, но автору желательно было бы указать, как такой эффект может быть обнаружен реально. Также это относится к предсказанию сверхпроводимости в полигидридах урана.

3. Фраза «Разнообразие в электронных свойствах в фазах сульфида бора может позволить использовать данный материал в различных областях электроники» не подкреплена примерами.

Указанные выше замечания не влияют на общий характер работы. В диссертационной работе виден личный вклад автора, и, судя по тексту и опубликованным статьям, автор проделал большую работу. Актуальность, выносимые на защиту положения, научная новизна, обоснованность и достоверность выводов не вызывают сомнений. Автореферат в достаточной мере отражает содержание работы автора.

Несмотря на замечания, диссертационная работа Круглова Ивана Александровича «Поиск новых соединений, изучение их стабильности и свойств с использованием современных методов компьютерного дизайна материалов» удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, установленных «Положением о порядке присуждения научных степеней», утвержденным постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 года № 842 с дополнениями от 21 апреля 2016 года № 335, а ее автор – Круглов Иван Александрович – заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент:

доктор физико-математических наук, профессор

ГЛАВНЫЙ НАУЧНЫЙ СОТРУДНИК, отдел новых методов биохимической физики

«Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук»

Чернозатонский Леонид Александрович

23.10.2018



Сведения о составителе отзыва:

тел.: 8(495)9397172, e-mail: cherno@sky.chph.ras.ru

Специальность, по которой официальным оппонентом защищена
диссертация:

01.04.06 – акустика

Адрес места работы:

119334, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4, ИБХФ РАН

Тел.: 8(495)9397172; e-mail: cherno@sky.chph.ras.ru

Подпись сотрудника Л.А. Чернозатонского

удостоверяю:

ученый секретарь ИБХФ РАН



к.б.н. С.И. Скалацкая