

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертацию Курбониёна Мехрдода Субхони на тему «**Исследование спиновых эффектов в магнитных материалах с помощью комбинированных подходов теории функционала плотности и полевых моделей**», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Актуальность диссертации. Исследование магнитных материалов и изучение их спиновой динамики представляет собой актуальную проблему в области физики конденсированного состояния с многочисленными приложениями в современной фундаментальной и прикладной науке от квантовой физики до нанoeлектроники.

Квантово-механические вычисления в рамках теории функционала плотности (ТФП) представляют собой адекватный инструментарий для исследования широкого круга квантово-физических эффектов, расчета спектров атомов и молекул в конденсированных средах, атомных параметров силовых полей, полной и электронной энергии квантовой системы, зарядовой плотности, спин-поляризованных связей и др. Однако компьютерное моделирование магнитных свойств ферромагнетиков в рамках ТФП с учётом спин-поляризованной и спин-орбитальной связей требует подходящей модификации вариационного функционала и адаптации программного обеспечения.

Изучение спиновой динамики в рамках полевых моделей с помощью солитонных локализованных решений динамических нелинейных уравнений дают дополнительную возможность получить информацию о динамике магнитной системы в целом, включая прохождение нейтронов через магнитные материалы, их взаимодействие с атомами, сопровождаемые несколькими типами элементарных процессов, важнейшим из которых является так называемое неупругое магнитное рассеяние нейтронов. Определение динамических факторов сечений процессов неупругого рассеяния медленных нейтронов: динамический структурный фактор, интегральная интенсивность и др., с помощью солитонных решений служит основой для интерпретации и планирования современных экспериментов, и получения информации о магнитных локализованных (солитонных) коллективных возбуждениях в многочастичной квантовой системе. Важной задачей описания солитонных мод изучаемых в диссертации ферромагнетиков требуется построение подходящих динамических нелинейных уравнений, имеющих точные решения.

Представленное в диссертации развитие и применение комбинации этих двух взаимодополнительных подходов к всестороннему исследованию структурных и магнитных свойств ферромагнетиков Rb_2NiF_4 и $CsNiF_3$ с помощью подходящим образом сформулированных математических моделей и компьютерного моделирования их спиновой динамики и процессов неупругого рассеяния нейтронов на частицеподобных

солитонных волнах, возникающих и распространяющихся в многочастичной квантовой системе, является новым и актуальным направлением в физике конденсированного состояния и современной спинтронике.

Текст диссертации изложен на 94 листах машинописного текста и состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы.

В первой главе рассмотрены актуальность темы исследования, степень разработанности темы исследования, цели и задачи, обоснование научной новизны задачи, теоретическая и практическая значимость работы, методология и методы исследования, положения, выносимые на защиту, степень достоверности и апробация результатов. Дан аналитический обзор состояния исследований по уравнениям спиновой динамики в магнитных материалах и методам исследования квантовых свойств магнитных систем. Рассмотрены основные полевые модели физики конденсированного состояния и соответствующие нелинейные дифференциальные, интегральные и интегродифференциальные уравнения, применяемые для изучения распространения нелинейных магнитных локализованных волн и солитонных возбуждений. Представлены обзор исследований спиновых эффектов в магнитных материалах с помощью компьютерного моделирования в рамках ТФП и необходимая информация о схемах расчёта требуемых параметров магнитных материалов с помощью современных пакетов программ Abinit и Wien2k. На основании приведенного анализа обосновываются перспективы применения ТФП, выбор объектов исследования, сформулированы цели и задачи диссертации.

Вторая глава посвящена исследованию динамических факторов солитонных мод в ферромагнетиках Rb_2NiF_4 и $CsNiF_3$. С помощью солитонного решения нелинейного уравнения Шредингера в квазиодномерном изотропном гейзенберговском ферромагнетике и односолитонного решения динамического уравнения для одномерных ферромагнетиков Гейзенберга с анизотропией типа «легкая ось» вычислены энергия солитонной волны, динамический структурный фактор и интегральная интенсивность неупругого рассеяния медленных нейтронов на Rb_2NiF_4 и $CsNiF_3$, соответственно. Установлено, что при росте температуры солитоны теряют свои частицеподобные свойства. При фиксированном значении волнового вектора (transfer of momentum) с ростом температуры ширина центрального пика возрастает и постепенно стремится к прямой линии. Из формы динамических структурных факторов Rb_2NiF_4 и $CsNiF_3$ следует, что солитонные моды в этих ферромагнетиках приводят к перераспределению интенсивности из максимального пика в квазиупругую часть спектра, что и наблюдается в экспериментах по рассеянию нейтронов при малых значениях переданного импульса.

В третьей главе в рамках теории функционала плотности исследована спиновая динамика вышеупомянутых ферромагнетиков. Здесь в рамках ТФП полностью реализован метод вычисления спина для магнитных систем Rb_2NiF_4 (пространственная группа I

4/mmm; идентификационный номер 139) и CsNiF_3 (пространственная группа $P 63/mmc$ и номер 194), выполнены расчеты по оценке орбитального и магнитного моментов спина атома в заданных ферромагнитных цепочках, исследованы наиболее важные физические свойства и определены энергетические и кристаллические параметры. Следует отметить, что диссертантом впервые в рамках ТФП проведено компьютерное моделирование с учётом спин-поляризованной и спин-орбитальной связей в двух типах одномерных ферромагнетиков Rb_2NiF_4 и CsNiF_3 , исследованы их энергетические, динамические и структурные свойства. На основании данных компьютерного моделирования проанализирован вклад энергетических уровней отдельных атомов в полную плотность состояний в элементарных ячейках, оценены распределения плотности заряда электронов в ферромагнетиках Rb_2NiF_4 и CsNiF_3 . Даны оценки плотности намагничивания, обменного взаимодействия между ориентациями спинов в гамильтониане модели ферромагнетика Гейзенберга, определены все виды энергий, полный и орбитальный магнитные моменты, энергия полного магнитного момента всех атомов в ферромагнетиках Rb_2NiF_4 и CsNiF_3 . Для атома Ni в этих системах (Rb_2NiF_4 и CsNiF_3) достигнуто согласие теоретических и экспериментальных значений спинового и полного момента.

Теоретическая значимость и новизна диссертации состоит в том, что диссертантом решена актуальная научно-исследовательская задача: исследование спиновых эффектов в магнитных материалах с помощью комбинированных подходов теории функционала плотности и полевых моделей физики конденсированного состояния. Впервые в рамках ТФП проведено компьютерное моделирование с учётом спин-поляризованной и спин-орбитальной связей в двух типах одномерных ферромагнетиков Rb_2NiF_4 и CsNiF_3 , исследованы их энергетические, динамические и структурные свойства

Практическая значимость диссертационной работы определяется полученными диссертантом результатами по спиновой динамике изученных ферромагнетиков Rb_2NiF_4 и CsNiF_3 , необходимыми для планирования и интерпретации экспериментов по рассеянию нейтронов. Полученные результаты и разработанная технология компьютерного моделирования в рамках ТФП представляет собой базу данных и удобный инструментарий математического моделирования в структурных исследованиях материалов рентгеноструктурными методами анализа и в анализе энергетических околопороговых тонких структур методами рентгеновского поглощения. Вычисленная плотность состояния элементарных ячеек ферромагнетиков дает основу для дальнейшего изучения квантовых свойств этих систем.

Замечания по диссертационной работе:

1. Текст диссертации не лишен незначительных стилистических помарок, например, на стр. 31, на стр. 64, (3.2.2) вместо (3.1.2), на стр. 89 ссылка 71. Н., Pickett W.E. вместо Н. Eschrig and W. E. Pickett, и др.

2. В рамках ТФП в диссертационной работе для вычисления энергетических параметров, таких как общая плотность состояния, энергетические зоны и др., использовалось только приближение локальной спиновой плотности (LSDA). Было бы полезно привести сравнительный анализ результатов, полученных и с другими приближениями, например, с использованием модифицированного обменного потенциала Беке–Джонсона (mBJ) [F.Tran and P.Blaha, Phys.Rev.Lett.102, 226401(2009)], который применяется для расчета энергетических запрещенных зон различных типов полупроводников.

Данные замечания следует рассматривать как пожелание для последующих исследований диссертанта, и они не влияют на общую высокую оценку диссертации.

Диссертантом по материалам диссертации опубликовано 10 работ, 7 из которых в журналах из Перечня периодических научных журналов, рекомендуемых ВАК РФ. Полученные диссертантом результаты, представленные в публикациях, являются определяющими. Автореферат и публикации полностью отражают содержание диссертации. Диссертация хорошо структурирована и написана доступным языком.

Диссертация «Исследование спиновых эффектов в магнитных материалах с помощью комбинированных подходов теории функционала плотности и полевых моделей» представляет собой законченную квалификационную работу, полностью соответствующую требованиям п. 9-14, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук «Положением о присуждении учёных степеней», утвержденным Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013, а ее автор Курбониён Мехрод Сабхони несомненно заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент:

Ведущий научный сотрудник

Лаборатории теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова

Объединенного института ядерных исследований,

доктор физико-математических наук, профессор

e-mail: vinitsky@theor.jinr.ru; тел.: +7 49621 63348



Виницкий С.И.

Подпись Виноцкого Сергея Ильича заверяю

Заместитель директора

Лаборатории теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова

Объединенного института ядерных исследований,

доктор физико-математических наук, профессор

Лаборатория теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова, ОИЯИ,

ул. Жолио-Кюри 6, г. Дубна, Московская обл., Россия, 141980

e-mail: bltp@theor.jinr.ru; тел.: +7 49621 63695



Антоненко Н.В.