



Федеральное агентство научных организаций (ФАНО России)
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт биоорганической химии
им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН
Российской академии наук

Отзыв официального оппонента на диссертационную работу *Курбониёна Мехрдода Субхони*

«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.

Представленная к защите работа посвящена квантово-механическому моделированию спиновых и магнитных свойств ферромагнитных кристаллических материалов — на примере квазиодномерных ферромагнетиков Rb_2NiF_4 и $CsNiF_3$. Главный метод вычислений — теория функционала плотности (ТФП) и полевые модели физики конденсированного состояния. Основные определяемые параметры — орбитальный и спиновый магнитный моменты, а также энергетические и кристаллические параметры — хорошо согласуются с экспериментальными данными, что показывает зрелость этой сферы физики твердого тела и уровень владения диссертанта предметом. Полученные результаты и разработанные подходы могут найти приложение в моделировании широкого класса магнитных материалов и в спинтронике.

Наиболее интересные полученные результаты заключаются в следующем: 1) для упомянутых ферромагнетиков промоделированы спин-поляризованные и спин-орбитальные связи, что позволило изучить их энергетические и структурно-динамические свойства; 2) Оценена суммарная плотность состояний в кристаллах и вклад энергетических уровней отдельных атомов в общую картину; 3) Для всех атомов элементарных кристаллических ячеек изученных ферромагнетиков рассчитаны все виды энергий, полный и орбитальный магнитные моменты; 4) Спиновая динамика этих ферромагнетиков описана на языке солитонов, для которых определены ширина и энергия, а также зависимость от температуры и других параметров.

Результаты работы Курбониёна Мехрдода опубликованы в 10 печатных работах, среди которых, к сожалению, нет ни одного международного профильного физического журнала с заметным импакт-фактором, однако все требования, связанные с публикациями, соблюдены. Следует также отметить активное участие диссертанта в международных конференциях и коллаборациях, что делает положительный вклад в его профессиональный уровень.

Автором поставлены и последовательно решены следующие задачи:

1. количественная оценка всех энергетических параметров в элементарных кристаллических ячейках исследованных ферромагнетиков с обменными взаимодействиями между ориентациями спинов;
2. для этих же веществ расчет плотности намагничивания, верхнего и нижнего магнитного момента спинов, а также полного и орбитального магнитных моментов;
3. определение общей плотности состояний и вкладов отдельных атомов, а также плотности заряда электронов;
4. исследование спиновой динамики и вычисление динамических факторов с помощью солитонных решений;
5. исследование энергетических и динамических характеристик взаимодействия с нейтронами.

Актуальность исследования

ТФП является одним из основных подходов в теоретической физике твердого тела, и эта работа показывает всю мощь этого подхода для моделирования достаточно тонких и трудно исследуемых на практике явлений в ферромагнитных кристаллах. Результаты этого исследования могут применяться при экспериментальном изучении различных материалов (например, рентгеновским или нейтронным рассеянием), а также, по-видимому, в спинтронике и других разделах квантовой электроники.

Структура и содержание диссертации

Диссертационная работа состоит из введения, трёх глав, выводов и списка литературы. Объём диссертации составляет 94 страницы.

- В первой главе проводится обзор исследований нелинейных возмущений в ферромагнетиках. Показано, что для исследования поведения солитонных волн в магнитной цепочке важнейшими характеристиками являются динамические факторы. Передаваемый импульс при рассеянии нейтронов от ферромагнетика дает

информацию о спектре нелинейных локализованных возбуждений. Проводится обзор исследований солитоноподобных волн в ферромагнитной цепочке и нанопроволоке. Показано применение квантово-механического моделирования для решения задач физики конденсированного состояния (поиск магнитных параметров) в рамках ТФП.

- Во второй главе с помощью двух типов солитонных решений проведено исследование динамических факторов ферромагнетиков Rb_2NiF_4 и $CsNiF_3$. Одна из основных задач в теории столкновений нейтронов с солитонами в ферромагнетиках сводится к вычислению динамических факторов. В зависимости от передаваемых энергии и импульса вычисляли энергию солитона, динамический структурный фактор (ДСФ) и интегральную интенсивность при разных температурах. Солитонные моды приводят к перераспределению интенсивности из максимального пика в квазиупругую часть спектра ДСФ. Появление центрального пика ДСФ происходит при низких энергиях и небольших скоростях. Температурное расширение ДСФ говорит о том, что с ростом температуры солитоны постепенно теряют свои частицеподобные свойства.
- В третьей главе в рамках ТФП с учётом спин-поляризованной и спин-орбитальной связей приведено исследование магнитных, энергетических и кристаллических свойств упомянутых ферромагнетиков. В рамках ТФП количественная оценка функции плотности электронов и плотности намагничивания дают возможность определить ряд магнитных и динамических параметров, таких как магнитный момент спина, магнитный орбитальный момент, плотность состояний, распределение энергетических зон и т.д., которые вносят вклад в механизм возникновения магнетизма, нелинейные локализованные возбуждения, а также другие виды магнитных явлений. Вычислены верхний и нижний магнитные моменты спинов всех атомов в ферромагнитных цепочках Rb_2NiF_4 и $CsNiF_3$. Орбитальный магнитный момент всех электронов для атома Ni в обоих ферромагнетиках отлично согласуется с экспериментальными результатами. Также промоделированы энергетические свойства, такие как распределение плотности электронных состояний отдельных атомов и энергетических зон ферромагнетиков. Показан вклад в образование энергетической зоны атомов всех сортов: F (s-состояний), Ni (d- и s-состояний), Rb (s-, f- и небольшой примеси d-состояний) и Cs (p- и d- состояний). Факт образования ионной связи $Ni-F$ отражает отсутствие значительной плотности s-состояний Ni в образующихся энергетических зонах. В отличие от Rb_2NiF_4 ,

уровень Ферми $CsNiF_3$ располагается вблизи потолка зоны, что говорит о менее ярко выраженных металлических свойствах $CsNiF_3$. Результаты квантово-механического моделирования могут быть использованы при рентгеноструктурных исследованиях материалов.

Автореферат диссертации практически точно отражает содержание работы. И в автореферате, и в диссертации сравнительно небольшое количество орфографических и пунктуационных ошибок.

Замечания по работе

К работе есть ряд замечаний:

1. Автор выполнил большое количество компьютерных расчётов для вычисления энергетических параметров ферромагнетиков Rb_2NiF_4 и $CsNiF_3$ в рамках ТФП и с помощью метода полного потенциала линейной присоединённой плоской волны (FP-LAPW). Из них можно было бы извлечь гораздо больше информации, чем представлено в работе. Например, диаграммы на рис. 3.6 и 3.13 для энергетических зон ферромагнетиков могли бы позволить проанализировать и другие параметры, такие как фононный спектр и др.
2. В ряде случаев что в диссертации, что в ее автореферате не помешал бы более осмысленный подход к данным. Например, в большом количестве подряд идущих картинок представлены результаты одного и того же расчета, но при разных температурах или других параметрах. Такого рода данные лучше всего было бы объединить в серии, позволяющие проследить указанные зависимости. Или, например, в таблице 3.5 девять колонок дублируется. Данные стоило бы записать более компактно.
3. В автореферате в районе Таблицы 1 перепутаны значения V и E_{\min} в самой таблице и в тексте, но где именно правильно — я не понял.
4. В некоторых случаях в работе появляются значения энергии, вычисленные с неслыханной точностью, например $-3.86252562806005E+02$ Хартри. У меня возникли сомнения в оправданности записи с таким большим числом значащих знаков.
5. Некоторые формулировки, например «ширина ДСФ стремится к прямой плоскости», некорректны с точки зрения русского языка.

Заключение по диссертации

Несмотря на сделанные замечания, диссертация Курбониёна М.С. производит хорошее впечатление, и они не влияют на оценку исследования. Материал диссертации достаточно полно отражен в научных журналах, а также был представлен на научных международных конференциях различного уровня. Автореферат работы полностью отражает содержание диссертации.

Диссертация Курбониёна Мехрдода Субхони представляет собой законченную квалификационную работу, полностью соответствующую требованиям п.9-14, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата наук «Положением о присуждении учёных степеней», утвержденным Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата наук. Работа Курбониёна Мехрдода Субхони позволяют считать автора достойным присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния.

1 марта 2018 г.

Официальный оппонент

С.н.с. Лаборатории моделирования биомолекулярных систем

Федерального государственного бюджетного учреждения науки

Института биоорганической химии им. академиков М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова

Российской академии наук

 / Чугунов Антон Олегович



117997 Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 16/10

Телефон (рабочий): +7-495-336-20-00. Е-мейл: batch2k@yandex.ru.

Специальность к.ф.-м.н.: 03.00.02 — Биофизика.

Подпись Чугунова А. О. заверяю

Ученый секретарь Института биоорганической химии РАН, д.ф.-м.н.


 / Олейников Владимир Александрович