

«УТВЕРЖДАЮ»

Ректор Таджикского технического
университета им. М.С.Осими, член-

корр. АН РТ, доктор химических наук,
профессор

Одиназода Х.О.

2018 г.



ОТЗЫВ

Ведущей организации 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.

На сегодняшний день науке известны более пяти тысяч различных магнитных кристаллов, примерно сто из которых проявляют интересные с физической точки зрения свойства. Исследованию нелинейных свойств ферромагнетиков большое внимание уделяется в последние десять лет. В основном этот интерес был инициирован как развитием теории нелинейных дифференциальных уравнений и новыми экспериментальными данными, так и возможностью их широкого применения в различных областях прикладной науки и техники.

С помощью неупругого рассеяния медленных нейтронов исследуется сложная динамика нелинейных локализованных возбуждений- солитонов при низких температурах, поскольку они могут обеспечить большую физическую информацию и более глубокое представление о физических аспектах проблемы. Этот метод является хорошим средством для исследования ряда свойств нелинейных возмущений в ферромагнетиках. При изучении свойств этих сложных нелинейных локализованных волн действенным инструментарием

является вычисление некоторых динамических факторов с помощью солитонного решения.

Спин-поляризованные и спин-орбитальные расчеты с помощью метода теории функционала плотности (ТФП) в рамках квантово-механического моделирования представляют собой наиболее мощный аппарат для описания ферромагнетизма магнитных материалов. Ещё, изучение магнитных, энергетических, кристаллических и др. свойств ферромагнетиков для описания спиновой динамики и основного состояния является важной и актуальной задачей физики конденсированного состояния.

Диссертация Курбониёна Мехрдода Субхони посвящена применению и развитию методов ТФП в рамках квантово-механического моделирования и полевых моделей для описания магнитных, кристаллических, динамических свойств и спиновой динамики для ферромагнетиков Rb_2NiF_4 и $CsNiF_3$. Использование современных вычислительных мощностей при моделировании, в том числе с применением теории функционала плотности с учётом таких тонких эффектов, как спин-орбитальных и спин-поляризованных связи, является отличительной особенностью работы диссертанта.

Диссертационная работа состоит из введения, трёх глав, выводов и списка литературы и изложена на 94 страницах машинописного текста.

Во введении обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулированы цель и задачи работы, приведены основные положения, выносимые на защиту, дана оценка теоретической и практической значимости работы, изложена структура диссертации.

В первой главе диссертационной работы приводится краткий обзор исследований по свойствам нелинейных возмущений в ферромагнетиках. Важнейшим способом исследования свойств нелинейных локализованных волн в ферромагнитной цепочке является вычисление динамических факторов с помощью конкретных солитонных решений. В этой связи в данной главе приводится обзор работ по процессам формирования солитонов в ферромагнитных системах, даётся оценка состояния квантовых исследований

ферромагнитной цепочки и нелинейных локализованных возбуждений. Показано, что метод ТФП широко применяется в разных отраслях физики конденсированного состояния, особенно при моделировании состояния ферромагнитных систем, электронной структуры различных тел.

Во второй главе приведены результаты исследования динамических факторов ферромагнетиков Rb_2NiF_4 и $CsNiF_3$. Показано, что с помощью двух видов солитонных решений можно производить вычисление и исследование динамического структурного фактора (ДСФ), интегральную интенсивность, энергию солитонной волны и пр., которые дают информацию о структуре и спиновой динамике магнитных материалов в широком диапазоне пространственных и временных масштабов. Установлено, что дифференциальное сечение неупругого магнитного рассеяния от солитонных волн определяется формой ДСФ. При определенном значении передаваемого импульса с ростом температуры ширина центрального пика ДСФ в обоих ферромагнетиках Rb_2NiF_4 и $CsNiF_3$ возрастает и постепенно стремится к прямой линии. Центральный пик ДСФ проявляется при низких энергиях и небольших скоростях. Это говорит о том, что при высоких температурах солитоны не проявляют корпускулярных свойств.

В третьей главе приведены результаты квантово-механического моделирования ферромагнетиков Rb_2NiF_4 и $CsNiF_3$ в рамках теории функционала плотности в зависимости от состояний спина электронов. Вычислены параметры решеток Rb_2NiF_4 и $CsNiF_3$, отлично согласующиеся с экспериментальными результатами. В зависимости от функционала плотности намагничивания были определены верхний и нижний магнитный моменты спинов всех атомов, орбитальный и полный спиновой магнитный момент атомов элементарных ячеек Rb_2NiF_4 и $CsNiF_3$. Для атома Ni в обеих системах получено удовлетворительное согласие теоретических и экспериментальных значений спинового и общего моментов. Методом полного потенциала линейной присоединённой плоской волны (FP-LAPW) в рамках ТФП моделирования, реализованного в программном коде WIEN2k, проведено исследование динами-

ческих и структурных свойств Rb_2NiF_4 и $CsNiF_3$. Определён вклад состояний атомов Rb , Cs , F и Ni и электронных состояний s , p , d , f по энергетическим зонам (запрещённая зона, валентная зона и зона проводимости) Rb_2NiF_4 и $CsNiF_3$. Уровень Ферми в $CsNiF_3$ располагается ближе к потолку, чем в Rb_2NiF_4 , что говорит о менее ярко выраженных металлических свойствах этого ферромагнетика.

Полученные диссертантом результаты по спиновой динамике ферромагнетиков Rb_2NiF_4 и $CsNiF_3$ могут быть использованы в экспериментах по рассеянию нейтронов. Результаты квантово-механического моделирования в рамках ТФП могут быть использованы при структурных исследованиях материалов рентгеноструктурными методами анализа, в анализе энергетических околопороговых тонких структур методами рентгеновского поглощения. Вычисленная плотность состояния элементарных ячеек ферромагнетиков Rb_2NiF_4 и $CsNiF_3$ может послужить для интерпретации ряда явлений квантово-механической природы.

Автор при работе над диссертационным проектом имел тесное сотрудничество со многими научными центрами в составе широкой международной коллаборации Таджикистан-Россия-Япония, что подчеркивает высокую степень достоверности и важности полученных ими научных результатов, его осведомлённости по тематике исследования. На различных этапах выполнения работы по теме диссертации Курбониён М.С. оперативно осваивает программные коды Abinit и WIEN2k, арендованные у японской стороны (Лаборатория профессора Томоюки Ямамото; Quantum Condensed-Matter Science Lab., Faculty of Science and Engineering, Waseda University, Tokyo, JAPAN) для последующей реализации квантово-механических вычислений энергетических и кристаллографических параметров ферромагнетиков Rb_2NiF_4 и $CsNiF_3$. В итоге диссертантом, в целом, решена актуальная научно-исследовательская задача, заключающаяся в исследовании спиновых эффектов в магнитных материалах с помощью комбинированных подходов теории

функционала плотности и полевых моделей физики конденсированного состояния.

Диссертационная работа Курбониёна М.С. не лишена недостатков. В качестве замечаний следует отметить следующие:

1) Применение квантово-механического моделирования ограничено только рассмотрением приближения локальной спиновой плотности (LSDA).

2) В работе совершенно не обсуждается смысл найденных температурных зависимостей структурного фактора и солитонных параметров. Какое значение имеет, например, тот факт, что с ростом температуры солитонная волна теряет корпускулярные свойства и какие практические выводы можно сделать из этого?

3) Текст диссертации выверен недостаточно тщательно, встречаются грамматические и стилистические ошибки. Например, в таблице 3.1 не указаны единицы энергии.

Однако указанные недостатки не влияют на общую положительную оценку работы, а носят скорее рекомендательный характер. Рецензируемая работа оставляет весьма приятное впечатление. Полученные результаты и их интерпретация являются вполне достоверными и сомнений не вызывают. По материалам диссертации опубликованы 10 работ, 7 из которых являются статьями в рецензируемых журналах из Перечня ВАК РФ.

Автореферат достаточно полно отражает основное содержание диссертации. Материалы диссертации прошли достаточную апробацию на международных и республиканских конференциях.

По актуальности, научной новизне, теоретической и практической значимости полученных результатов диссертационная работа Курбониёна Мехрдода Субхони «Исследование спиновых эффектов в магнитных материалах с помощью комбинированных подходов теории функционала плотности и полевых моделей» полностью отвечает требованиям пп. 9-14 Положения о присуждении учёных степеней, утвержденным Постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24.09.2013, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а его автор заслуживает

присуждения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Отзыв составлен заведующим кафедрой физики Таджикского технического университета им. М.С.Осими, кандидатом физико-математических наук, доцентом Ходжахоновым И.Т.

Диссертация и отзыв рассмотрены на заседании кафедры физики от 7 марта 2018 г., протокол № 3.

Зав. кафедрой физики Таджикского
технического университета им.
М.С.Осими, кандидат физ.-мат. наук,
доцент

Ходжахонов И.Т.

Контакты:

734042, Республика Таджикистан, г. Душанбе, улица академиков Раджабовых, 10. Таджикский технический университет им. М.С.Осими
E-mail: idris56@ru; тел. :+992-93-884- 82-90.

Подпись Ходжахонова И.Т. удостоверяю:
Начальник ОДиСР ТТУ им. М.С.Осими



Бадруддинов Т.С.