

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Бадртдинова Даниса Илюсовича **«Влияние спин-орбитальной связи и гибридизации атомных состояний на магнитные свойства низкоразмерных систем»**, представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Наша технологическая цивилизация уже в значительной мере опирается на квантовые явления в физике конденсированного состояния, понимание которых обеспечило создание всевозможных электронных устройств. В последние десятилетия усилия многих тысяч исследователей сосредоточено на изучении магнитных явлений, где квантовая механика играет определяющую роль. Взаимодействие электронных, магнитных и других типов упорядочений в кристаллах приводит к появлению сложных, порою весьма экзотических структур, для изучения которых и предсказания их свойств требуется использование самых современных методов теоретической физики. Особенно это касается низкоразмерных систем, где важнейшую роль имеет сильная анизотропия взаимодействий и наличие развитых флуктуаций. Поэтому диссертационная работа Бадртдинова Даниса Илюсовича очень актуальна и находится буквально на переднем крае современной физики конденсированного состояния. Её научная новизна не вызывает сомнений, так как диссертант работает во взаимодействии с ведущими мировыми исследователями, применяет все последние достижения теоретической мысли. Это обеспечивает достоверность полученных им результатов, часть которых уже получила подтверждение в экспериментальных исследованиях, выполненных, в том числе и с участием диссертанта. Дополнительным подтверждением научной новизны и достоверности является публикация работ диссертанта в высокорейтинговых международных журналах. Изучаемые в работе магнитные структуры могут быть интересны и для практических применений в устройствах памяти, обработки и передачи информации.

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Полный объём диссертации составляет 114 страниц с 11 таблицами и 34 рисунками. Список литературы содержит 157 наименований.

Во введении обсуждается актуальность исследований, проведённых в рамках диссертационной работы, формулируются цели и задачи работы, определяются объекты и методы исследований. Обосновывается научная новизна и практическая значимость полученных результатов, представлены защищаемые научные положения. Описывается структура и содержание работы.

В первой главе представлен подробный литературный обзор области исследований, и в особенности используемых в диссертации теоретических подходов, таких как классическая теория функционала плотности и её расширения на магнитные структуры с релятивистским спин-орбитальным взаимодействием, использование функций Ванье в моделях Хаббарда и Гейзенберга.

Вторая глава посвящена разработанным в диссертации методам количественного описания гибридизации атомных орбиталей в магнетиках с применением функций Ванье, которые необходимы главным образом для учёта вкладов в магнетизм нелокализованных валентных электронов. Развита здесь теория направлена на интерпретацию спектров магнитного рассеяния нейтронов, что позволяет понять тонкие детали магнитного упорядочения в исследуемых структурах. В этой же главе развивается теория магнитной сканирующей туннельной микроскопии как метода исследования поверхностных магнитных состояний.

Основное содержание третьей главы связано с изучением квазиодномерной системы Cu_2GeO_4 , для которой рассчитаны эффективные параметры обменных взаимодействий между магнитными атомами и проведено сравнение между различными типами дальнего магнитного порядка. Проведено подробное сравнение результатов расчётов, использующих разные пакеты программ, и сравнение с нейтронными данными. Обсуждаются возможные механизмы возникновения в этой системе макроскопической электрической поляризации.

В четвертой главе проведены исследования сложных магнитных свойств двух оксидов молибдена, на примере которых продемонстрирована важность учёта магнитного ковалентных связей при анализе результатов нейтронных экспериментов.

Очень интересные результаты получены в пятой главе, где исследованы поверхностные магнитные состояния, в которых из-за нарушения симметрии существенно взаимодействие Дзялошинского-Мории. Проведён полный анализ этих нарушений симметрии и обсуждаются различные сценарии магнитных упорядочений (спиральные структуры, топологически защищённые скирмионные объекты и т.п.).

Из содержания диссертации следует большое число полученных новых результатов. Отмечу только наиболее яркие и значимые из них:

Последовательное использование функций Ванье для количественного описания эффектов гибридизации атомных состояний при расчете ковалентных магнитных форм-факторов из первых принципов.

Детальное изучение формирования экспериментально наблюдаемого магнитного упорядочения и локальной электрической поляризации в

квазиодномерном кристалле Cu_2GeO_4 .

Подробный анализ магнитных взаимодействий в квазидвумерных кристаллов оксидов молибдена BaMoP_2O_8 и $\text{SiMoP}_3\text{O}_{11}$ с количественным объяснением имеющихся экспериментальных данных по нейтронному рассеянию.

Моделирование поверхностных магнитных наноструктур олова и свинца на поверхности (111) кремния и олова на поверхности (0001) карбида кремния с учетом спин-орбитальной связи и нелокальных магнитных взаимодействий, предсказание существования спиновых спиралей при конечных температурах и стабилизации скирмионных конфигураций под действием внешнего магнитного поля.

Стиль изложения диссертации в основном четкий и ясный. Работа оформлена в соответствии с требованиями, предъявляемыми к диссертациям. Однако у меня имеются следующие замечания к работе:

1. При описании магнитных структур в диссертации указана только их немагнитная пространственная симметрия, но не приводятся их магнитные пространственные группы симметрии. Это делает описание неполным и может затруднить понимание и использование полученных результатов.
2. В диссертации не приведены (псевдо)векторные магнитные структурные факторы, которые могли бы быть вычислены для полученных из первых принципов магнитных структур. Именно эти магнитные структурные факторы используются в магнитной нейтронной дифракции, их знание особенно важно для неколлинеарных структур, и их расчёт мог бы стимулировать экспериментальные работы по детальной проверке теоретических предсказаний.

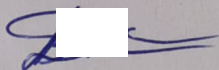
Приведенные замечания носят технический характер, они скорее относятся к развитию работы в будущем и не снижают общей высокой оценки диссертации, ее фундаментальности и научной значимости.

Диссертация Бадртдинова Д.И. представляет собой завершённую научно-исследовательскую работу на очень актуальную тему, соответствует самым высоким мировым стандартам, содержит новые оригинальные результаты, имеющие высокую теоретическую и практическую значимость. Исследования, выполненные автором диссертации, вносят существенный вклад в решение важной научной задачи физики конденсированного состояния по исследованию магнитных материалов со сложной структурой. Бадртдинов Д.И. является уже вполне сложившимся исследователем, активно ведущим работу самостоятельно и в составе российских и международных научных коллективов. Результаты диссертации были представлены автором на многих российских и международных конференциях, они с достаточной полнотой опубликованы в девяти печатных

работах в высокорейтинговых рецензируемых научных журналах, входящих в перечни ВАК и Аттестационного совета УрФУ. Научная тема и содержание работы полностью соответствуют паспорту специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния. Автореферат и опубликованные работы правильно и полно отражают содержание диссертации. Достоверность и новизна полученных результатов хорошо обоснованы, личный вклад автора ясно определен.

Считаю, что диссертационная работа соответствует требованиям п.п. 9-11 Положения о присуждении учёных степеней в УрФУ, предъявляемым к диссертационным работам на соискание учёной степени кандидата наук, а её автор, Бадртдинов Данис Илюсович, несомненно, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент,
доктор физико-математических наук,
главный научный сотрудник отдела теоретических исследований
института кристаллографии имени А.В. Шубникова РАН
Федерального государственного учреждения
«Федеральный научно-исследовательский центр
«Кристаллография и фотоника»
Российской Академии Наук

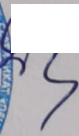


Дмитриенко Владимир Евгеньевич

«11» мая 2021 г.

Адрес организации:
119333, г. Москва, Ленинский проспект, д. 59
тел. +7 (499) 135-63-11, www.crys.ras.ru
e-mail: dmitrien@crys.ras.ru

Подпись В.Е. Дмитриенко заверяю.
Учёный секретарь ФНИЦ
"Кристаллография и фотоника" РАН, к.ф.н.



Л.А. Дадинова