

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 ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — Физика конденсированного состояния

Низкоразмерные материалы, в которых электронные, магнитные и решеточные подсистемы сильно взаимосвязаны, представляют огромный фундаментальный и практический интерес в современной физике конденсированного состояния. Размерность таких систем ограничивает взаимодействие между атомами в одном или двух измерениях, что может привести к формированию необычных магнитных структур (скирмионы, спиновые спирали) и магнитонеупорядоченных состояний (квантовая спиновая жидкость). Для практического внедрения таких материалов необходимо детальное изучение микроскопических механизмов, что не удается достичь имеющимися методами первопринципного моделирования в рамках функционала электронной плотности. Требуется проведение дополнительной методической работы по построению и решению магнитных моделей, и апробации их в низкоразмерных системах, которые характеризуются значительными эффектами гибридизации атомных состояний и спин-орбитальной связи. Таким образом, **актуальность** этой фундаментальной задачи обусловлена, как активным экспериментальным изучением новых, перспективных многокомпонентных низкоразмерных магнетиков, так и необходимостью развития теоретических методов и подходов для интерпретации их электронных и магнитных свойств. Решению данной проблемы посвящена диссертационная работа Бадртдинова Даниса Илюсовича.

Структура и основное содержание работы. Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, заключения, списка терминов и списка литературы из 157 наименований. Работа изложена на 114 страницах, включая 34 рисунка и 11 таблиц. Текст написан в научном стиле последовательно и логично, и соответствует всем требованиям, предъявляемым к научно-квалификационным работам. Автореферат достаточно полно отражает основное содержание диссертации.

Во **введении** обосновывается актуальность работы, сформулированы цели и задачи, излагается научная новизна, теоретическая и практическая значимость диссертации.

В **первой главе** рассмотрен обзор методов исследования, используемых в диссертации. Описаны первопринципные методы на основе функционала электронной плотности, подходы для построения модельных гамильтонианов, способы их решения и сопоставления полученных теоретических результатов с экспериментальными данными.

Во **второй главе** приведены разработанные автором диссертации численные методы учета гибридизации атомных состояний с использованием функций Ванье. Представлены способы расчета ковалентного магнитного форм-фактора, моделирования спектров сканирующей туннельной микроскопии и определения параметров нелокальных магнитных взаимодействий из первых принципов.

Третья глава посвящена исследованию магнитных свойств Cu_2GeO_4 , структура которого состоит из цепочек атомов меди. Показано, что из-за перекрытия волновых функций валентных состояний за счет гибридизации металл-лиганд, прямое ферромагнитное взаимодействие полностью подавляет сверхобменный механизм между ближайшими атомами меди. Это создает условие для стабилизации экспериментально наблюдаемого коллинеарного магнитного упорядочения и локальной электрической поляризации за счет слабой анизотропии обменных интегралов.

В **четвертой главе** приведены результаты исследований магнитных свойств оксидов молибдена BaMoP_2O_8 и $\text{SiMoP}_3\text{O}_{11}$, в которых ионы молибдена формируют треугольные и гексагональные магнитные решетки, соответственно. Магнитные модели, построенные на основе первопринципных методов, объясняют нейтронные спектры и термодинамические данные. Показано, что использование ковалентного форм-фактора позволяет улучшить согласие для магнитных моментов, оцененных в экспериментах по нейтронному рассеянию и рассчитанных первопринципными методами.

В **пятой главе** исследованы магнитные свойства поверхностных структур *sp* элементов $\text{Sn/Si}(111)$, $\text{Pb/Si}(111)$ и $\text{Sn/SiC}(0001)$. Показано, что взаимодействие Дзялошинского-Мория вносит существенный вклад в магнитную энергию, что

обеспечивает формирование спиновых спиралей в основном состоянии и стабилизацию скирмионов под действием внешнего магнитного поля. Эти магнитные упорядочения могут быть обнаружены в эксперименте сканирующей туннельной микроскопии, что продемонстрировано моделированием соответствующих спектров.

В заключении сформулированы основные выводы по работе.

Таким образом, диссертационная работа представляет собой цельное, завершенное исследование, начинающееся с определения цели и объектов исследования, постановки задач, обоснованного выбора и развития методов, анализа результатов и формулировки выводов. Все результаты хорошо проиллюстрированы, выводы логически вытекают из содержания диссертации.

Теоретическая и практическая значимость диссертационной работы связана с разработкой новых методов численной оценки гибридизации атомных состояний, с развитием фундаментальных знаний о магнитных свойствах низкоразмерных систем, которые могут быть использованы в дальнейших исследованиях с целью поиска технологических важных фаз.

Научная новизна диссертационной работы. Автором **впервые** разработаны методы численной оценки эффектов гибридизации атомных состояний из первых принципов при расчете магнитных форм-факторов, моделировании спектров сканирующей туннельной микроскопии и определении нелокальных магнитных взаимодействий с использованием базиса функций Ванье. Эти методы позволили объяснить экспериментально наблюдаемое магнитное упорядочение и локальную электрическую поляризацию в квазиодномерной системе Cu_2GeO_4 , интерпретировать экспериментальные данные по нейтронному рассеянию и термодинамических измерений квазидвумерных оксидов BaMoP_2O_8 и $\text{SiMoP}_3\text{O}_{11}$, а также предсказать стабилизацию спиновых спиралей и скирмионного состояния в поверхностных структурах $\text{Sn/Si}(111)$, $\text{Pb/Si}(111)$ и $\text{Sn/SiC}(0001)$. Представленные результаты получены впервые и несут себе научную ценность и новизну, о чем свидетельствует их публикация в научных журналах.

Достоверность полученных результатов гарантируется их внутренней согласованностью и непротиворечивостью с общепринятыми концепциями, а также согласием с имеющимися экспериментальными данными.

При прочтении диссертации возник ряд вопросов и замечаний:

1. Во второй главе, посвященной разработке численных методов учета гибридизации с использованием функций Ванье, предполагается эквивалентность экранирования для кулоновских и обменных параметров (стр. 44-45). Как это можно обосновать? Насколько изменится/усложнится теоретическая схема без такого предположения?
2. В третьей главе расчеты обменных параметров проведены с использованием значений ($U_d = 9.5 \text{ eV}$, $J = 1 \text{ eV}$), рассчитанных методом линейного отклика. Известно, что параметр U_d в расчетах оксидных соединений меди выбирался от 2 eV до 10 eV и весь этот интервал был в хорошем соответствии с экспериментальными данными. Исследовалась ли зависимость от параметра U_d . Возможна ли стабилизация для меньших значений U_d .
3. Чем объяснить разницу на порядок в значениях обменных параметров, рассчитанных разными методами (0.2 и 7.2 meV) в Cu_2GeO_4 .
4. Почему поверхности с адсорбированным атомом отнесены к наносистемам, что понимается под наноразмером этой системы?

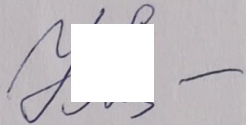
Высказанные замечания не снижают общего положительного впечатления от данной работы. Диссертация Бадртдинова Д.И. выполнена на очень высоком современном научном уровне, является законченным и самостоятельным исследованием, в котором разработаны теоретические подходы, с помощью которых решается важная и актуальная научная задача установления основных закономерностей и механизмов формирования магнитных свойств низкоразмерных систем.

Основные результаты и выводы диссертационной работы опубликованы в 9 научных статьях в ведущих рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК, а также были представлены на семинарах европейских университетов и докладывались на международных конференциях. Следует отметить, что количество публикаций диссертанта значительно превышает необходимый минимум для защиты кандидатской диссертации.

Считаю, что диссертационная работа соответствует требованиям п.п. 9-11 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ, предъявляемым к

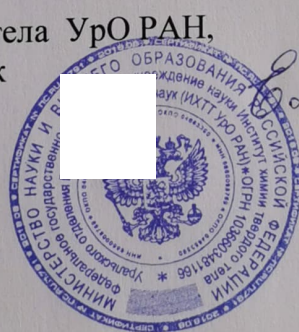
диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор, Бадртдинов Данис Илюсович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07. — Физика конденсированного состояния.

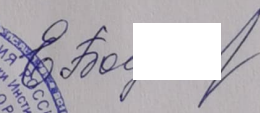
Официальный оппонент,
доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник, главный научный сотрудник
лаборатории квантовой химии и спектроскопии
имени профессора А.Л. Ивановского
Федерального государственного бюджетного
учреждения науки «Институт химии твердого тела»
Уральского отделения Российской академии наук


Медведева Надежда Ивановна
« 19 » мая 2021 г.

620990, Екатеринбург, ГСП,
ул. Первомайская, 91
ИХТТ УрО РАН
Тел.: +7 (343) 362-35-54, www.ihim.uran.ru,
E-mail: medvedeva@ihim.uran.ru, тел. +7 (343) 362-3554.

Подпись Медведевой Н. И. заверяю
Ученый секретарь ФГБУН
Институт химии твердого тела УрО РАН,
Кандидат химических наук




Богданова Е. А.

Дата: 19.05.2021