

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 системы представляют повышенный интерес ввиду большого разнообразия проявляемых физических свойств, самыми известными из которых являются высокотемпературная сверхпроводимость в купратах и сверхпроводниках на основе железа, гигантское магнетосопротивление и др. Среди них наиболее интересны квазиодномерные и двумерные магнитные материалы с богатой фазовой диаграммой. Их отличительной чертой является то, что за счет структурных особенностей магнитные взаимодействия оказываются фрустрированными, приводя к нетривиальным типам дальнего магнитного порядка, таких как неколлинеарные магнитные структуры, спиновые спирали, скирмионы и т.д. С другой стороны, магнитный порядок может отсутствовать даже в пределе сверхнизких температур, формируя состояние квантовой спиновой жидкости, димеризованные и другие магнитнеупорядоченные запутанные состояния. Таким образом *актуальность* данной диссертационной работы, в которой исследуются влияние гибридизации на магнитные свойства низкоразмерных систем не вызывает сомнений.

Научная и практическая ценность работы заключается в полученных результатах, которые представляют как самостоятельный научный интерес, так и могут служить основой для дальнейшего построения теоретических моделей и сравнения с экспериментальными данными.

Достоверность результатов подтверждена успешным использованием примененных в диссертации методов и подходов, а также хорошим согласием полученных результатов с экспериментальными данными. Представленные результаты апробированы на международных и российских конференциях и отражены в виде статей в ведущих реферируемых международных журналах.

Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы из 157 наименований. Работа изложена на 114 страницах. Диссертация написана последовательно и логично, текст написан в научном стиле и соответствует требованиям, предъявляемым к научно-квалификационным работам.

Во введении даётся краткий обзор современного состояния науки в области исследования низкоразмерных магнетиков, подробно обсуждается важность учета спин-орбитального взаимодействия в таких системах, и обосновывается актуальность работы.

Сформулированы цель и задачи работы, определена её научная новизна, практическая ценность, а также подробно изложен личный вклад автора.

Первая глава состоит из трех частей и посвящена обзору методов, используемых в данной диссертации. Вначале рассматриваются первопринципные методы описания электронных и магнитных свойств соединений в рамках теории функционала плотности (DFT — Density Functional Theory) и DFT+U подхода для случая сильно-коррелированных систем. Модель Хаббарда и модель Гейзенберга, а также их связь с первопринципными методами излагаются во второй части. В последней части проводится связь между теоретическими методами исследования и экспериментами по рассеянию нейтронов и сканирующей туннельной спектроскопией. Таким образом, данная глава включает в себя разностороннее описание электронных и магнитных свойств вещества как с теоретической (модельной или расчетной), так и с экспериментальной точек зрения.

Вторая глава посвящена использованию функций Ванье для учета гибридизации атомных состояний. На примере магнитного форм-фактора и спектров сканирующей туннельной спектроскопии показано, что экспериментальные результаты описываются существенно лучше при применении формализма максимально локализованных функций Ванье, учитывающих гибридизационные эффекты.

В третьей главе рассматривается механизм стабилизации коллинеарного магнитного упорядочения в квазиодномерной системе Cu_2GeO_4 . Из экспериментальных данных и ранее рассчитанных параметров одномерной модели Гейзенберга с вторыми соседями, соотношение J_1/J_2 (первый сосед/второй сосед) соответствует решению со спиновой спиралью в качестве основного состояния, что противоречит экспериментальным данным — Cu_2GeO_4 имеет вверх-вверх-вниз-вниз тип магнитного порядка. Для разрешения данного противоречия автором диссертации предложена спиновая модель, которая учитывает анизотропные взаимодействия. Показано, что учет слабой симметричной анизотропии магнитных взаимодействий приводит к стабилизации магнитного порядка вверх-вверх-вниз-вниз.

В четвертой главе исследованы BaMoP_2O_8 и $\text{SiMoP}_3\text{O}_{11}$ — низкоразмерные системы, в которых магнитные ионы молибдена образуют треугольные и гексагональные плоскости, соответственно. С точки зрения магнитных взаимодействий треугольные и гексагональные структуры являются фрустрированными, так как не существует простого антиферромагнитного упорядочения, которое бы эффективно понижало энергию системы. Таким образом изучение данных соединений является важным для понимания фундаментальных свойств магнетизма в двумерном случае. Использование формализма функций Ванье позволило корректно описать магнитные форм-факторы и правильно оценить параметры магнитных взаимодействий.

Пятая глава посвящена исследованию скирмионов, образуемых в поверхностных структурах атомов свинца и олова на подложках из кремния и карбида кремния. Для описания электронных и магнитных свойств была рассмотрена расширенная модель Хаббарда с учетом спин-орбитального взаимодействия, в которой помимо стандартных членов было использовано нелокальное прямое обменное взаимодействие. Решение данной модели методом Хартри-Фока выявило неколлинеарное основное состояние и

изоляционный характер в согласии с фотоэмиссионными данными. Исследование магнитных моделей с учетом взаимодействия Дзялошинского-Мории и симметричного анизотропного взаимодействия предсказывает формирование спиновых спиралей при конечных температурах и стабилизацию скирмионных состояний под действием внешнего магнитного поля.

В заключении сформулированы основные выводы по работе и перспектива дальнейших разработок данной темы.

Вместе с тем при прочтении диссертации возник ряд вопросов и замечаний:

1. На рис. 4.6 представлены парциальные плотности состояний для BaMoP_2O_8 и $\text{SiMoP}_3\text{O}_{11}$. В обоих случаях t_{2g} состояния молибдена пересекают энергию Ферми и имеют ширину около одного электрон-вольта. Как объяснить такую малую ширину зоны в то время как в соединениях $3d$ переходных металлов, которые пространственно гораздо более локализованы по сравнению с $4d$, ширина t_{2g} зоны в разы больше и может достигать 3-4 эВ?

2. Из рис. 2.1, 3.6 и 4.7 видно, что ковалентный магнитный форм-фактор более локализован в обратном пространстве по сравнению с ионным. Всегда ли выполняется данное соотношение или оно имеет место только для определенного класса соединений? Могут ли быть ситуации, в которых ковалентный магнитный форм-фактор менее локализован по сравнению с ионным?

3. Нелокальное прямое обменное взаимодействие может быть описано в рамках первопринципных методов, таких как GW приближение или следующее поколение обменно-корреляционных функционалов (metaGGA или последнее поколение гибридных функционалов в рамках теории функционала плотности). Насколько оправдано использование в диссертационной работе модельного подхода для описания нелокальных обменных эффектов?

4. В диссертационной работе делается упор на использование функций Ванье для описания различных магнитных и электронных свойств и важность учета гибридизационных эффектов. Как известно, и в том числе подтверждается автором диссертации, выбор базиса для функций Ванье (например t_{2g} металла или t_{2g} металла и p кислорода) могут существенно влиять на результат. Какой базис функций Ванье (наименьшее количество состояний с большими хвостами или большее количество базисных функций, но с лучшей локализацией) наиболее оптимален для вычисления параметров магнитных моделей и параметров взаимодействия?

5. Наблюдается некоторая небрежность автора в вопросе цитирования. Например ссылка номер 8 на condmat существует в печатном варианте со всеми выходными данными. Ссылка 20 является неверной. Вместо ссылки 41 на Нобелевскую лекцию Кона правильнее было бы сослаться на первоисточники. Ссылка 50 на спиноры — это ссылка на диссертацию Руденко от 2009 года, который вряд ли был первым кто их ввел и использовал для описания неколлинеарного магнетизма.

6. На стр. 66 и 81 сказано, что использовалось приближение обобщенной градиентной поправки, но нет ссылки на какую именно форму, в то время как их существует множество.

7. Из текста диссертации не ясно каковы электронные свойства квазидвумерных фрустрированных магнетиков BaMoP_2O_8 и $\text{SiMoP}_3\text{O}_{11}$.


8. На стр. 64 написано “В свою очередь, в $\text{SiMoP}_3\text{O}_{11}$ реализуется антиферромагнитный порядок с волновым вектором $(0,0,0)$, ...”. Обычно нулевой волновой вектор соответствует ферромагнетизму.

Тем не менее, высказанные замечания не изменяют общего положительного впечатления от данной работы. Представленная диссертация является завершённым научным исследованием. Полученные в работе результаты были опубликованы в ведущих международных физических журналах и доложены на российских и международных конференциях. Выводы диссертации обоснованы и подтверждены сравнением с опубликованными теоретическими и экспериментальными данными. Работа выполнена на высоком мировом уровне и посвящена актуальным проблемам современной физики низкоразмерных систем, удовлетворяет всем критериям новизны, достоверности и практической значимости.

Автореферат полностью отражает основное содержание диссертации.

В целом полагаю, что диссертационная работа «Влияние спин-орбитальной связи и гибридизации атомных состояний на магнитные свойства низкоразмерных систем» полностью соответствует паспорту специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния» и требованиям пп. 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,
кандидат физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник лаборатории оптики металлов
Федерального государственного бюджетного
учреждения науки Института физики
металлов имени М.Н. Михеева Уральского
отделения Российской академии наук


Потеряев Александр Иванович
«11» мая 2021 г.

Почтовый адрес:

620137, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, д. 18,

ИФМ УрО РАН

тел.: +7 (343) 378 38 14

факс: +7 (343) 374 52 44

эл. почта: poteryaev@imp.uran.ru

