

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Бадртдинова Даниса Илюсовича «Влияние спин-орбитальной связи и гибридизации атомных состояний на магнитные свойства низкоразмерных систем», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности

01.04.07 — Физика конденсированного состояния

Диссертация Бадртдинова Д.И. посвящена первопринципному исследованию магнитных свойств низкоразмерных материалов. Целью работы является понимание механизмов формирования локальных магнитных моментов и их упорядочения в данных системах с учетом эффектов гибридизации и спин-орбитального взаимодействия (СОВ).

Для решения этой задачи, диссертант разработал новые численные схемы расчета факторов для спектров нейтронного рассеяния, а также вольт-амперных характеристик, полученных по средствам сканирующей туннельной микроскопии. В работе явным образом продемонстрировано, что учет эффектов делокализации атомных орбиталей, отвечающих за формирование магнетизма является необходимым для качественной интерпретации экспериментальных данных. В частности, разработанные методы могут быть использованы для более точного определения атомных магнитных моментов, используя комбинацию нейтронного рассеяния и первопринципных методов расчета электронной структуры.

В дальнейшем, автор исследует несколько классов низкоразмерных магнетиков: квази-одномерные оксиды меди, квази-двумерные оксиды молибдена и поверхностные *sp*-системы. Выбранные системы характеризуются разной величиной эффектов, воздействующих на магнитные состояния, таких как степень их делокализации и величины спин-орбитального взаимодействия по сравнению с кристаллическим полем. По средствам первопринципных расчетов, диссертанту удалось параметризовать и решить микроскопические модели, описывающие низкоэнергетические возбуждения и общее поведение выбранных материалов под действием внешнего поля и температуры, что помогло объяснить ряд экспериментальных данных. Для наноструктур *sp*-элементов предсказана возможность стабилизации топологически защищенных магнитных структур.

В процессе чтения автореферата к диссертанту возникли следующие вопросы:

- 1) Из Ур.(2) не очевидно, зачем вводится проектирование на локальный базис, тогда как плотность в любой точке пространства может быть напрямую извлечена из DFT расчета. Тем более, с развитием эффективных методов линейно зависящих от числа частиц ("order-N DFT"), моделирование поверхности в присутствии щупа представляется возможным.
- 2) Касательно наноструктур *sp*-элементов, в автореферате не обсуждается физический механизм, приводящий к расщеплению зон. Является ли это эффектом *прямого* СОВ валентных электронов или же эффективным СОВ обусловленного симметрией кристаллического потенциала (эффект Рашбы) ?

Упомянутые замечания не сказываются на общей положительной оценке представленного автореферата. Он вносит вклад в весьма важную область современной науки, а именно в создание новых технологий, которые придут на смену современным электронным устройствам. Моделирование материалов и их свойств является важной составной частью технологического прогресса, что в свою очередь невозможно без понимания микроскопических процессов отвечающих за формирование магнетизма, сверхпроводимости и других квантовых явления. В данном автореферате представлен срез того, насколько точны современные первопринципные методы в предсказании свойств низкоразмерных материалов.

Данная работа выполнена на высоком уровне и основана на ряде публикации, которые удовлетворяют требованиям , предъявляемым к кандидатским диссертациям. По моему мнению, автор работы, Бадртдинов Данис Илюсович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния.

Ph.D.,

Исследователь кафедры теории материалов факультета физики и астрономии университета Уппсалы (Швеция),


адрес: Ångströmlaboratoriet, Lägerhyddsvägen 1, Uppsala, Sweden

почтовый адрес: Uppsala University, Box 516 75120 Uppsala, Sweden

тел.: +46 (0) 18 471 58 56

факс.: +46 (0) 18 471 35 24

e-mail: Yaroslav.Kvashnin@physics.uu.se


Ярослав Олегович Квашнин

Дата: 07 мая 2021

Institutionen för fysik och astronomi
Box 516, 751 20 UPPSALA
Tel. 018-471 00 00
FAX 018-471 59 99
UPPSALA
UNIVERSITET