

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу

БАРАНОВОЙ Марии Сергеевны

«Магнитный порядок и обменное взаимодействие в двумерных атомных структурах Ван-дер-Ваальсовского типа и твердых растворах ZnO с переходными элементами», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.16.08 – нанотехнологии и наноматериалы (по отраслям)

1. Соответствие диссертации специальностям и отрасли науки, по которым она представлена к защите

Диссертационная работа Барановой Марии Сергеевны «Магнитный порядок и обменное взаимодействие в двумерных атомных структурах Ван-дер-Ваальсовского типа и твердых растворах ZnO с переходными элементами» посвящена численному многоуровневому моделированию структуры, электронных и магнитных свойств низкоразмерных магнитных систем MAX_3 , и магнитных цепочек и димеров, сформированных в объемном ZnO замещением атомов Zn атомами переходных элементов Cr, Mn, Fe, Co, Ni и установлению механизмов возникновения магнитного порядка в них. Объект, предмет и методы исследования представленной диссертации полностью соответствуют специальности 05.16.08 – нанотехнологии и наноматериалы (по отраслям) и отрасли «физико-математические науки». Представленные в диссертации результаты входят в области исследований, предусмотренные паспортом данной специальности, раздел III.2, пункты 2 – «Свойства наноструктур и наноструктурированных материалов», 4 – «Методы анализа структуры и свойств наноструктур и наноструктурированных материалов», 5 – «Влияние внешних воздействий на свойства наноструктур и наноструктурированных материалов» и 7 – «Закономерности функционирования и применение наноструктур и наноструктурированных материалов».

2. Актуальность темы диссертации

Низкоразмерные магнитные материалы перспективны для создания устройств магнитной электроники и спинтроники, работающих на высоких частотах и встраиваемых в микросхемы сверхвысокой степени интеграции. Известно, что магнитный порядок в двумерных материалах является неустойчивым. В силу этого исследования, направленные на увеличение энергии магнитного взаимодействия, являются актуальными. В диссертации исследуются 2 класса материалов: двумерные MAX_3 ($M = Cr, A = Ge, Si, X = S, Se, Te$) и твердые растворы с магнитной примесью на основе ZnO, которые могут представлять практический интерес. Особенность строения двумерных атомных структур Ван-дер-Ваальса с общей формулой MAX_3 ($M = Cr, A = Ge, Si, X = S, Se, Te$) создает необходимые

условия для наличия низкоразмерных магнитных систем. Особенность структуры ZnO позволяет растворять переходные элементы с высокой концентрацией. При этом атомы примеси, замещая в узлах кристаллической решетки атомы цинка, могут формировать низкоразмерные магнитные системы, например, димеры и цепочки. Результаты, полученные с помощью численного моделирования, основанного на современных методах квантовой механики, многоуровневого подхода, анализа структурных, электронных и магнитных свойств, позволили автору определить основные физические механизмы, определяющую энергию магнитного взаимодействия и определить пути её повышения.

3. Степень новизны результатов, полученных в диссертации, и научных положений, выносимых на защиту

Диссертационная работа содержит ряд новых научных результатов, вносящих заметный вклад в физику полупроводников и элементов приборов на их основе. Научной новизной обладают следующие установленные закономерности и результаты:

1. Предложен подход к организации многоуровневого моделирования микроскопических магнитных параметров низкоразмерных магнитных систем, отличающийся от ранее известных учетом особенностей конкретных атомных структур (двумерного MnX_3 и объемного ZnO) с верифицированными параметрами квантово-механического моделирования на атомном уровне;

2. Получены обоснованные зависимости магнитных параметров от структуры и электронных свойств в двумерных атомных структурах MnX_3 с учетом симметрии кристаллического поля, дополняющие известные ранее теоретические представления о новом классе материалов;

3. Установлены зависимости и определены механизмы обменного взаимодействия от состава и структуры в квазиодномерных и квазиульмерных магнитных системах, инициированных включением в структуру объемного ZnO примеси переходного элемента;

4. Впервые проведено сравнение механизмов обменного взаимодействия в низкоразмерных магнитных системах на основе двумерных слоев MnX_3 и объемного ZnO с различной размерностью магнитного взаимодействия, по результатам которого установлено, что механизм формирования ферромагнитного порядка во всех объектах исследования идентичен.

4. Обоснованность и достоверность выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации

Положения, выносимые на защиту, и выводы по диссертации обоснованы и достоверны, что подтверждается их согласием с известными в литературных источниках экспериментальными данными, а также корректным использованием знаний и методов физики полупроводников и вычислительной математики.

5. Научная, практическая, экономическая и социальная значимость результатов диссертации с указанием рекомендаций по их использованию

Научная значимость представляется новыми знаниями о механизмах обменного взаимодействия в низкоразмерных магнитных системах, а именно, в цепочках и димерах, сформированных замещением атомов цинка атомами переходных металлов в твердых растворах ZnO, и в двумерных слоях MnX_3 .

Практическая значимость заключается в возможности разработки спинтронных устройств со спиновой поляризацией, близкой к 100% и повышенной температурой Кюри (вплоть до комнатной). Для достижения этой цели в работе подробно описана «дорожная карта» применения низкоразмерных магнитных материалов в спинтронике. Развитый в работе многоуровневый подход моделирования низкоразмерных магнитных материалов важен для понимания механизмов возникновения в них обменного взаимодействия и влияния на этот процесс кристаллической структуры и электронных свойств.

Экономическая значимость полученных результатов заключается в сокращении и оптимизации сроков разработки элементов спиновой памяти на основе передачи вращательного момента с использованием новых двумерных магнитных материалов, которые могут быть синтезированы в научных центрах НАН Республики Беларусь, а также на предприятиях электронной промышленности.

Социальная значимость работы состоит в использовании полученных результатов в подготовке инженеров и исследователей, обладающих современными знаниями в области исследования магнитных характеристик наноструктурированных материалов и наноразмерных систем, а также современных программных средств при выполнении курсовых и дипломных работ и при проведении научных исследований.

6. Опубликованность результатов диссертации в научной печати

Основные научные результаты диссертации опубликованы в 18 научных работах, из которых 7 – статьи в рецензируемых научных изданиях в соответствии с п. 18 Положения о присуждении ученых степеней и присвоении ученых званий (общим объемом 4,2 авт. л.), 5 – статьи в сборниках материалов научных конференций (общим объемом 0,8 авт. л.), 6 – тезисы (общим объемом 0,6 авт. л.). 2 статьи в журнале «Доклады БГУИР» опубликованы без соавторов.

Полученные в диссертации результаты докладывались и обсуждались на Международных и республиканских конференциях: Международная научно-практическая конференция «Физика конденсированного состояния – ФКС-XXIII», Гродно, Республика Беларусь, 2015; 58th Scientific Conference for Students of Physics and Natural Sciences: Open Readings 2015, Vilnius, Lithuania, 2015;

Conference series on Advanced Nano Materials held annually at the University of Aveiro, Portugal 2018; 10-я Юбилейная Международная научно-практическая конференция по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ-электроники, Москва, 15-16 мая 2019 г; Междисциплинарный научный форум с международным участием «Новые материалы и перспективные технологии», Москва, Российская Федерация, 2019; XVI Международная научная конференция «Молодежь в науке 2019, Минск», Республика Беларусь, 2019; International Workshops on New Approaches to High-Tech: Nano-Design, Technology, Computer Simulations – NDTCS, Minsk, Belarus, 2017, 2021; IX International Scientific Conference, Actual Problems of Solid State Physics, Minsk, November 22-26, 2021; The 10th international workshop on advanced materials science and nanotechnology IWAMSN 2021 November 4–6, 2021

7. Соответствие оформления диссертации требованиям ВАК

Диссертация и автореферат оформлены в соответствии с Инструкцией о порядке оформления диссертации, диссертации в виде научного доклада, автореферата диссертации и публикаций по теме диссертации. Ссылки в тексте с указанием авторов и источников соответствуют требованиям п. 26 Положения о присуждении ученых степеней и присвоении ученых званий. Автореферат полностью соответствует тексту диссертации.

8. Соответствие научной квалификации соискателя ученой степени, на которую он претендует

Исследования Барановой М. С. по теме диссертации проводились в рамках государственных научно-технических программ, соответствующих перечню приоритетных направлений фундаментальных и прикладных научных исследований Республики Беларусь. Баранова М. С. показала, что способна творчески решать современные проблемы физики наноструктур, владеет современными методами исследований и обработки результатов, навыками проведения информационного поиска и анализа в области исследуемых материалов, процессов, закономерностей, явлений.

На основании этого можно утверждать, что научная квалификация Барановой М. С. полностью соответствует требованиям, предъявляемым к соискателям ученой степени кандидата физико-математических наук.

9. Замечания

1. На стр. 15 дано не совсем корректное определение «обменного взаимодействия». На стр. 44 используется жаргонный термин «ядерное притяжение электронов». На стр. 46 используется непонятный мне термин «электронное самодей-

ствие». На стр. 34 при классификации уровней исследования твердого тела ошибочно цитируется в качестве источника работа [90], которая не посвящена этому вопросу. Кроме того, у меня вызывает сомнение градация микроскопического уровня, на котором объектами исследования являются системы из атомов. Указан масштаб 1 мкм. По-видимому, здесь что-то не так с масштабированием.

2. Во 2-ой главе подробно описан алгоритм расчета структурных, электрических и магнитных свойств материалов MAX_3 и ничего не сказано про алгоритм, применявшийся для расчета параметров и свойств твердых растворов ZnO с переходными металлами.

3. В диссертационной работе не оценивался вклад в общую энергию магнитного взаимодействия энергии анизотропии формы. В низкоразмерных магнитных системах этот вклад может быть существенным и превышать, в том числе и намного, магнитокристаллическую энергию.

4. В диссертации не обоснован выбор гамильтониана Гейзенберга, а не Изинга для описания свойств низкоразмерных систем. Не обосновано должным образом применение модели Хаббарда сильно коррелированных электронов для описания свойств исследуемых элементов. Рост параметра Хаббарда может приводить к увеличению межатомного расстояния, что, в свою очередь, рано или поздно вызывает неустойчивость решетки. Известно ли, например, насколько увеличивалась постоянная решетки при выборе $U = 5$ эВ?

Указанные замечания не влияют на новизну и достоверность выносимых на защиту положений, полученных результатов и основных выводов и не снижают высокий научный уровень диссертации.

10. Заключение

Диссертационная работа Барановой Марии Сергеевны «Магнитный порядок и обменное взаимодействие в двумерных атомных структурах Ван-дер-Ваальсовского типа и твердых растворах ZnO с переходными элементами», подготовленная под научным руководством кандидата технических наук, доцента Стемпичко В. Р., является завершенной самостоятельно выполненной квалификационной работой. Ее содержание отвечает требованиям п. 21 Положения о присуждении ученых степеней и присвоении ученых званий, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Считаю, что Баранова Мария Сергеевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.16.08 – нанотехнологии и наноматериалы (по отраслям) за получение новых научных, теоретических результатов, включающих:

– развитие многоуровневого подхода исследования свойств низкоразмерных материалов типа MAX_3 , включающего квантовомеханическое моделирование

структурных, электронных и магнитных свойств, расчет энергии атомных структур для определения условий и механизмов формирования ферромагнитного порядка;

– установление механизмов и закономерностей формирования антиферромагнитного и ферромагнитного порядков в твердых растворах $ZnO:Me$ ($Me = Cr, Mn, Fe, Co, Ni$), определение количественных параметров этого взаимодействия;

– определение условий формирования высокотемпературного ферромагнитного порядка, до 129 К, в двумерных соединениях $CrGeSe_3$, $CrGeTe_3$, $CrSiSe_3$, $CrSiTe_3$ и до 287 К – в твердых растворах $ZnO:Cr$, $ZnO:Fe$, $ZnO:Co$ за счет увеличения вероятности прямого и суперобменного взаимодействия между атомными орбиталями разной симметрии;

– развитие модели обменного взаимодействия в двумерных MAX_3 материалах и твердых растворах ZnO с переходными металлами с квазиульмерной и квазиодномерной размерностью магнитного взаимодействия, учитывающей возможные механизмы прямого и суперобменного взаимодействия между различными атомными орбиталями, расчета суммарного интеграла обменного взаимодействия, на основании чего было установлено, что преобладающим механизмом является суперобменное взаимодействие,

что является существенным вкладом в физику низкоразмерных магнитных материалов, а именно, развивает представления о механизмах обменного взаимодействия, о связи ферромагнитных свойств с кристаллическими и электронными свойствами двумерных, квазиодномерных и квазиульмерных материалов и об электронных спин-зависимых процессах для целей спинтроники и наноэлектроники.

Официальный оппонент –
 профессор кафедры защиты информации
 учреждения образования «Белорусский
 государственный университет информатики
 и радиоэлектроники»,
 доктор физико-математических наук, профессор



С.Л. Прищепа

