

РЕЦЕНЗИЯ

за дисертационния труд “Квантови ефекти в наномагнитни спинови системи” (Quantum phenomena in nanomagnetic spin systems),
представен от Мирослав Пламенов Георгиев за придобиване на образователната и научна степен “доктор”, докторска програма „Физика на кондензираната материя“

Рецензент професор дфн Николай Стойчев Тончев, почетен член на ИФТТ -БАН

Дисертационният труд е написан на английски език и може условно да се раздели на две части. Част първа от 68 страници съдържа: Увод-описание на структурата на дисертационния труд, Глава 1, която е обзорна и посветена на различни квантови характеристики на магнитни системи и описващите ги спинови модели, които са важни за конкретното изследване, Глава 2, която е кратък обзор на някои въпроси от теорията на нееластичното неутронно разсейване, които се използват впоследствие и главите 3,4 и 5, които са основани на публикациите на докторанта. Глава 3 – наречена „Магнитен обменен модел“ е посветена на един от основните приноси – обобщение на метода на Хартри-Фок (в дисертацията наречен „post Hartree-Fock method”) построен на базата на молекулярните орбитали и приспособен за изследване на обменни ефекти в сложни молекулярни магнитни системи. В главите 4 и 5 се изследват конкретни магнитни системи, съответно съединението $A_3Cu_3(PO_4)$ ($A = Ca, Sr$ и Pb) и молекулярния магнит Ni_4Mo_{12} . Във втората част са включени два апендикса посветени на Нееластичното електронно разсейване и Обменния магнитен модел. Заедно със списъка на цитираната литература (170 публикации) обемът на дисертационния труд е 89 страници.

Тематика е актуална в теорията на наномагнетизма защото е свързана с изследването на конкретни магнитни системи с нетривиално поведение и интересно потенциално приложение. Поради своята сложност описанието на такива системи изисква знания в областта на физиката на кондензираната материя свързани с различни приближени теории (квантова механика на многочастични системи, теорията на

молекулярните орбитали, приближения на Хартри-Фок, Борн-Оперхаймер и др.) и компетентност в областта на експерименталните методи свързани с интерпретацията на данни получени чрез нееластично неутронно разсейване. В този смисъл избраната методика на изследване е напълно адекватна да реши поставените в дисертацията задачи. Изследванията на докторанта са теоретични по своя характер и изискват комплексни умения в различни области на математическата физика, квантовата механика и физиката на кондензираното състояние на материята които видно е г-н Георгиев е усвоил на едно много добро ниво. Методът на нееластичното неутронно разсейване играе основна роля при изследването на характерни магнитните свойства на магнитните спектри на веществата обусловени от тяхната структура. В дисертацията той е основен метод, успешно прилаган за намиране на връзката между разработваната от автора теория и наличните експериментални данни. Самата експерименталната реализуемост в реални системи и практическата приложимост на предложените в дисертацията модели е обект на детайлно изследване. Опитът за анализ на данните (получени чрез неутронна спектроскопия) за магнитните възбуждания от основното състояние за редица системи с необичайни магнитни свойства, в т.ч. и за разглежданите в дисертацията „тример“ $A_3Cu_3(PO_4)$ и „тетрамер“ Ni_4Mo_{12} , проведен в рамките на модела на Хайзенбер показва една непълнотата на описанието обусловена от фиксирането на електроните корелации. В действителност ситуацията е по-сложна и както е показано в дисертацията описанието в рамките на предложени тук ефективен спинов хамилтониан позволява да бъде разбрана причината за наблюдаваните в експеримента особености в поведението на интензитетите на нееластичното неутронно разсейване, намагнитването и магнитната възприемчивост.

Тук е необходимо да се направи една забележка от по-общ характер. Изследваните конкретни съединения представляват, от гледна точка на квантовата механика и статистическата физика, многочастични системи със сложни взаимодействия и със сложна характерна структура. Описанието им с необходимост предполага използване на приближения които трудно могат да бъдат оценени и даже понякога трудно обосновани от общотеоретична гледна точка. В конкретния случай, трябва да се оцени ролята на магнитната анизотропия, диполното приближение при отчитане на взаимодействията, важната нетривиална мостова структура в наномагнитите и др. За това връзката и

сравнението с експеримента е водеща при тяхното използване. Съблюдаването на мярка в използваните приближения изисква умение, което се наблюдава в дисертацията на разгледаните конкретни примери.

Например, при определянето на спектъра и функциите на състояние на хамилтониана (предложен в Гл.3) на нерелативиската система от електрони и ядра е предложен нов метод на базата на много-конфигурационно самосъгласувано поле, който е обобщение на приближения метод на Хартри-Фок и който отчита пълния набор от запълнени, активни и виртуални молекулярни орбитали и съответстващите на тях електронни конфигурации при нетривиални по структура междуатомни връзки. По нататък, предложените ефективни хамилтониани, съответно в главите IV и V, на базата на въведените в дисертацията оператори сигма са приноси в теорията на магнитните системи, защото позволяват адекватно описание на причините за експериментално наблюдаваните ефекти, свързани с възбужденията, разширенията и сковете в интензитета на нееластичното неутронно разсейване, поведението във външно магнитно поле и др.

Освен това, в случая, изборът на адекватна на експерименталната ситуация теоретична постановка е специфически трудна задача. Ще подчертая, че в дисертацията този избор е удачен по няколко причини: проблемът се решава в рамките на модели, които са максимално прости (собствените стойности и собствените функции се намират относително лесно), редица важни фактори (свързани с характера на взаимодействията между спиновете на наномагнита) са достъпни за аналитично изследване и като резултат са получени и обяснени интересни ефекти (напр. разтегнатата стъпаловидна структура на намагнитването в $\text{Ni}_4\text{Mo}_{12}$).

Резултатите са публикувани в 5 публикации. Във всичките г-н Георгиев е на първо място. Две от тях са публикувани в материали на конференции, една в електронния архив, и по една в Доклади на БАН и в Eur. Phys. J.

Дисертацията е в областта на фундаменталните изследвания. Видно е използването на развитата теория към описанието на експерименталните резултати получени за реални

магнитни системи, за това приносите биха могли да се определят като постигане на нови и разширяване на съществуващи знания с прилагане на методите на квантовата механика и теорията на кондензираната материя. Тематиката е актуална и може да се развива успешно и в бъдеще в различни направления на магнетизма и нанофизиката в това число и с подчертано приложен характер.

Критичните забележки касаят автореферата написан на български език. Той се чете по-трудно по две причини:

- Шрифтът е дребен, с необичайното (в българския език) използване на съществителни в качеството на прилагателни (напр. „спин димер съединения“, „спин център“, „спин сдвояване“, „спин единица магнитни центрове“, поставяне на глагола в края на изречението, използването на неясното словосъчетание „пост Хартри Фок метод“ и други езикови неточности от такъв характер.
- Структурата на автореферата не повтаря точно структурата на дисертацията. Той е написан с негови си параграфи построени по по-друга логика, а самата дисертация е по глави с параграфи озаглавени по друг начин. Вероятно авторът е счел, че така по-синтезирано представя получените резултати. Рецензентът счита, че стандартното представяне би било по-удачно. Разбира се авторефератът (на български) е написан на основата на дисертацията (написана на английски) и в основни линии отразява получените в нея резултати.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В дисертационния труд са получени оригинални научни резултати, които са важен принос в науката и отговарят на всички изисквания на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ) и Изисквания, условия, правила и решения, на Научния съвет на ИФТТ в допълнение към Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в БАН.

Ето защо, убедено давам положителна оценка на проведените изследвания, представени в рецензираните от мен дисертационен труд, автореферат и научни публикации и предлагам на почитаемото научно жури да даде образователната и научна

степен „доктор“ на асистент Мирослав Пламенов Георгиев по докторската програма
„Физика на кондензираната материя“.

15.06.2019

Рецензент:

/професор дфн Николай С. Тончев/