

Отзыв

На автореферат диссертации Свяжина А.Д. «Рентгеновские абсорбционные и эмиссионные спектры и локальная атомная и электронная структура сплавов и соединений на основе железа, кобальта и молибдена»

Работа посвящена изучению особенностей свободных d-состояний молибдена методом рентгеновской абсорбционной спектроскопии с высоким энергетическим разрешением на L_3 -крае молибдена, определению чувствительности полученных спектров к степени окисления и локальному окружению атомов молибдена, а также установлению возможности применения $K\alpha_{1,2}$ спектров к исследованию спиновых моментов атомов железа и кобальта в модельных соединениях, сплавах Гейслера на основе железа и нанопорошках $TiO_2:Co$.

Актуальность темы диссертационной работы определяется современными объектами исследования и широкими перспективами их применения в наукоемких технологиях. Соединения на основе молибдена находят применение во многих областях науки и технологии, поэтому необходимо иметь наиболее полную и достоверную информации об особенностях их атомного и электронного строения.

Рентгеновская спектроскопия поглощения (XAS) является одним из самых востребованных методов для получения информации о локальных электронных и структурных свойствах атомов.

В работе проведен целый комплекс исследований. Автор принимал непосредственное участие в разработке аппаратуры для измерения рентгеновских абсорбционных спектров. Им был разработан математический алгоритм настройки кристаллов анализаторов спектрометра TEXS. Были разработаны новые методики исследования. Проведено сопоставление рентгеновских абсорбционных и эмиссионных спектров сплавов переходных 3d и 4d металлов, полученных экспериментальным методом и теоретическими расчетами. Такой подход способствует развитию методов исследования строения вещества и выходу на качественно новый уровень понимания взаимосвязи физико-химических свойств материалов с их электронно-энергетическим строением.

Автором получен ряд новых результатов, представляющих научный и практический интерес, среди которых следует отметить следующие:

1. Выявлены закономерности изменения спектров поглощения молибдена на L_3 -крае в зависимости от геометрии локального окружения, состояния окисления и радиального упорядочения атомов вокруг поглощающего атома. Эти исследования важны для понимания свойств L_3 спектров других элементов 4d ряда.
2. Проведены расчеты электронной структуры и спектров поглощения, выявлено влияние потенциала остовой дырки и мультиплетных эффектов на форму получаемых спектров, а также числа электронов на 4d орбиталях на величину расщепления кристаллическим полем. Все это важно для понимания физических эффектов, оказывающих влияние на форму спектров. Полученные зависимости могут быть использованы для расчета спектров других 4d элементов.
3. Разработан количественный метод определения локальных магнитных моментов с помощью $K\alpha_{1,2}$ спектров. Показано, что с помощью $K\alpha_{1,2}$ спектров можно получить точные (в пределах $0,08 \mu_B$) значения локальных спиновых моментов атомов железа в металлических сплавах. В результате исследований установлено, что магнитные моменты на атомах железа в сплавах Гейслера Fe_2MeAl (где $Me=V...Ni$) имеют локализованный характер. Разработанный автором способ исследования локальных спиновых моментов 3d-элементов может быть применен для решения ряда физических задач при работе на лабораторных спектрометрах с источниками рентгеновского излучения низкой интенсивности, при изучении соединений с низким содержанием исследуемого элемента.

Диссертация Свяжина А.Д. представляет собой законченное исследование. Научные результаты, впервые полученные автором, имеют значение для физики

конденсированного состояния, важны для понимания процессов взаимосвязи физико-химических свойств материалов с их электронно-энергетическим строением. Полученные в работе экспериментальные данные будут способствовать развитию новых направлений в получении материалов с заданными свойствами.

Достоверность результатов, выдвинутых соискателем, основывается на согласованности данных эксперимента, полученных с использованием современной экспериментальной техники, и научных выводов.

Свяжин А. Д. имеет 7 научных работ по теме диссертации в научных изданиях, 4 из них в журналах, включенных в международные базы данных Scopus и Web of Science, результаты докладывались на научной сессии ИФМ УрО РАН г. Екатеринбург, 2015 и 4 Международных конференциях.

В целом, по объему выполненной работы, актуальности полученных результатов, новизне и значимости основных положений, выносимых на защиту, диссертация удовлетворяет требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней», предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а ее автор Свяжин Артем Дмитриевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

15 августа 2023

Согласна на обработку персональных данных

И.Н. Шабанова

Шабанова Ирина Николаевна,

Главный научный сотрудник,

ОФХП ФТИ УдмФИЦ УрО РАН

доктор физ-мат. наук по специальности

01.04.07 – физика твердого тела,

профессор

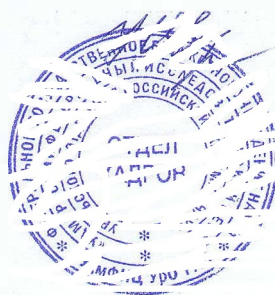
Адрес: 426067, г. Ижевск, ул. им. Т. Барамзиной, 34

Тел.: 9(3412)430302, e-mail: xps@udman.ru

Подпись Шабановой И.Н. заверяю

Специалист по кадрам 1 категории

Н.Н. Черных



С отрывком ознакомлен 22.08.2023г.

Свяжин А. Д.