

**Аспирант 2 года обучения Таран Леонид Сергеевич
лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем**

Научный руководитель – д.ф.-м.н., член-корр. РАН,
Стрельцов Сергей Владимирович

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Тема работы – Применение расчётов на основе теории функционала плотности для исследования систем с большим числом атомов (более 100)

**Аспирант 2 года обучения Таран Леонид Сергеевич
лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем**

Задача текущего года

Оценить параметры одноионной анизотропии мономолекулярного магнетика $(\text{PPh}_4)_2[\text{ReF}_6] \cdot \text{H}_2\text{O}$ и аналогичного с ним $[\text{Zn}(\text{viz})_4(\text{ReF}_6)]$; определить магнитный и орбитальный порядок, вычислить значения параметров обменного взаимодействия в двойном перовските $\text{Pb}_2\text{CuMoO}_6$.

Результаты, полученные в текущем году

1. $(\text{PPh}_4)_2[\text{ReF}_6] \cdot \text{H}_2\text{O}$ и $[\text{Zn}(\text{viz})_4(\text{ReF}_6)]$ имеют лёгкую плоскость намагничивания.
2. Параметры одноионной анизотропии D составляют 11,7 и 16,8 К соответственно.
3. По результатам проделанной работы опубликована статья.
4. Определены орбитальный и магнитный порядки $\text{Pb}_2\text{CuMoO}_6$.
5. Параметр обменного взаимодействия цепочек $J_1 = 15$ К, межцепочечного обменного взаимодействия под прямым углом $J_2 = J_3 = 0,9$ К. Ожидаются результаты межцепочечных обменов вдоль осей.

Аспирант 2 года обучения Таран Леонид Сергеевич
лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем

Апробация работы

Статьи

1. **L.S. Taran**, V.Y. Elfimova, S.V. Streltsov. Magnetic Anisotropy of Single-ion Magnet $(\text{PPh}_4)_2[\text{ReF}_6] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ // JETP Letters. — 2023. — V. 117. — P. 606—611 (CA(core), Scopus, Springer, WoS(SCIE), РИНЦ)

Тезисы докладов на всероссийских конференциях

1. Л.С. Таран, В.Ю. Елфимова, С.В. Стрельцов. Изучение одноионной магнитной анизотропии в мономолекулярном магнетике $(\text{PPh}_4)_2[\text{ReF}_6] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. Тезисы докладов. XXII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-22) памяти М.И. Куркина, г. Екатеринбург, 2022. с. 280
2. Л.С. Таран, С.В. Стрельцов. Орбитальный порядок в двойном перовските $\text{Pb}_2\text{CuMoO}_6$. Сборник тезисов. XX конференция сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления (СКЭС-2023). ФИАН(Москва), 2023, с. 116

**Аспирант 2 года обучения Таран Леонид Сергеевич
лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем**

Экзамены

Экзамен по истории и философии науки

Сдан – «Отлично»

Участие в грантах

Проект РНФ № 20-62-46047 «Влияние спин-орбитального взаимодействия на орбитальные, спиновые и решеточные степени свободы в соединениях переходных металлов» (закончен)

Руководитель – Стрельцов С.В., доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН

Степень участия – исполнитель

Проект РНФ № 23-42-00069 «Синтез под высоким давлением полуметаллических ферромагнетиков с выдающимися характеристиками и связанные с ними физические механизмы»

Руководитель – Ирхин В.С., доктор физико-математических наук

Степень участия – исполнитель

**Аспирант 2 года обучения Таран Леонид Сергеевич
лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем**

Проект РНФ № 23-12-00159 «Китаевские магнитные материалы»

Руководитель – Стрельцов С.В., доктор физико-математических наук,
член-корреспондент РАН

Степень участия – исполнитель

Выступления на конференциях

Сделано докладов

устных – 1 (СПФКС-22)

стендовых – 1 (СКЭС-2023)

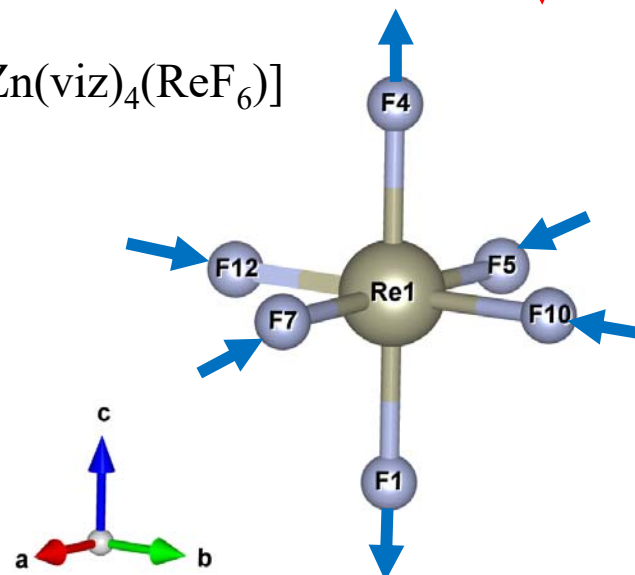
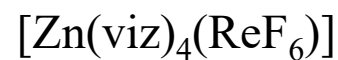
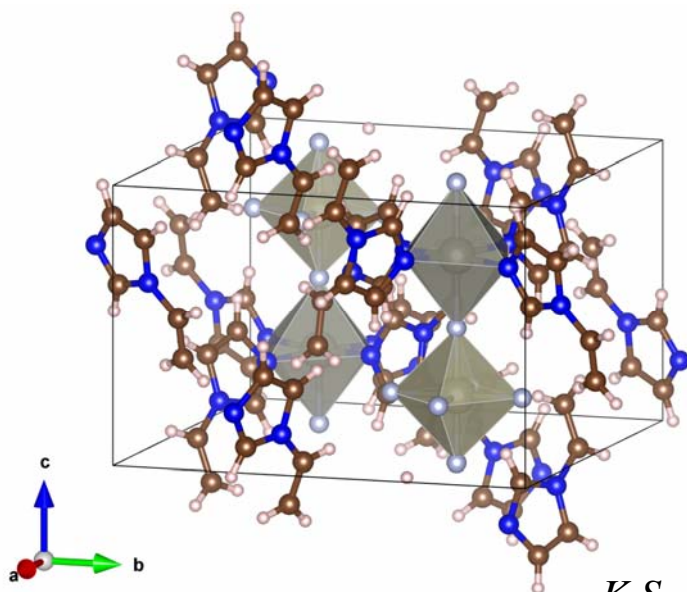
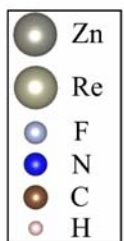
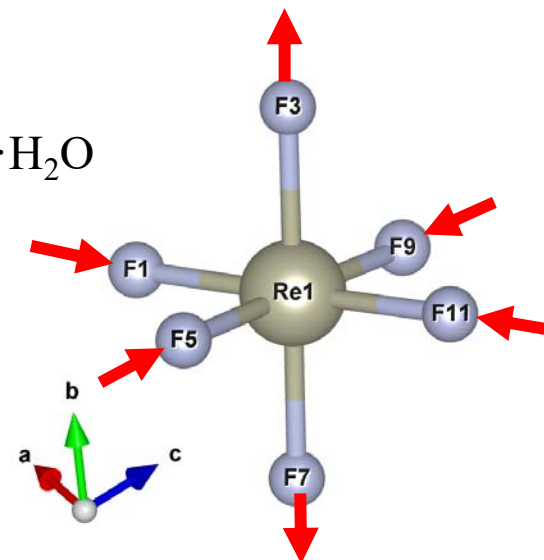
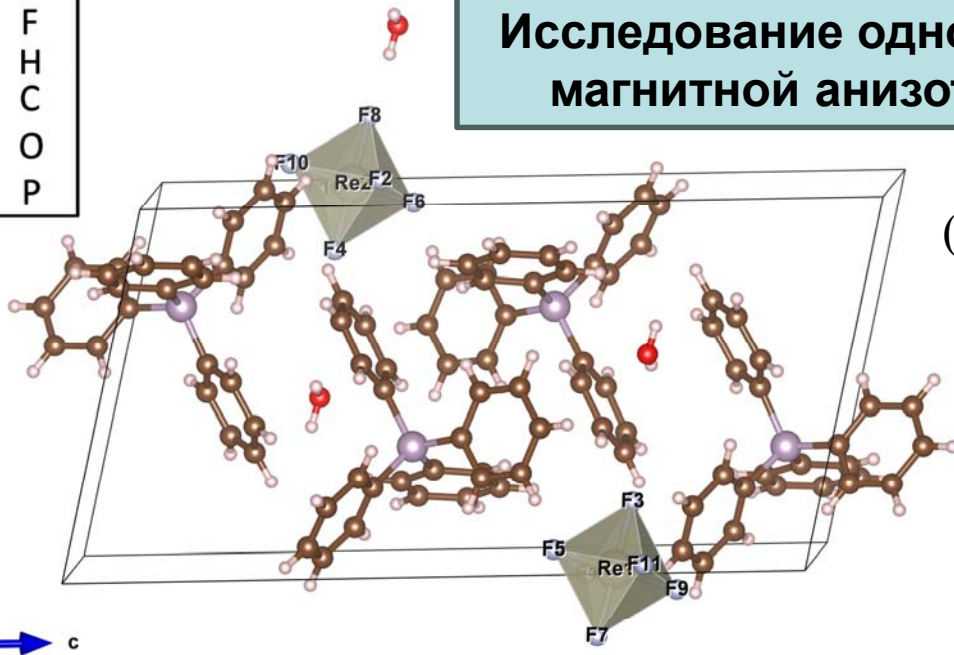
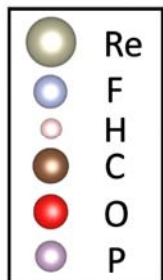
**Аспирант 2 года обучения Таран Леонид Сергеевич
лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем**

Таблица показателей (общий)

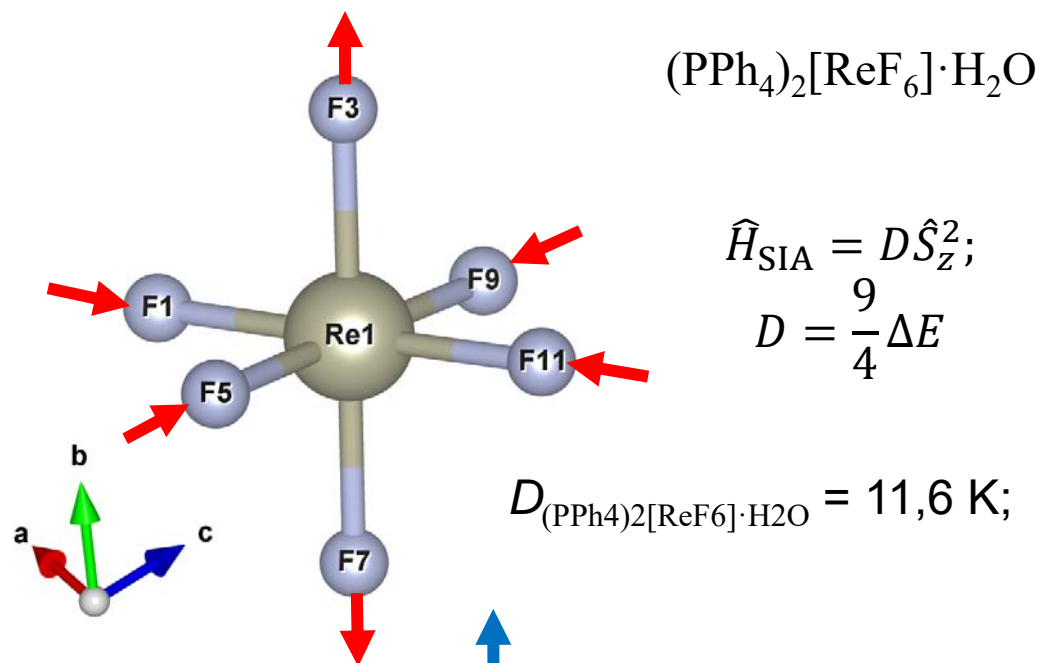
Показатель	Баллы	1 год		2 год		Итого баллов
		Кол-во	баллы	Кол-во	Баллы	
публикации в изданиях ВАК (вышедшие из печати)	20	1	20	1	20	40
публикации в изданиях ВАК (принятые в печать)	5	0	0	0	0	0
свидетельство о программах для ЭВМ, зарегистрированных в установленном порядке	20	0	0	0	0	0
патент	20	0	0	0	0	0
соавторство в монографии	5	0	0	0	0	0
оформленное ноу-хау	5	0	0	0	0	0
публикации в других изданиях (не тезисы)	2	0	0	0	0	0
тезисы доклада на международной конференции	5	0	0	0	0	0
тезисы доклада на российской конференции	3	0	0	2	6	6
участие в конференции с устным докладом	2	0	0	1	2	2
участие в конференции со стендовым докладом	1	0	0	1	1	1
сданный на «отлично» кандидатский экзамен	20	1	20	1	20	40
сданный на «хорошо» кандидатский экзамен	15	0	0	0	0	0
сданный на «удовлетворительно» кандидатский экзамен	10	0	0	0	0	0
участие в грантах в качестве: исполнителя	5	0	0	3	15	15
участие в грантах в качестве: руководителя	10	0	0	0	0	0
Общая сумма			40		64	104

Аспирант 2 года обучения Таран Леонид Сергеевич
 лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем

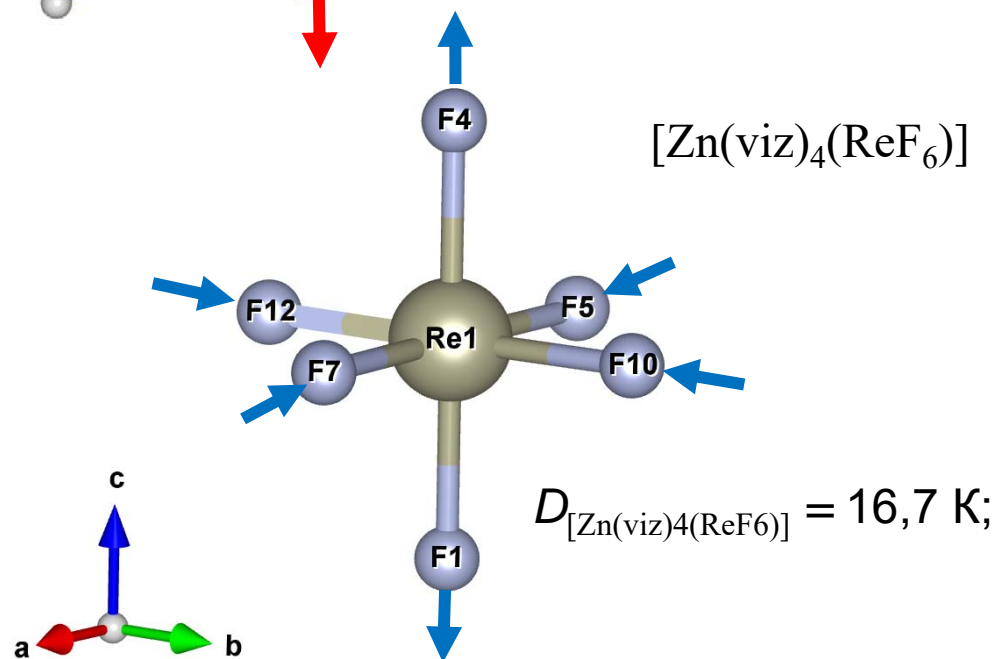
Исследование одноионной
 магнитной анизотропии



Аспирант 2 года обучения Таран Леонид Сергеевич
 лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем

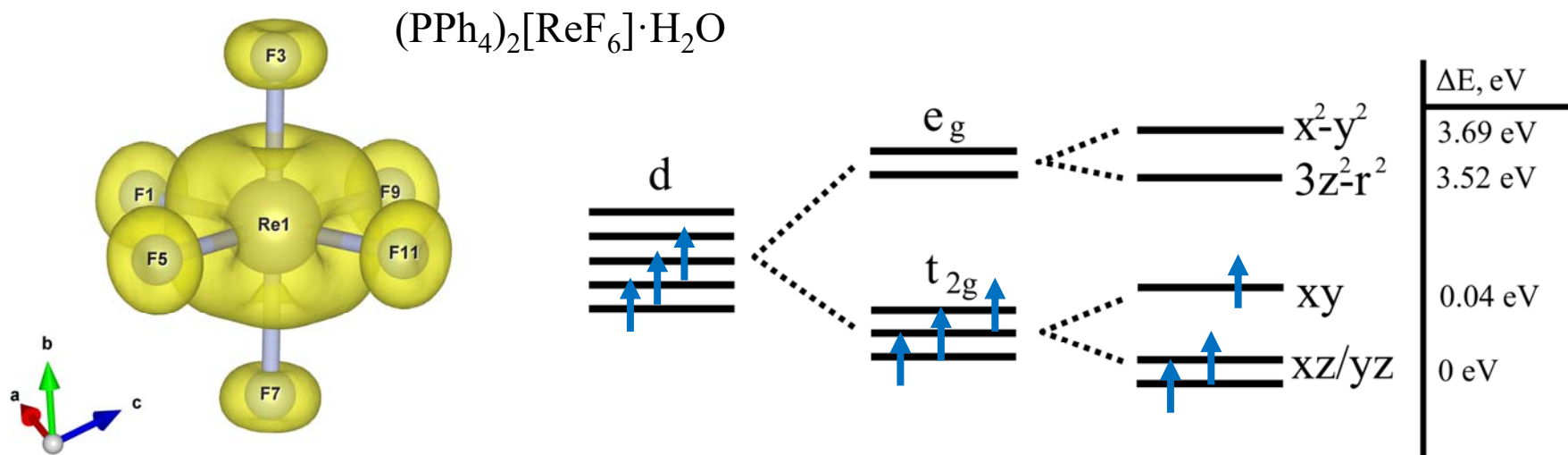


Направление	$\Delta E, \text{ K}$	m_s, μ_B	m_l, μ_B
Re1-F11	0,00	2,67	0,09
Re1-F9	4,02	2,67	0,09
Re1-F5	4,14	2,67	0,09
Re1-F1	5,26	2,67	0,09
Re1-F3	25,87	2,68	0,08
Re1-F7	26,22	2,68	0,08







Направление	$\Delta E, \text{ K}$	m_s, μ_B	m_l, μ_B
Re1-F5	0,00	2,67	0,1
Re1-F7	0,00	2,67	0,1
Re1-F10	0,00	2,67	0,1
Re1-F12	0,00	2,67	0,1
Re1-F1	37,80	2,68	0,08
Re1-F4	37,81	2,68	0,08

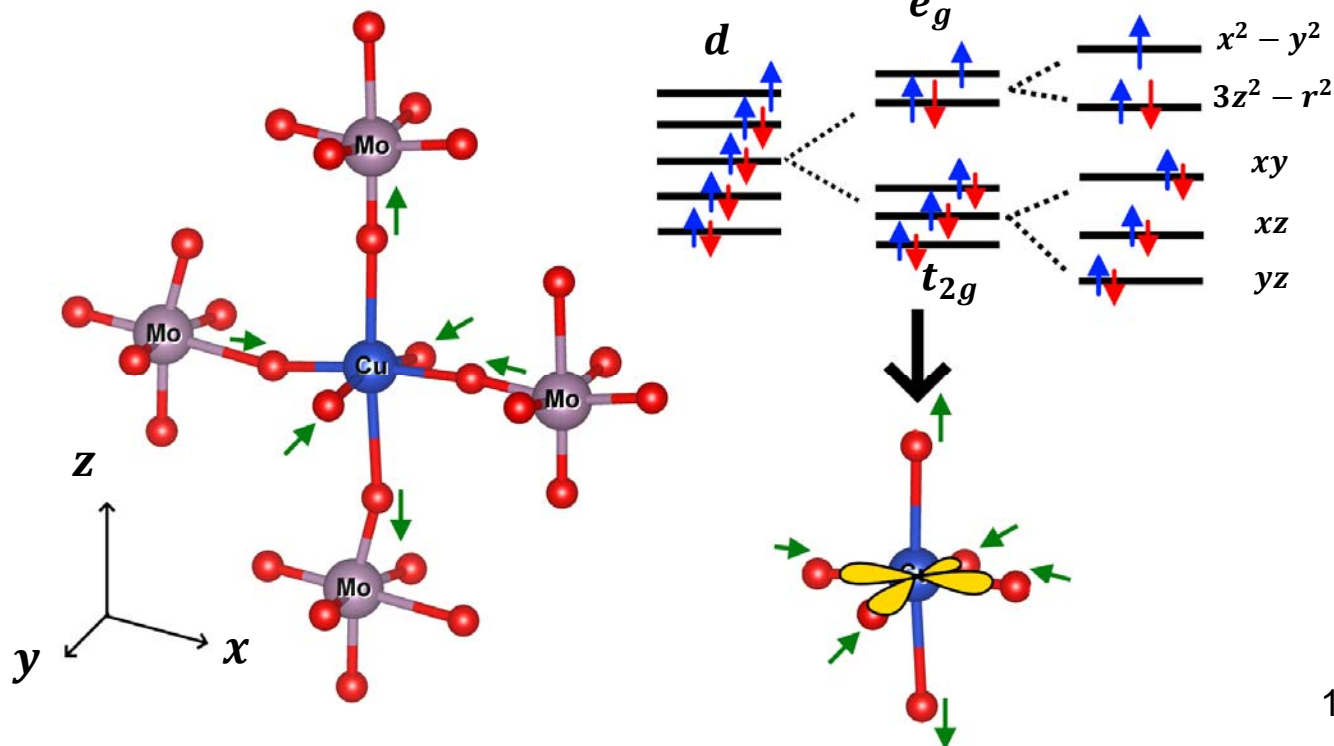
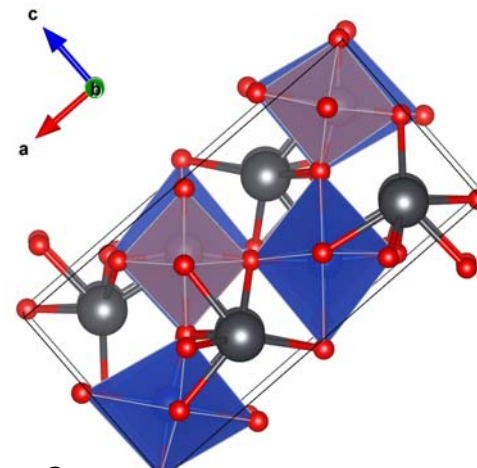
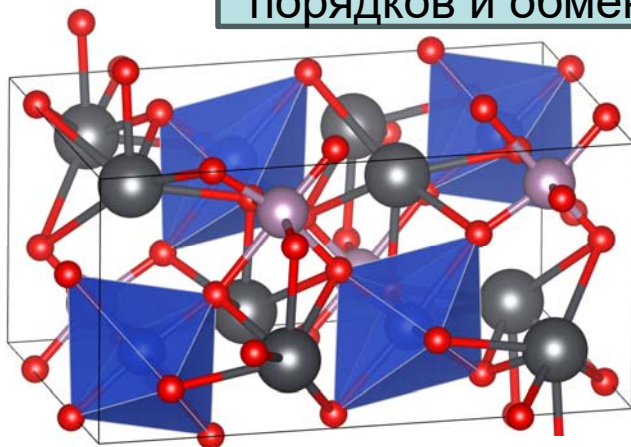
Аспирант 2 года обучения Таран Леонид Сергеевич
 лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем



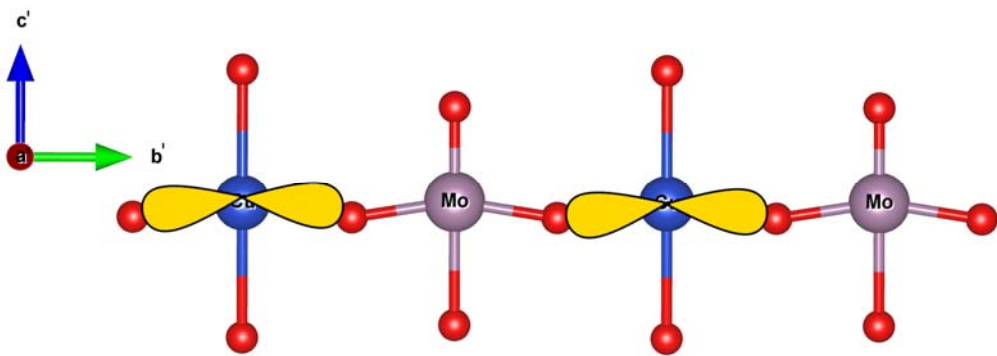
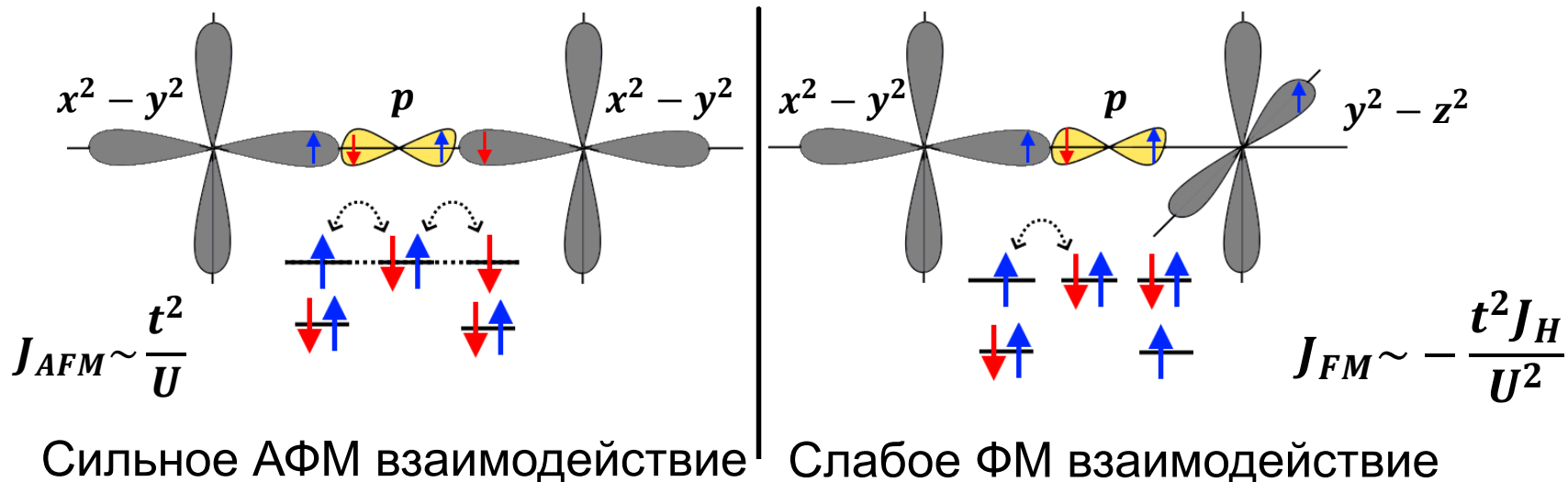
Аспирант 2 года обучения Таран Леонид Сергеевич
 лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем

Исследование орбитального, магнитного
 порядков и обменного взаимодействия

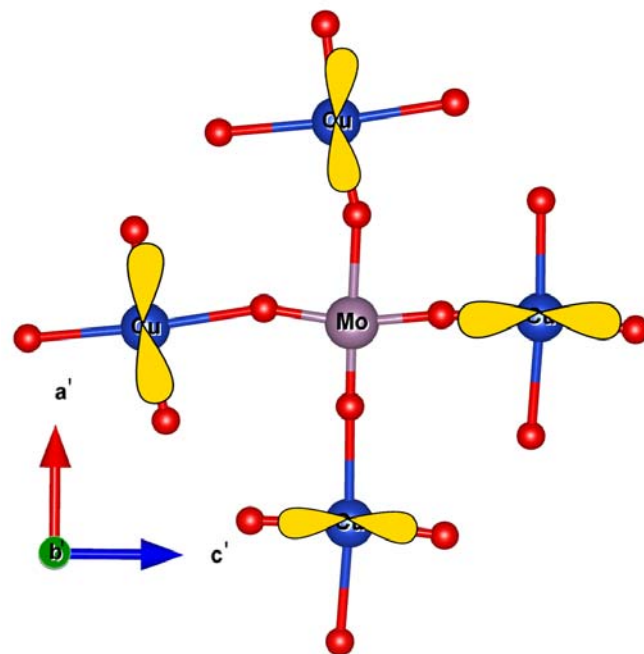
-  Pb
-  Cu
-  Mo
-  O



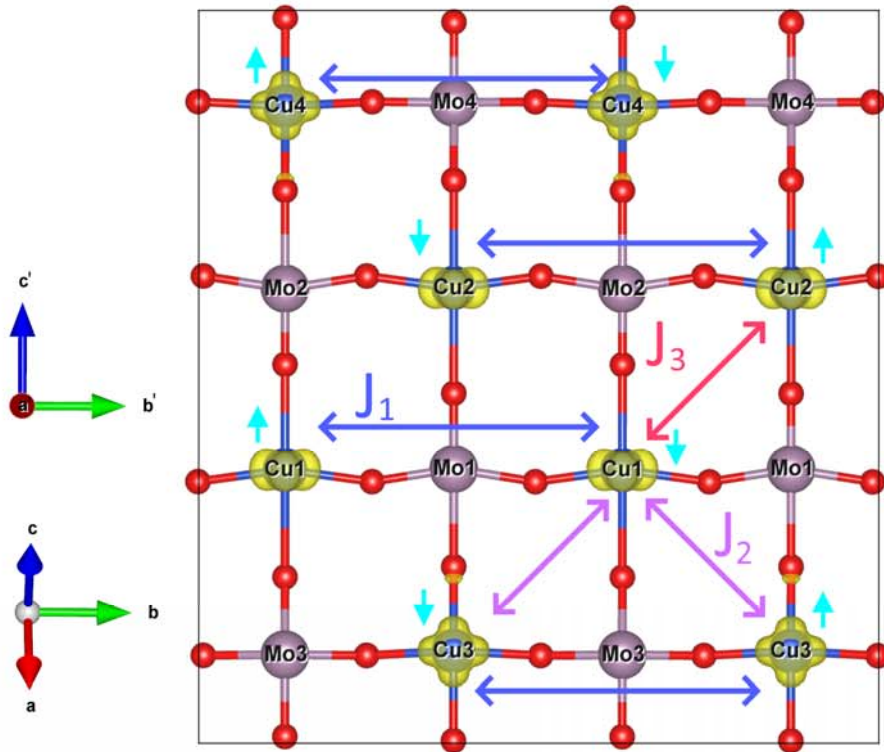
Аспирант 2 года обучения Таран Леонид Сергеевич
 лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем



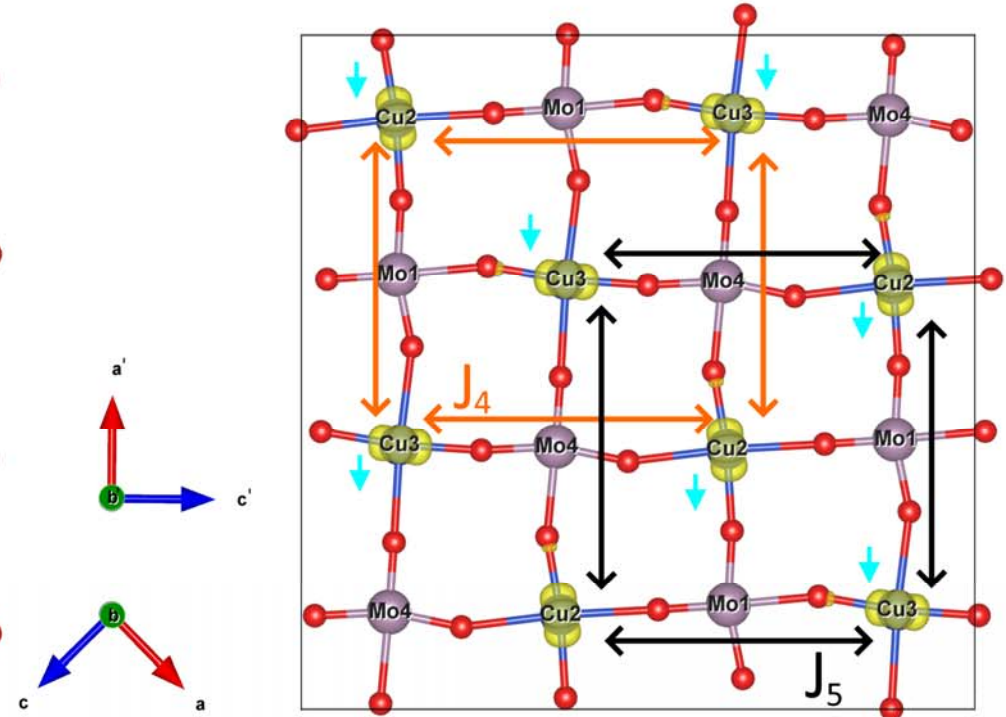
Сильное обменное взаимодействие
 в цепочках по оси b'



Аспирант 2 года обучения Таран Леонид Сергеевич
 лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем



$$J_{12} = \frac{E_1 + E_4 - E_2 - E_3}{4S^2}$$



$$J_1 = 15,7 \text{ K};$$

$$J_2 = J_3 = 0,9 \text{ K}.$$

Ожидается получение J_4 и J_5 .

**Аспирант 2 года обучения Таран Леонид Сергеевич
лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем**

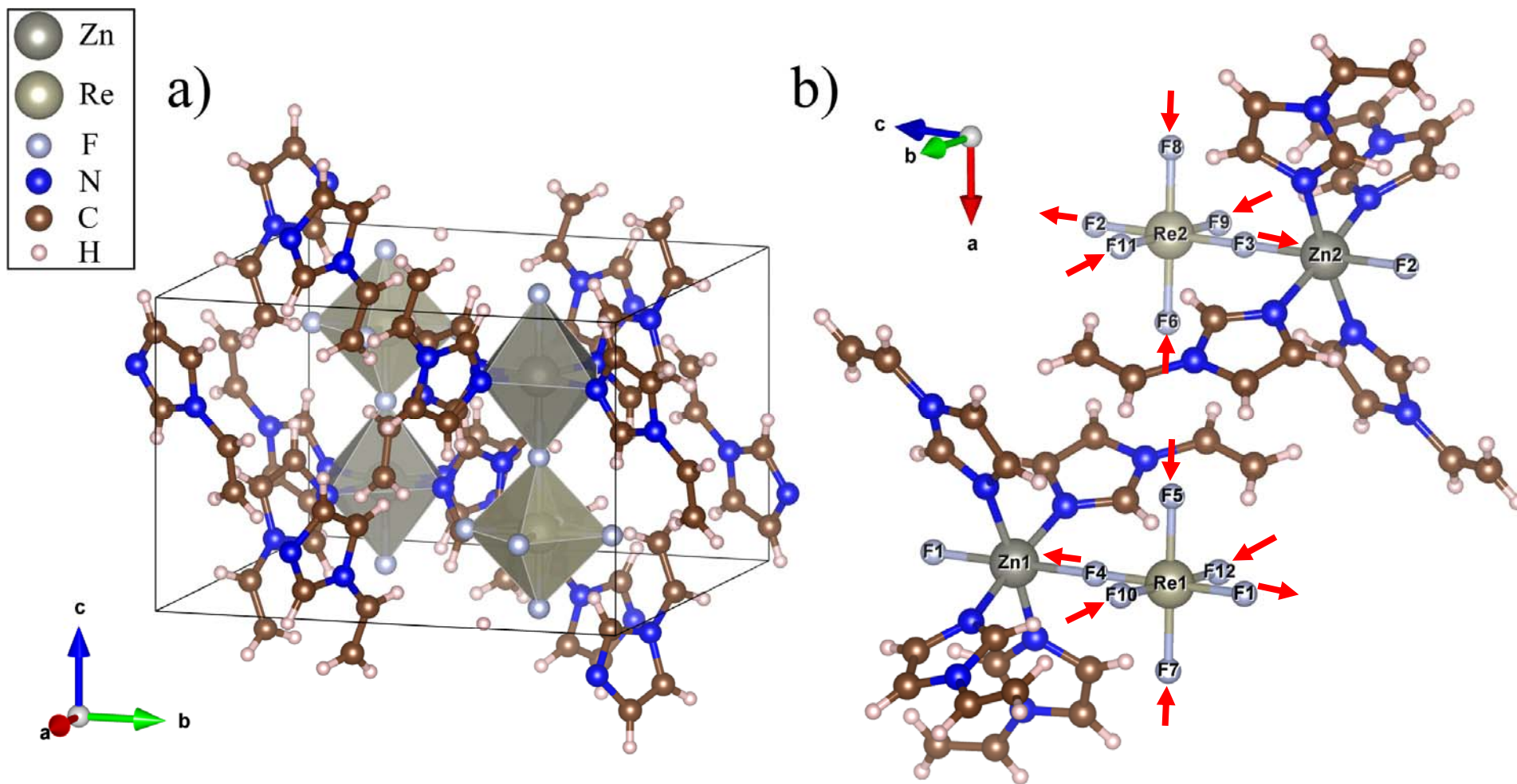
Заключение

1. С помощью первопринципных расчётов определена лёгкая плоскость намагничивания в $(\text{PPh}_4)_2[\text{ReF}_6] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $[\text{Zn}(\text{viz})_4(\text{ReF}_6)]$;
2. Вычислены параметры $D_{(\text{PPh}_4)_2[\text{ReF}_6] \cdot 2\text{H}_2\text{O}} = 11,7 \text{ K}$,
 $D_{[\text{Zn}(\text{viz})_4(\text{ReF}_6)]} = 16,8 \text{ K}$;
3. Результаты опубликованы в журнале *Jetp Letters* **117**, 606–611 (2023);
4. Определены магнитный и орбитальный порядки в $\text{Pb}_2\text{CuMoO}_6$;
5. Вычислены параметры обменного взаимодействия $J_1 = 15,7 \text{ K}$, $J_2 = J_3 = 0,9 \text{ K}$ для $\text{Pb}_2\text{CuMoO}_6$;
6. По результатам работы готовится статья.

**Аспирант 2 года обучения Таран Леонид Сергеевич
лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем**

**БЛАГОДАРЮ ЗА ВНИМАНИЕ!
ГОТОВ ОТВЕТИТЬ НА ВАШИ ВОПРОСЫ**

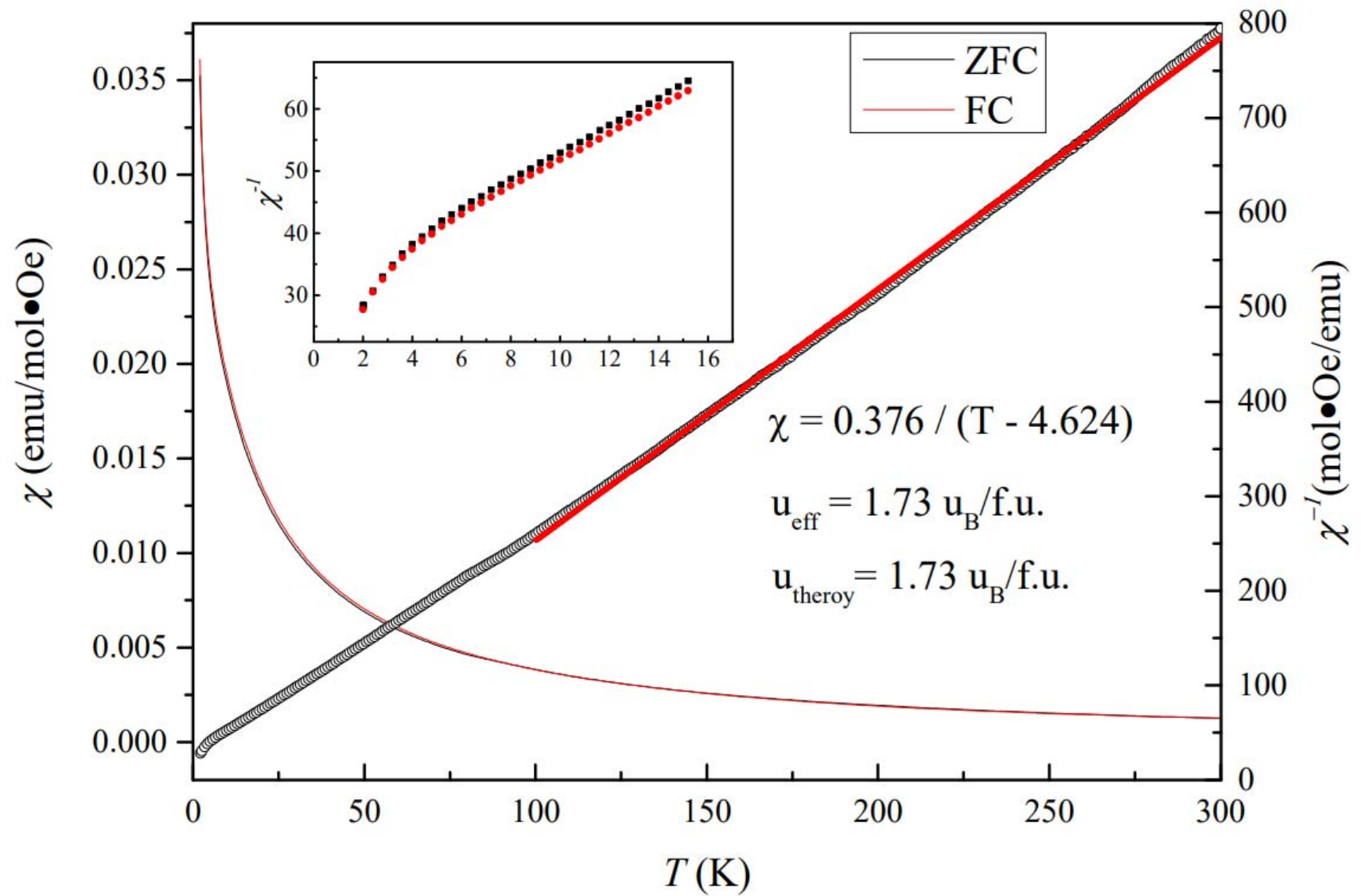
Аспирант 2 года обучения Таран Леонид Сергеевич
лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем



Метод 4 конфигураций

- $E_{\text{спин}} = J_{12}S_1 \cdot S_2 + S_1 \cdot K_1 + S_2 \cdot K_2 + E_{\text{др}}$
- $K_1 = \sum_{i \neq 1,2} J_{1i}S_i$, $K_2 = \sum_{i \neq 1,2} J_{2i}S_i$, и $E_{\text{др}} = \sum_{i,j \neq 1,2} J_{ij}S_i S_j$
- 1) $S_1^Z = S, S_2^Z = S$; 2) $S_1^Z = S, S_2^Z = -S$;
- 3) $S_1^Z = -S, S_2^Z = S$; 4) $S_1^Z = -S, S_2^Z = -S$;
- $E_1 = E_0 + E_{\text{др}} + J_{12}S_2 + K_1S + K_2S$,
- $E_2 = E_0 + E_{\text{др}} - J_{12}S_2 + K_1S - K_2S$,
- $E_3 = E_0 + E_{\text{др}} - J_{12}S_2 - K_1S + K_2S$,
- $E_4 = E_0 + E_{\text{др}} + J_{12}S_2 - K_1S - K_2S$.

Аспирант 2 года обучения Таран Леонид Сергеевич
лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем



Аспирант 2 года обучения Таран Леонид Сергеевич
лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем

