

## ОТЗЫВ

**официального оппонента о диссертации П.А. Агзамовой «Сверхтонкие взаимодействия в оксидах  $3d^1$  переходных металлов со структурой перовскита и пироклора» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.11 – физика магнитных явлений**

Диссертация написана на **актуальную** тему. Магнитные свойства соединений с ионами группы железа, находящимися в орбитально невырожденных состояниях довольно основательно изучены. Интерес современных исследователей естественным образом сместился на выяснение особенностей магнитных свойств систем с орбитальным вырождением. Проблема эта довольно сложная и привлекает повышенное внимание, о чем свидетельствуют публикации в ведущих зарубежных журналах.

В первой главе диссертации приведен литературный обзор. Освещены современные работы по проблеме орбитального упорядочения. Особый акцент сделан на проблему состояния орбитальной жидкости, которой в последние годы посвящен ряд как теоретических, так и экспериментальных работ. В этой связи исследование сверхтонких взаимодействий в титанатах и ванадатах – декларированных рядом авторов (Халиуллин и др.) в число потенциальных кандидатов в орбитально жидкостные системы – безусловно является интересным. Дан обзор кристаллических структур  $RTiO_3$  и  $Lu_2V_2O_7$  и предварительные сведения о проблеме основных состояний магнитных ионов в этих соединениях. Приведена фазовая диаграмма критических температур магнитного упорядочения в соединениях  $RTiO_3$  с различными редкоземельными ионами ( $R=Yb, Y, Gd, Sm, Nd, La$ ). Поясняются типы магнитных упорядочений в этих соединениях. Приводятся результаты экспериментальных исследований сверхтонких полей методом ядерного магнитного резонанса. Материал изложен достаточно четко, что свидетельствует о высокой квалификации автора. Приводятся ссылки на результаты предшествующих расчетов частот квадрупольного резонанса ядер  $^{139}La$  и  $^{49}Ti$ .

Вторая глава содержит краткое описание так называемых первопринципных методов расчета по различным пакетам программ, освоенных автором диссертации. Обсуждается вид базисных функций для различных электронных состояний ионов ванадия, кислорода, лантана и иттрия, которые в последующих главах 3 и 4 используются для анализа сверхтонких и перенесенных сверхтонких полей.

Результаты, представленные в диссертации обладают **новизной**.

Особенно интересными являются результаты численных расчетов, приведенные в Таблице 4.1. Они позволили довольно точно воспроизвести изменения параметров решетки в соединениях типа  $RTiO_3$  при замене одного редкоземельного иона на другой. На Рис. 4.1 демонстрируется, что первопринципные методы расчета позволяют объяснить также особенности ромбических искажений кристаллической решетки при изменении ионного радиуса редкоземельного иона. На основе численных расчетов предсказывается характер изменения параметров изотропного и анизотропного сверхтонкого взаимодействия, а также частоты квадрупольного резонанса на ядрах титана в ряду соединений  $RTiO_3$ . Параллельно с численными расчетами в диссертации проведены аналитические расчеты, которые автор квалифицирует как модельные. В этом плане в диссертации выделяются результаты расчета угловой зависимости спектров ЯМР на ядрах титана, приведенные на Рис. 3.5. Соответствие результатов экспериментальным данным свидетельствует о корректности принятых представлений о характере взаимного упорядочения 3d-орбиталей ионов ванадия в  $Lu_2V_2O_7$ . Расчет локальных полей проведен с учетом особенностей магнитных структур.

Замечания.

1. В целом диссертация написано хорошо и легко читается. Хотя, конечно, встречаются опечатки. На стр. 33, в выражениях (1.7), (1.8) и поясняющем тексте имеется странная несогласованность в определении параметра обменного взаимодействия, на стр. 116 вместо номера формулы



(4.25) должно быть (4.24), на стр. 110 вместо номера (1.7) должно быть (1.6), не указан автор работы [167] в списке литературы.

2. Для лучшего понимания роли перенесенных сверхтонких полей в общем анизотропном поле желательно было бы привести значения локальных полей, рассчитанных по классической формуле для магнитных диполей.

3. Расчет локальных полей на ядрах Y и La выполнен в рамках метода молекулярных орбиталей, разработанного для анализа наведенных (transferred) сверхтонких взаимодействий на ядрах ближайших диамагнитных анионов. Справедливость такого приближения для меня не вполне очевидна. На стр. 109 диссертации имеется предложение «Здесь и далее мы будем полагать, что ближайшими к магнитным ионам лантана и иттрия являются ионы титана, и, следовательно, в таком приближении, хотя и достаточно грубом, сверхтонкие взаимодействия на ядрах  $^{139}\text{La}$  и  $^{89}\text{Y}$  мы будем считать неведенными». Это предложение свидетельствует о том, что автор понимает, что этот вариант не вполне подходит для расчета суперперенесенных сверхтонких взаимодействий на ядра  $^{139}\text{La}$  и  $^{89}\text{Y}$ . Это «грубое приближение» желательно было бы проверить или как-то обосновать. Например, привести картину распределения электронной плотности 3d-электрона вместе с изображением позиций кислородов и La (Y), или провести сопоставление рассчитанных интегралов перекрывания в парах Ti-La и Ti-Y с произведениями квадратов коэффициентов  $\lambda$  для антисвязывающих орбиталей Ti-O на квадрат соответствующего интеграла перекрывания на связях O-La и O-Y.

Как видно приведенные замечания, носят характер пожеланий и не меняют общей положительной оценки результатов диссертационной работы. Результаты диссертации опубликованы в 5 рецензируемых журналах и обсуждались на ряде конференций. Автореферат соответствует содержанию диссертации.

Содержание диссертации соответствует пункту 1 «разработка теоретических моделей, объясняющих взаимосвязь магнитных свойств веществ с их электронной и магнитной структурой, природу их магнитного состояния, характер атомной и доменной магнитной структур, изменение магнитного состояния и магнитных свойств под влиянием различных внешних воздействий» паспорта научной специальности 01.04.11 – физика магнитных явлений. Работа по своему научному уровню, знанию и достоверности полностью соответствует требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, и удовлетворяет всем требованиям п. 9 «положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года с изменениями от 21 апреля 2016 г. № 335. Считаю, что Агзамова П.А. достойна ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.11 – физика магнитных явлений.

Профессор кафедры

Квантовой электроники и радиоспектроскопии

Казанского (Приволжского) федерального университета

доктор физ.-мат. наук, профессор

meremin@kpfu.ru,


телефон (843) 2315116

420008, Россия, РТ,

г. Казань, ул. Кремлевская, д.18.

22.05. 2017 г.

Еремин Михаил Васильевич

 *Еремин Михаил Васильевич*  
*Ученый секретарь / Усманова В.Р.*

*С отзовом ознакомила*  
*29.05.2017* *Агзамова П.А.*



## Сведения об официальном оппоненте

Еремин Михаил Васильевич, доктор физико-математических наук, профессор кафедры Квантовой электроники и радиоспектроскопии, Федеральное государственное автономное учреждение высшего профессионального образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет», 420008, Россия, РТ, г. Казань, ул. Кремлевская, д. 18  
Тел.: +7(843) 231-51-16,  
e-mail: [meremin@kpfu.ru](mailto:meremin@kpfu.ru)

Еремин Михаил Васильевич является специалистом в области физики конденсированного состояния и теоретической физики и имеет **публикации в сфере исследований, которым посвящена диссертация:**

1. Jahn-Teller induced nematic orbital order in tetragonal  $\text{Sr}_2\text{VO}_4$  [Текст] / J. Teysier, E. Giannini; A. Stucky; R. Cerny; M.V. Eremin; D. van der Marel // Physical Review B. – 2016. – V. 93. – P. 125138.
2. Schaile. S. ESR evidence for partial melting of the orbital order in  $\text{LaMnO}_3$  below the Jahn-Teller transition [Текст] /S. Schaile, H.-A. Krug von Nidda, J. Deisenhofer, M.V. Eremin, Y. Tokura, A. Loidl // Phys. Rev B. -2014. -V.54, P. 154424 .
3. Iglamov, V.V. Orbital Order Fluctuations in  $\text{KCuF}_3$  [Текст] / V.V. Iglamov, M.V. Eremin // Optics and Spectroscopy. – 2016. – V. 116, ;№ 6. – P. 828-831
4. Trokiner, A. Melting of the orbital order in  $\text{LaMnO}_3$  probed by NMR/ A. Trokiner, S. Verkhovskii, A. Gerashenko, Z. Volkova, O. Anikeenok, K. Mikhalev, M. Eremin, and L. Pinsard-Gaudart // Phys. Rev. B.-2013. V.- 87.-P. 125142 (6pp) .

Не является членом экспертного совета ВАК.

Ученый секретарь ИФ К(П)ФУ,  
доктор физ.-мат. наук, профессор

Ю.Н. Прошин

*Подпись Прошина Ю.Н. заверено  
Секр. по УМР / Шайхутдинов*

