

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Агзамовой Полины Александровны «Сверхтонкие взаимодействия в оксидах $3d^1$ переходных металлов со структурами перовскита и пироклора», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.11 – физика магнитных явлений

Изучению магнетиков, содержащих орбитально вырожденные ионы, в настоящее время посвящено весьма значительное количество работ. Такие магнитные системы привлекают внимание прежде всего существованием сильного взаимодействия орбитальных степеней свободы с решётчными и спиновыми степенями свободы, благодаря чему соединения с орбитально вырожденными ионами демонстрируют весьма интересные магнитные свойства. Исследование влияния орбитальной степени свободы на магнетизм в таких соединениях является весьма актуальной задачей физики магнитных явлений. В этой связи **актуальность темы диссертации** П.А. Агзамовой, посвящённой изучению влияния орбитального упорядочения на сверхтонкие поля в оксидах переходных металлов со структурами перовскита и пироклора, содержащих подрешётку орбитально вырожденных ионов, не вызывает сомнений.

Диссертация П.А. Агзамовой состоит из введения, четырёх глав и заключения.

Во **введении** обосновывается актуальность темы диссертации, сформулированы цель, задачи, положения, выносимые на защиту, а также аргументируются научная новизна и научная и практическая значимость работы.

Первая глава посвящена литературному обзору. Обсуждаются вопросы кристаллической, орбитальной и магнитной структур исследуемых соединений – титанатов со структурами перовскита ($RTiO_3$, R – редкоземельный ион или Y) и ванадата $Lu_2V_2O_7$ со структурой пироклора. Особое внимание уделяется орбитальной структуре соединений, в частности, обсуждаются как классическая модель орбитального упорядочения, так и модель «орбитальной жидкости». Также в первой главе обсуждаются вопросы, касающиеся механизмов формирования сверхтонких полей как на ядрах магнитных, так и на ядрах немагнитных ионов и приводится обзор имеющихся в

литературе данных о параметрах сверхтонких взаимодействий, полученных как экспериментально методом ядерного магнитного резонанса, так и теоретически методами первопринципных расчётов и теории кристаллического поля.

Во **второй главе** диссертации даётся подробное описание первопринципных методов расчётов, применяемых автором к вычислению параметров сверхтонких взаимодействий на ядрах магнитных и немагнитных ионов в исследуемых соединениях.

В **третьей главе** приводятся результаты расчётов параметров сверхтонких взаимодействий на ядре ^{51}V в ванадате $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ со структурой пироклора как из первых принципов, так и с привлечением специально разработанного автором модельного подхода.

В **четвёртой главе** приводятся результаты первопринципных расчётов параметров сверхтонких взаимодействий на ядрах $^{47,49}\text{Ti}$ в титанатах $R\text{TiO}_3$ ($R = \text{La}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Y}$) со структурами перовскита, а также на ядрах ^{139}La в LaTiO_3 и ^{89}Y в YTiO_3 .

В **заключении** сформулированы выводы по диссертационной работе.

Результаты, полученные П.А. Агзамовой в диссертационной работе обладают **новизной**.

Наиболее интересными среди них, на мой взгляд, являются следующие:

1. На основе первопринципных расчётов установлено, что параметры изотропного и анизотропного сверхтонких взаимодействий на ядре V^{4+} в $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ близки по величине.
2. Расчёт распределения спиновой плотности вблизи ядра V^{4+} в $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ дал форму спиновой плотности, соответствующей заполнению a_{1g} орбитали, возникающей в результате тригонального искажения октаэдра VO_6 . Таким образом, найдено явное орбитальное упорядочение в пироклоровом ванадате.
3. Получена угловая зависимость спектров частот ядерного магнитного резонанса на ядрах ионов ванадия, хорошо согласующаяся с экспериментальными данными.
4. Для антиферромагнетика LaTiO_3 со слабым ферромагнитным моментом сверхтонкое магнитное поле на ядре немагнитного иона ^{139}La определяется анизотропным сверхтонким взаимодействием, связанным с антиферромагнитным G_z -вкладом, тогда как для ферромагнитного YTiO_3 сверхтонкое магнитное поле на ядре ^{89}Y определяется изотропным сверхтонким взаимодействием, вызванным ферромагнитной компонентой дальнего магнитного порядка.

Достоверность результатов, полученных П.А. Агзамовой в диссертационной работе, основана на точном учёте кристаллической пространственной симметрии, обоснованностью выбором расчётных схем, а также сравнением с экспериментальными данными.

Практическая значимость полученных результатов вытекает, в частности, из возможности применения разработанных П.А. Агзамовой теоретических моделей для расчётов сверхтонких полей на ядрах магнитных ионов ванадия в $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ и немагнитных ионов лантана и иттрия в LaTiO_3 и YTiO_3 , учитывающих реальные кристаллические, орбитальные и магнитные структуры, к другим соединениям оксидов переходных металлов.

В ходе рассмотрения диссертации П.А. Агзамовой возникли следующие вопросы и замечания.

1. В диссертации ошибочно утверждается, что построенные карты спиновой плотности вокруг ядер ионов ванадия соответствуют орбитальному упорядочению типа d_{z^2} .

2. Гамильтониан сверхтонкого взаимодействия для ионов Ti^{3+} и V^{4+} желательно было записать в общем виде, содержащем орбитальные, спиновые и ядерные операторы, а затем уже усреднить его на функциях основного орбитального состояния указанных ионов.

3. На рис. 3.5. не указана температура, при которой экспериментально измерялись спектры ЯМР.

4. В научных публикациях, посвященных, в частности, анализу спектров ЭПР $3d$ -ионов в кристаллах, наряду со сверхтонкими взаимодействиями учитываются также и суперсверхтонкие взаимодействия. В первой главе диссертации на основании анализа литературных данных представляло бы несомненный интерес оценить вклад суперсверхтонких взаимодействий в сверхтонкие поля на ядрах Ti^{3+} и V^{4+} .

Указанные замечания касаются только возможно более чёткого изложения материала и не влияют на правильность полученных результатов.

Результаты работы имеют хорошую апробацию, поскольку доложены на многих всероссийских и международных конференциях и симпозиумах.

Автореферат полностью соответствует тексту 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», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года с изменениями от 21 апреля 2016 г. № 335. Считаю, что Агзамова Полина Александровна несомненно заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.11 – физика магнитных явлений.

Официальный оппонент,
ведущий научный сотрудник лаборатории
кинетики и статистики процессов ФГБУН ИМЕТ УрО РАН,
доктор физ.-мат. наук


Б.Л. Митрофанов

Почтовый адрес: 620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101
Тел.: (343) 267-91-24, 267-91-30
E-mail: vyam@mail.ru

Ученый секретарь ИМЕТ УрО РАН,
кандидат химических наук
5 июня 2017 г.



В.И. Пономарев

*Сотрудник аппарата
04.06.2017 г. - Агзамова*



Сведения об официальном оппоненте

Митрофанов Валентин Яковлевич, доктор физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния, ведущий научный сотрудник ФГБУН Институт металлургии УрО РАН, лаб. статики и кинетики процессов, 620016, Россия, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 101
Тел.: +7(343) 267-91-24, 267-91-30,
e-mail: vyam@mail.ru

Митрофанов Валентин Яковлевич является специалистом в области физики конденсированного состояния и имеет публикации в сфере исследований, которым посвящена диссертация:

1. М.А. Иванов, В.Я. Митрофанов, Л.Д. Фальковская, А.Я. Фишман, Б.С. Цукерблат, Электродипольное усиление интенсивности ЯМР в комплексах смешанной валентности // Письма в ЖЭТФ, **81**, 1, 18-21 (2005).
2. Lubov Falkovskaya, Anatolii Fishman, Valentin Mitrofanov, Boris Tsukerblat. Magneto-optical activity of spinel type crystals with complex mixed-valence lattice irregularities // Physical Letters A, **374**, 3067-3075 (2010).
3. L.D. Falkovskaya, A.Ya. Fishman, V.Ya. Mitrofanov and B.S. Tsukerblat. Faraday rotation caused by mixed valence centres in magnetic crystal // Solid State Phenomena, V. 168-169, P. 173-177 (2011).
4. Lubov Falkovskaya, Valentin Mitrofanov, Peculiarities of Magneto-optical Properties in Crystals with Mixed Valence Centers // in book Optical Lattices: Structures, Atoms and Solutions, Nova Publishers, USA, chapter 4 (2011).
5. A.M. Yankin, A.V. Fetisov, O.M. Fedorova, S.A. Uporov, V. Ya. Mitrofanov, Influence of oxygen non-stoichiometry on physical properties of $\text{NdSr}_2\text{Mn}_2\text{O}_{7\pm\delta}$ // Journal of Rare Earths, **33**, 282-288 (2015).
6. S.A. Uporov, V.Ya. Mitrofanov, O.M. Fedorova, A.M. Yankin, Influence of thermal processing on magnetotransport characteristics of $\text{NdSr}_2\text{Mn}_2\text{O}_{7\pm\delta}$ // Material Research Bulletin, **7**, 67 (2015).
7. S. Estemirova, V. Mitrofanov, G. Kozhina, A. Fetisov, Phase relationship, structural and magnetic properties of Nd-deficient $\text{Nd}_{0.95-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_{2.93\pm\delta}$ // Journal of Magnetism and Magnetic Materials doi:10.1016/j.jmmm.2015.09.056
8. S.A. Uporov, V.Ya. Mitrofanov, O.M. Fedorova, A.Ya. Fishman, Magnetic properties of mechanically activated SmMnO_3 powders // Journal of material science, **48**, 2, 7673-7678.T.A. (2013).

Не является членом экспертного совета ВАК.

Ученый секретарь ИМЕТ УрО РАН,
кандидат химических наук



В.И. Пономарев