

## ОТЗЫВ

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

Существование дополнительной, орбитальной, степени свободы в кристаллах привело к рождению таких новых областей науки и техники как «орбитальная физика» и «спин-орбитроника». Однако нахождение экспериментально измеряемых характеристик системы, на которых может быть однозначно установлено влияние орбитального упорядочения, представляет собой отдельную научную задачу. Поэтому актуальность темы диссертации П.А. Агзамовой, которая посвящена теоретическому анализу связи сверхтонких взаимодействий с орбитальными состояниями электронов ионов  $3d$ -переходных металлов в соединениях  $RTiO_3$  ( $R$  – редкоземельный ион или  $Y$ ) со структурой перовскита и  $Lu_2V_2O_7$  со структурой пироклора, не вызывает сомнений.

Отличительной чертой диссертационной работы П.А. Агзамовой является нахождение параметров магнитных сверхтонких взаимодействий, которые позволяют по спектрам ЯМР определять характер орбитального порядка, что показано на примере соединений, содержащих  $3d$ -ионы с орбитальным вырождением. Адаптация первопринципных методов к расчётам параметров электрических и магнитных сверхтонких взаимодействий наряду с получением микроскопических моделей этих взаимодействий с учётом пространственной симметрии и магнитной структуры исследуемых соединений определяют научную новизну диссертации П.А. Агзамовой.

В кратком отзыве перечислю, наиболее интересные с моей точки зрения результаты:

- 1) на основе первопринципных расчетов установлено, что параметры изотропного и анизотропного сверхтонких взаимодействий на ядрах  $^{51}V$  в  $Lu_2V_2O_7$  и  $^{47,49}Ti$  в  $RTiO_3$  близки по порядку величины, что необычно, так как изотропный вклад, как правило, много больше анизотропного;
- 2) на основе разработанной диссертантом микроскопической модели для количественной оценки параметров сверхтонких взаимодействий для соединения  $Lu_2V_2O_7$ , учитывающей симметрию орбитальных состояний электронов ионов  $V^{4+}$ ,

получено хорошее согласие с экспериментальными данными по угловой зависимости спектра ядерного магнитного резонанса, наблюдаемого на ядрах  $^{51}\text{V}$ . Такая модель может оказаться весьма полезной при проведении аналогичных исследований на других соединениях с орбитально вырожденными ионами.

Автреферат диссертации П.А. Агзамовой не лишён ряда недостатков:

- 1) непонятно, что подразумевалось автором под «варьированием доли нелокального хартри-фоковского обмена» в гибридных функционалах B3LYP и PBE0, в то время как результаты первопринципных расчётов приводятся для доли хартри-фоковского обмена, равной 100%;
- 2) на стр. 16 автореферата допущена опечатка: указано, что «в таблице 3 представлены результаты расчётов параметров электрических СТВ на ядре  $^{139}\text{Ti}$  в  $\text{LaTiO}_3\dots$ », хотя на самом деле представлены результаты расчётов параметров СТВ на ядре  $^{139}\text{La}$ .

Указанные недостатки не влияют на общую высокую оценку диссертации П.А. Агзамовой. Полученные диссертантом новые и практически значимые результаты, их объём и актуальность удовлетворяют требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук, а автор диссертации Агзамова Полина Александровна заслуживает присуждения ей учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.11 – физика магнитных явлений.

Профессор кафедры физики колебаний  
физического факультета  
МГУ им. М.В. Ломоносова  
доктор физ.-мат. наук,  
Профессор РАН,  
Пятаков Александр Павлович.

А.П. Пятаков

Почтовый адрес: 119991, г. Москва,  
Ленинские горы, д.1, стр.2  
Тел.: + 7-495-939-41-38  
E-mail: [pyatakov@physics.msu.ru](mailto:pyatakov@physics.msu.ru)

Подпись проф. А.П. Пятакова заверяю,  
Ученый секретарь, д.ф.-м.н, проф.

В.А. Карavaев

*С отзовом ознакомила  
15.06.2017 - Агзамова П.А.*