

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 004.003.01 НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ
НАУКИ ИНСТИТУТА ФИЗИКИ МЕТАЛЛОВ ИМЕНИ М.Н. МИХЕЕВА
УРАЛЬСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК (ИФМ
УрО РАН) ФЕДЕРАЛЬНОГО АГЕНСТВА НАУЧНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ ПО
ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА
НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 13.04.2018, №4

О присуждении УШАКОВУ Алексею Вячеславовичу, гражданину
России, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Магнитные структуры сульфидов и оксидов 3d металлов со сложной кристаллической решеткой, исследованные в рамках теорий DFT и DFT+DMFT» по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния принята к защите 06.02.2018, протокол № 2 диссертационным советом Д004.003.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской Академии наук (ИФМ УрО РАН), Федеральное агентство научных организаций, 620137, Екатеринбург, ул.С.Ковалевской,18, приказы Минобрнауки РФ № 714/нк от 02.11.2012 и № 188/нк от 26.02.2015.

Соискатель Ушаков Алексей Вячеславович, 1985 года рождения, в 2009 году окончил Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Уральский государственный технический университет-УПИ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по специальности «Прикладные математика и физика», освоил программу подготовки научно-педагогических кадров в очной аспирантуре при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте

физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской Академии наук, год окончания аспирантуры 2017, работает в должности младшего научного сотрудника в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Института физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, Федеральное агентство научных организаций.

Диссертация выполнена в лаборатории оптики металлов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, Федеральное агентство научных организаций.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор РАН Стрельцов Сергей Владимирович, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, лаборатория квантовой наноспинтроники, главный научный сотрудник.

Официальные оппоненты:

1. Медведева Надежда Ивановна, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник лаборатории квантовой химии и спектроскопии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук, Федеральное агентство научных организаций,
2. Некрасов Игорь Александрович, доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН, главный научный сотрудник лаборатории теоретической физики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института электрофизики Уральского отделения Российской академии наук, Федеральное агентство научных организаций дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской Академии наук в своем положительном заключении,

подписанном Кугелем Климентом Ильичом, кандидатом физико-математических наук, ведущим сотрудником лаборатории теоретической электродинамики конденсированных сред, Рахмановым Александром Львовичем, доктором физико-математических наук, заведующим той же лабораторией, указала, что диссертационная работа Ушакова А.В. посвящена изучению «магнитных свойств многокомпонентных соединений на основе 3d металлов с помощью первопринципных расчетов электронной структуры. Диссертационная работа выполнена на актуальную тему. Результаты являются новыми и достоверными. По общему мнению семинара лаборатории, диссертация удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния».

Соискатель имеет 13 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 9 работ, из них статей, опубликованных в рецензируемых российских и зарубежных научных изданиях - 6, тезисов докладов в материалах всероссийских и международных конференций – 3. Общий объем научных изданий 4.7 печатных листа. Автором были рассчитаны параметры обменного взаимодействия в классической модели Гейзенберга для различных классов соединений с треугольной решеткой из магнитных ионов. Все исследуемые соединения обладают нетривиальными магнитными свойствами в низкотемпературной фазе. Результаты расчетов электронной структуры полностью воспроизвели магнитные характеристики исследуемых веществ, полученные из экспериментальных данных, а анализ обменных интегралов позволил определить механизмы формирования их магнитной структуры. Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Magnetism of layered chromium sulfides $M\text{CrS}_2$ ($M = \text{Li, Na, K, Ag, Cu}$ and Au): A first-principles study / A. V. Ushakov, D. A. Kukusta, A. N. Yaresko, D. I. Khomskii // Physical Review B. — 2013. — Vol. 87, No. 1. — P. 014418.

2. Ushakov, A. V. Orbital structure and magnetic ordering in stoichiometric and doped crednerite CuMnO_2 . / A. V. Ushakov, S. V. Streltsov, D. I. Khomskii // Physical Review B. — 2014. — Vol. 89, No. 2. — P. 024406.
3. Magnetic phase diagram and first-principles study of $\text{Pb}_3\text{TeCo}_3\text{V}_2\text{O}_{14}$ / M. M. Markina, B. V. Mill, E. A. Zvereva, A. V. Ushakov, S. V. Streltsov and A. N. Vasiliev // Physical Review B. — 2014. — Vol. 89, No. 10. — P. 104409.
4. Two-step antiferromagnetic transition and moderate triangular frustration in $\text{Li}_2\text{Co}(\text{WO}_4)_2$ / I. P. Muthuselvam, R. Sankar, A. V. Ushakov, G. N. Rao, S. V. Streltsov and F. C. Chou // Physical Review B. — 2014. — Vol. 90, No. 17. — P. 174430.
5. Successive spin orderings of tungstate-bridged $\text{Li}_2\text{Ni}(\text{WO}_4)_2$ of spin 1 / I. P. Muthuselvam, R. Sankar, A. V. Ushakov, W. T. Chen, G. N. Rao, S. V. Streltsov, S. K. Karna, L. Zhao, M-K Wu and F. C. Chou // journal of Physics: Condensed Matter. — 2015. — Vol. 27, No. 45. — P. 456001.
6. Suppression of magnetism under pressure in FeS: A DFT+DMFT study / A. V. Ushakov, A. O. Shorikov, V. I. Anisimov, N. V. Baranov and S. V. Streltsov // Physical Review B. — 2017. — Vol. 95, No. 20. — P. 205116.

На диссертацию и автореферат поступило 4 отзыва. Все отзывы положительные. В них отмечается актуальность темы диссертационной работы, научная новизна полученных результатов, их теоретическая и практическая значимость. Отзыв без замечаний поступил от Ефремова Дмитрия Викторовича, кандидата физико-математических наук, научного сотрудника Института твердого тела и изучения материалов им. Лейбница, г. Дрезден, Германия.

Замечания содержатся в следующих отзывах:

1. От Антонова Виктора Николаевича, доктора физ.-мат. наук, профессора, член-корреспондента НАН Украины, заведующим отделом вычислительной физики Института металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины, г. Киев.

Замечания: 1) Какой именно метод расчетов использовался для определения электронной структуры соединения $\text{Cu}_{1-x}\text{Mn}_{1-x}\text{O}_2$ при слабом легировании Cu, а также предполагалось ли какое-либо упорядочение атомов замещения по отношению к кристаллической решетке базового соединения. 2) Кроме того, в текст автореферата используются обозначения ионов разных элементов с указанием и без указания формального заряда, так, например ион хрома может обозначаться как Cr, так и Cr^{3+} , хотя заряд иона одинаков в обоих случаях. Также в тексте автореферата не выдержано единое обозначение для методов расчетов, учитывающих корреляции (используется как LDA+U, так и LSDA+U или L(S)DA+U), а в приведенном списке публикаций автора в первой

ссылке (PRB 87 014418) указанные в автореферате инициалы авторов отличаются от инициалов в оригинальной публикации. 3) Суммирование в выражении для Гамильтониана модели Гейзенберга, приведенного в выражении (1) на стр. 8, проводится по каждой паре индексов i и j дважды, однако, поскольку в (1) отсутствует множитель $1/2$, такое суммирование может привести к изменению нормировки обменных интегралов J_{ij} .

2. От Казак Натальи Валерьевны, кандидата физ.-мат. наук, старшего научного сотрудника лаборатории физики магнитных явлений Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения РАН — обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, г. Красноярск.

Замечание: 1) Почему в главе 2 в модели Гейзенберга для серии систем $M\text{CrS}_2$ обменные интегралы во второй координационной сфере оказываются пренебрежимо малыми?

3. От Ларионова Игоря Александровича, кандидата физ.-мат. наук, старшего научного сотрудника научно-исследовательской лаборатории магнитной радиоспектроскопии и квантовой электроники им. С.А. Альтшулера, кафедра квантовой электроники и радиоспектроскопии, отделение радиофизики и информационных систем, Институт физики, Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань

Замечания: 1) В тексте автореферата на стр. 12 в начале описания второй главы вместо октаэдров с магнитными ионами CrS_6 (MnO_6) описываются октаэдры с немагнитными ионами MS_6 (CuO_6).

Выбор официальных оппонентов доктора физ.-мат. наук, Н. И. Медведевой и доктора физ.-мат. наук, член-корреспондента РАН И.А. Некрасова и ведущей организации обосновывается публикациями оппонентов, тематикой структурного подразделения ведущей организации и публикациями кандидата физ.-мат. наук К. И. Кугеля, доктора физ.-мат. наук А. Л. Рахманова, относящимися к сфере исследований, которым посвящена диссертация.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

1. Определен механизм формирования магнитного упорядочения в слоистых хроматах $M\text{CrS}_2$ (где $M = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}, \text{Cu}$ и Ag). Основным фактором, ответственным за изменение типа магнитного упорядочения при замене иона M , является величина отношения J_1/J_3 , где J_1 — параметр обменного взаимодействия в модели Гейзенберга между ионами Cr в первой координационной сфере, J_3 — параметр обменного взаимодействия между ионами Cr в третьей координационной сфере.

2. Предложена модель обменного взаимодействия между соседними треугольными решетками MnO_2 в кредерите CuMnO_2 при стехиометрическом составе и при слабом замещении ионов Mn на ионы Cu ($\text{Cu}_{1.04}\text{Mn}_{0.96}\text{O}_2$). В рамках этой модели удалось описать изменение межслоевого упорядочения с антиферромагнитного на ферромагнитное при изменении стехиометрии.
3. Установлено, что в низкотемпературной фазе в многокомпонентных магнетиках $\text{Pb}_3\text{TeCo}_3\text{V}_2\text{O}_{14}$, $\text{Li}_2\text{Co}(\text{WO}_4)_2$ и $\text{Li}_2\text{Ni}(\text{WO}_4)_2$ за счет орбитального упорядочения формируются квазиодномерные магнитные структуры.
4. Показано, что при увеличении внешнего давления в FeS имеют место как магнитный переход ионов Fe из высокоспинового состояния в низкоспиновые состояния, так и увеличение степени коллективизации 3d электронов Fe.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что в работе показано применение различных способов оценки величин параметров обменного взаимодействия в классической модели Гейзенберга на основе расчетов электронной структуры с помощью теорий DFT и DFT+DMFT.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что в работе удалось получить объяснение необычных физических свойств ряда соединений, в которых возможно наличие магнитной фрустрации. Существование близких по энергии состояний позволяет влиять на характеристики таких материалов с помощью малых внешних воздействий.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

- *теоретические результаты*, полученные с помощью широко апробированных методов и подходов расчета электронных, магнитных и структурных свойств соединений на основе переходных металлов, согласуются с современными научными представлениями;
- *полученные данные* обоснованы выбором физических приближений;
- *выводы работы* не имеют принципиальных расхождений с имеющимися экспериментальными данными других исследователей.

Личный вклад соискателя состоит в участии в постановке задач, в получении и анализе результатов совместно с научным руководителем и другими соавторами. Автором лично выполнены расчеты электронной структуры и обменных параметров для всех исследованных соединений. Материал диссертации неоднократно докладывался автором на международных и российских конференциях.

Диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, в которой содержится решение актуальной научной задачи — определения природы магнитного упорядочения в низкотемпературной фазе в сульфидах и оксидах переходных металлов со сложной кристаллической решеткой, и соответствует критериям, установленным «Положением о порядке присуждения ученых степеней», которое утверждено Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 с изменениями от 21 апреля 2016 г. № 335.

На заседании 13.04.2018 года диссертационный совет принял решение присудить Ушакову Алексею Вячеславовичу ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации 01.04.07 – Физика конденсированного

состояния, 6 докторов наук по специальности 01.04.11 – Физика магнитных явлений, 5 докторов наук по специальности 05.16.01 – Металловедение и термическая обработка металлов, участвовавших в заседании, из 21 человека, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту – нет, проголосовали: за - 17, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель диссертационного совета
доктор физ.-мат. наук,

В.В. Устинов

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор физ.-мат. наук

Т.Б. Чарикова

17 апреля 2018 г.