

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Комлевой Евгении Викторовны **«Первопринципное моделирование решёточных и магнитных свойств низкоразмерных оксидов переходных металлов»**, представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

В диссертационной работе Е.В. Комлевой с помощью первопринципных расчётов исследуются магнитные и решеточные свойства некоторых низкоразмерных оксидов переходных металлов. В частности, для квазидвумерных рутенатов  $\text{SrRu}_2\text{O}_6$ ,  $\text{AgRuO}_3$  и  $\text{Li}_2\text{RuO}_3$  была смоделирована динамика решётки, и на основании полученных результатов расшифрованы спектры комбинационного рассеяния (КР) света. Помимо этого, с помощью результатов дополнительных расчётов возможных магнитных возбуждений в данных соединениях были объяснены как высокочастотные пики в КР спектрах, так и температурные особенности спектров мюонной спиновой спектроскопии. В изоструктурных соединениях с линейными тримерами переходных металлов  $\text{Ba}_4\text{NbTM}_3\text{O}_{12}$  автором объяснены столь различные магнитные свойства, а также с помощью ряда расчётов установлена тенденция к формированию молекулярных орбиталей с ростом номера периода, которому принадлежит ион металла в таблице Д.И. Менделеева. Для  $\text{PdCrO}_2$  были рассчитаны параметры изотропного обменного взаимодействия и предпринята попытка с их помощью рассчитать температуру магнитного перехода, однако было указано, что (оставаясь в рамках модели Гейзенберга) такая оценка не является корректной. Все рассмотренные соединения являются объектами активных современных исследований, а процитированные публикации в высокорейтинговых научных журналах подтверждают актуальность работы. Результаты, полученные в работе над диссертацией и авторефератом, соответствуют поставленным цели и задачам, являются оригинальными и востребованы экспериментальными группами.

Вопрос к работе следующий: «Приведенное в автореферате значение обменного взаимодействия между атомами Ru, находящимися в различных слоях  $\text{AgRuO}_3$ , достаточно мало (0.2 мэВ, 2.3 К). Насколько значимым оказывается учёт этого взаимодействия при рассмотрении магнитной картины данного вещества?».

В целом, формулировка цели и задач, описание хода работы и представление полученных результатов выполнено грамотным научным языком. Результаты работы

опубликованы в журнале, входящем в перечень ВАК. Работа соответствует всем необходимым требованиям, а Е.В. Комлева заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 - «Физика конденсированного состояния».

Доцент кафедры теоретической физики  
и прикладной математики ФТИ УрФУ,  
кандидат физ.-мат. наук

И.В. Кашин

«30» мая 2022 г.

Почтовый адрес: 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 21

Тел.: 8(922)1988444

E-mail: i.v.kashin@urfu.ru

Подпись  
заверя

ДОКУМЕНТОВЕД УДИОВ  
ГАФУРОВА А. А.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

С отзывом ознакомлена. 07.06.2022 г.

Комлева Е.В.