

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

Соединения переходных металлов (ПМ) активно исследуются в современной физике конденсированного состояния, так как они демонстрируют разнообразие и аномалии электронных, транспортных, магнитных и структурных свойств, сложные фазовые переходы, формирование магнитных структур, которые могут быть и не коллинеарными, и не соизмеримыми, т.е. магнитными спиралями, циклоидами, решетками скирмионов и т. д. Понять природу процессов, происходящих в оксидах ПМ, и объяснить наблюдаемые физические свойства помогает проведенный в представленной к защите работе анализ результатов первопринципных расчётов, основанных на теории функционала плотности с привлечением элементов других теорий.

Сразу хочу отметить, что очень удачно подобраны 3 семейства низкоразмерных оксидов, имеющих с одной стороны схожую физику, а с другой, существенные особенности. Это квазидвумерные система с треугольной решёткой и рутенаты с решёткой типа «пчелиные соты», а также системы со структурными димерами и тримерами. Особенности геометрии этих соединений определяют их решёточные и магнитные свойства, исследуемые автором автореферата и диссертации. Прекрасной особенностью работы является то, что проведенные первопринципные расчеты выполнены не просто сами по себе, но позволили описать много экспериментальных результатов, которые до этого были или совсем не проинтерпретированы или объяснены поверхностно. Таким образом, Е.В. Комлевой получены результаты, несомненно обладающие научной новизной. В частности, впервые установлена природа всех наблюдаемых в спектрах комбинационного рассеяния света возбуждений в рутенатах SrRu_2O_6 , AgRuO_3 и Li_2RuO_3 ; предложено объяснение наблюдаемого пика в μSR спектрах в AgRuO_3 ; впервые выявлены колебательные моды, отвечающие особенностям структурных свойств Li_2RuO_3 . Очень важным результатом является демонстрация того, что для описания магнитных свойств соединения PdCrO_2 необходим выход за пределы модели Гайзенберга. Ну а самым красивым, на мой взгляд, результатом является установление, что в серии соединений $\text{Ba}_4\text{NbTM}_3\text{O}_{12}$, где $\text{TM} = \text{Mn}, \text{Rh}, \text{Ir}$, с увеличением номера периода, к которому принадлежит TM в таблице Д.И. Менделеева, происходит изменение от локализации электронов на одном узле к локализации на кластере

из трёх ионов и формированию молекулярных орбиталей. Таким образом, представлено целостное рассмотрение тенденции к образованию молекулярных орбиталей для ионов $3d$, $4d$ и $5d$ переходных металлов на серии изоструктурных оксидов.

Достоверность результатов, полученных в диссертационной работе, обеспечивается обоснованным выбором физических приближений, использованием широко апробированных методов и подходов для расчета электронных, магнитных и решёточных свойств соединений на основе переходных металлов, а также очень хорошим согласием с экспериментальными данными, что для теоретического исследования совсем не такой уж частый случай. Поэтому результаты диссертации имеют научную и практическую значимость.

Автореферат к диссертации Е.В. Комлевой написан научным, но в то же время доступным языком с соблюдением необходимых требований. Полученные в ходе исследования результаты соответствуют поставленным целям, что говорит о внутреннем единстве и логике работы.

Результаты, полученные в ходе работы над диссертацией, представлены на нескольких всероссийских и международных конференциях и опубликованы в 5 статьях в журнале Physical Review B, входящем в перечень ВАК. Работа представляет собой законченное исследование и соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Считаю, что её автор, Комлева Евгения Викторовна, несомненно заслуживает присуждения ей степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Руководитель отделения нейтронных исследований
ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики»
им. Б.П. Константинова»
НИЦ – «Курчатовский институт»
доктор физико-математических наук, с.н.с.

А.И. Курбаков

« 03 » 06 2022 г.

Почтовый адрес: 188300, Россия, Ленинградская область,
г. Гатчина, мкр. Орлова роща, д. 1
Тел.: (813)7146280
e-mail: kurbakov_ai@pnpi.nrcki.ru

Подпись А.И. Курбакова заверяю

Учёный секретарь НИЦ «Курчатовский институт»
кандидат физико-математических наук

С.И. Воробьев

С отзывом ознакомлена.
10.06.2022 г.

Комлева Е.В.