

ОТЗЫВ

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

Переходные металлы и оксиды переходных металлов неизменно привлекают интерес исследователей многообразием своих свойств и качественным отличием этих свойств простых металлов. Ферромагнетизм, присущий переходным металлам, имеет необъятную область применения. Поэтому актуальность исследования магнитных свойств переходных металлов и их оксидов трудно переоценить. Кроме глобальных проблем существуют более узкие задачи по интерпретации физических свойств ряда материалов, например, такие как однозначное определение механизма возникновения и интерпретация пиков в экспериментально наблюдаемых спектрах комбинационного рассеяния света слоистых рутенатах SrRu_2O_6 , AgRuO_3 и Li_2RuO_3 ; обоснование причины различия электронных и магнитных свойств в изоструктурных соединениях $\text{Ba}_4\text{NbTM}_3\text{O}_{12}$, где $\text{TM} = \text{Mn, Rh, Ir}$, отличающихся лишь ионом переходного металла. Также оставались непонятными экспериментально установленные неожиданно низкие значения температуры магнитного перехода ~ 37 К и большая по величине отрицательная температура Кюри-Вейсса ~ -500 К в слоистых соединениях PdCrO_2 с треугольной решёткой магнитных атомов. Поэтому актуальность и практическая значимость работы Е.В. Комлевой, представленной на соискание степени кандидата физико-математических наук и посвященной исследованию из первых принципов решётчных и магнитных свойств низкоразмерных оксидов переходных металлов, не вызывает сомнений.

В автореферате представлены основные результаты, полученные автором в период выполнения диссертационной работы. Был расшифрован экспериментальный спектр комбинационного рассеяния света SrRu_2O_6 . После проведения апробации метода и параметров моделирования в гетероструктуру были добавлены дефекты (примесные атомы водорода и кислородные вакансии). По результатам расчётов динамики решётки расшифрован экспериментальный спектр комбинационного рассеяния света AgRuO_3 . Оценены параметры изотропного обменного взаимодействия для атомов Ru и продемонстрирована большая квазидвумерность магнитной структуры, чем в изоструктурном SrRu_2O_6 . Для соединения Li_2RuO_3 смоделирована динамика решётки и расшифрован экспериментальный спектр комбинационного рассеяния света. При исследовании электронной структуры, для серии кластерных магнетиков $\text{Ba}_4\text{NbTM}_3\text{O}_{12}$ ($\text{TM} = \text{Mn, Rh, Ir}$) установлена тенденция к формированию молекулярных орбиталей с увеличением номера периода, в котором располагается переходный металл в таблице Д.И. Менделеева. В слоистой системе с треугольной решёткой магнитных атомов PdCrO_2 рассчитаны параметры изотропного обменного взаимодействия в классической модели Гайзенберга. Была продемонстрирована необходимость выхода за пределы модели Гайзенберга для описания магнитных свойств слоистого соединения PdCrO_2 .

В качестве замечаний к автореферату укажем следующие:

- 1) Теоретическая значимость проводимого исследования несомненна, и она подчеркивалась неоднократно в автореферате, однако, не было достаточной информации о практическом интересе к исследованным соединениям.
- 2) В автореферате описана интерпретация СОНР графиков, однако, не нашли, что это такое: нет расшифровки аббревиатуры, что затрудняет понимание.
- 3) На большинстве рисунков надписи очень мелкие, например, на рисунке 2 а значения температур едва различимы.

Отмеченные замечания не носят принципиальный характер, и не оказывают влияния на общую высокую оценку проделанной работы.

Результаты проведенных исследований нашли отражение в 5 опубликованных научных статьях высокорейтинговых журналов. В целом из материалов, представленных в автореферате, складывается очень хорошее впечатление о выполненной диссертационной работе Е.В. Комлевой, что позволяет сделать заключение о том, что соискателем выполнена работа на хорошем теоретическом уровне с использованием эффективных современных численных подходов. Полученные результаты соответствуют поставленным автором целям и задачам. Работа содержит ряд новых результатов, расширяющих научные представления о физике низкоразмерных оксидов переходных металлов. Считаем, что диссертационная работа Комлевой Евгении Викторовны «Первопринципное моделирование решёточных и магнитных свойств низкоразмерных оксидов переходных металлов» по объёму выполненного исследования, его актуальности и новизне полученных результатов соответствует требованиям п. 2 «Положения о присуждении учёных степеней», предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Н.с. Лаборатории физики
ферроиков и функциональных материалов
кандидат физико-математических наук
08.06.2022.

Руководитель Лаборатории физики
ферроиков и функциональных материалов
КФТИ КазНЦ РАН
доктор физико-математических наук


...марова Ирина Ивановна

...амин Ринат Файзрахманович

Почтовый адрес:

Российская Федерация, Республика Татарстан,
420029, г.Казань, ул. Сибирский тракт, д. 10/7

Тел.: +7 (843) 272 05 03
Факс +7 (843) 272 50 75
e-mail: iipiyanzina@kpfu.ru
mamin@kfti.knc.ru

*С отзывом
ознакашена*

14.06 22 г.

Комлева Е.В.

Подпись *Ирина Ивановна*
И - обособленное
КазНЦ РАН
ркина Н.Г.

Подпись *Ринат Файзрахманович*
ФТИ - обособленное
ИЦ КазНЦ РАН
ркина Н.Г.