

О Т З Ы В

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

Диссертационная работа Е.В. Комлевой посвящена решению ряда актуальных теоретических задач, касающихся анализа решёточной структуры и магнитных характеристик широкого класса низкоразмерных оксидов переходных металлов. Отмечу, что физика низкоразмерных соединений (квазиодномерных и квазидвумерных) привлекает в настоящее время значительный интерес исследователей. Появляются новые журналы, посвященные исключительно этой проблематике, а журналах более общего профиля возникают соответствующие разделы. Регулярно проводятся крупные международные конференции и школы по низкоразмерной физике. Пристальное внимание к низкоразмерным системам связано с существенным вкладом квантовых эффектов в их термодинамику и кинетику, приводящих к богатой и разнообразной фазовой диаграмме и множеству необычных характеристик. Фактически, исследование низкоразмерных систем, особенно в низкотемпературной области, оказывается принципиально важным для большинства областей физики конденсированного состояния, включая магнетизм, сверхпроводимость и нелинейные процессы. В ряду исследуемых соединений ведущее место занимают низкоразмерные магнетики. Существенная особенность этих материалов состоит в тесной взаимосвязи их магнитных и структурных характеристик, привлекающей к ним интерес как с точки зрения фундаментальной физики, так и возможных приложений.

В представленной диссертационной работе изучены структурные и магнитные свойства ряда оксидов переходных металлов, в частности, природа оптических возбуждений в рутенатах, особенности *d*-электронов в кластерных моттовских диэлектриках и основное магнитное состояние системы с треугольной решёткой магнитных атомов. Исследования проведены в рамках методов расчёта зонной структуры, основанных на теории функционала электронной плотности. Полученные результаты и выявленные закономерности могут быть использованы в дальнейшем не только для рассмотренных в работе материалов, но также для веществ со схожей кристаллической структурой или химическим составом.

Я бы особо отметил результаты расчётов динамики решётки и расшифровку экспериментально наблюдаемого спектра комбинационного рассеяния света в AgRuO_3 . Интересно, что благодаря проведённой оценке параметров изотропного обменного взаимодействия для атомов Ru продемонстрирована большая квазидвумерность магнитной структуры, чем в изоструктурном соединении SrRu_2O_6 . Продемонстрировано также, что пики в спектрах мюонной спиновой спектроскопии AgRuO_3 при низких температурах связаны с существованием двух классов мюонных ловушек, обусловленных минимумами электростатического потенциала системы.

Несомненный интерес представляет и исследование электронной структуры для серии кластерных магнетиков $\text{Ba}_4\text{NbTM}_3\text{O}_{12}$ ($\text{TM} = \text{Mn}, \text{Rh}, \text{Ir}$), в результате которого установлена тенденция к формированию молекулярных орбиталей с увеличением номера периода, в котором располагается переходный металл в периодической системе элементов Менделеева. В случае тримеров Mn электроны локализуются на атомоподобных *3d* орбиталях, причём магнитные моменты на соседних узлах связаны антиферромагнитно. В *5d* системе на основе Ir электроны локализуются на кластере, то есть формируются молекулярные орбитали. Реализуется немагнитное основное состояние. В *4d* тримерах Rh реализуется промежуточная картина – необходимо учитывать как формирование

молекулярных орбиталей, так и корреляционные эффекты. При этом основное состояние тримера ферромагнитное.

Все эти результаты являются новыми, актуальными и представляющими значительный научный интерес. Они своевременно опубликованы в 5-ти статьях в авторитетнейшем физическом журнале Physical Review B и доложены на многочисленных конференциях. Такая серьёзная апробация результатов свидетельствует и об их достоверности. Автореферат диссертации даёт читателю чёткое и ясное представление о работе, её результатах и личном вкладе автора.

У меня имеются следующие замечания к автореферату:

1. В подписи к рис. 2(б) указывается, что жёлтым цветом "показаны минимумы потенциала". Но на самом рисунке жёлтым цветом обозначены геометрические фигуры сравнительно большого объёма. Следовало бы уточнить, где именно расположены минимумы.

2. При описании результатов главы 5 приводится подробная таблица значений параметров изотропного обменного взаимодействия в рамках модели Гайзенберга. Но рассматриваемая система характеризуется высокой электропроводностью, а такие системы не слишком хорошо описываются моделью Гайзенберга, и это же утверждается в выводах к данной главе. Поэтому подробный анализ в рамках только модели Гайзенберга представляется не вполне адекватным.

Сделанные замечания не снижают общего положительного впечатления о работе, которая представляет собой законченное комплексное исследование, посвящённое актуальным проблемам физики конденсированного состояния и выполненное на высоком научном уровне. Автором продемонстрировано хорошее владение современными расчётными методами и подходами в проведении теоретических исследований свойств соединений переходных металлов.

Содержание автореферата убедительно демонстрирует, что диссертация Комлевой Евгении Викторовны "Первопринципное моделирование решёточных и магнитных свойств низкоразмерных оксидов переходных металлов" является законченной научно-квалификационной работой, которая по объёму, оригинальности полученных результатов, достоверности, научной и практической ценности удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а её автор несомненно заслуживает присуждения ей учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Ведущий научный сотрудник лаборатории теоретической

электродинамики конденсированных сред,

ФГБУН Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

к. ф.-м. н. (специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния)

Климент Ильич Кугель

125412 Россия, г. Москва, ул. И

тел: 8 495 3625147, e-mail: kliml

"Подпись к. ф.-м. н. К.И. Кугеля удостоверяю"

Заместитель директора ИТПЭ РАН по научной раб

д. ф.-м. н.

Мерзликин

125412 Россия, г. Москва, ул. Ижорская 13, ИТПЭ РАН

тел: 8 495 4842383, e-mail: merzlikin_a@mail.ru

22 июня 2022 г.

С отзывом ознакомлена.

27.06.2022

Кашлева В.