

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

Диссертационная работа Е.В.Комлевой посвящена исследованию на основе первопринципных расчетов решёточных и магнитных свойств ряда низкоразмерных оксидов переходных металлов, в частности, SrRu_2O_6 , AgRuO_3 и Li_2RuO_3 , $\text{Ba}_4\text{NbTM}_3\text{O}_{12}$ ($\text{TM}=\text{Mn}, \text{Rh}, \text{Ir}$), PdCrO_2 . Электрон-электронное взаимодействие и электронная локализация в подобных системах приводят к интересным магнитным свойствам, и расчетные методы позволяют достичь понимания физических свойств названных материалов. Актуальность работы с позиций физики и химии конденсированного состояния определяется ее направленностью на решение задачи установления связи «состав – структура – свойства» при создании новых соединений с заданными свойствами.

В основе исследования лежит подход расчёта электронных и структурных свойств в рамках теории функционала плотности (DFT). С точки зрения рецензентов, большой интерес представляют полученные автором в рамках этого подхода новые данные о динамике решетки исследованных соединений, поскольку они позволяют интерпретировать спектры комбинационного рассеяния. Научная новизна работы связана с установленной впервые природой всех наблюдаемых возбуждений в спектрах рутенатов; с выявлением колебательных мод, отвечающих структурным особенностям Li_2RuO_3 ; а также изученными впервые особенностями электронной локализации и формирования молекулярных орбиталей в ряде структур.

Практическая значимость работы определяется, в первую очередь, внесенным автором значимым вкладом в понимание колебательных и магнитных свойств изученных веществ, что значительно облегчит их диагностику и диагностику их аналогов в будущих исследованиях. Особый интерес вызвала интерпретация фазового перехода AgRuO_3 и Li_2RuO_3 при повышенных температурах по данным DFT.

Автореферат диссертации хорошо структурирован, написан понятным языком, правильно оформлен. По тексту реферата имеются следующие вопросы:

1. В автореферате не представлены экспериментальные спектры комбинационного рассеяния, поэтому не ясно, были ли зарегистрированы спектры КР с ориентированного кристалла или с поликристаллической пробы. Было ли выполнено исследование в рамках поляризационного эксперимента для точного отождествления колебаний?

2. Как по данным *ab initio* расчетов можно различить одно-, двух- и трехфононные процессы?

2. Рецензенты просят автора пояснить, почему в случае $\text{Ba}_4\text{NbMn}_3\text{O}_{12}$ учет кулоновских корреляций разрушает молекулярные орбитали, а в случае $\text{Ba}_4\text{NbRh}_3\text{O}_{12}$ и $\text{Ba}_4\text{NbIr}_3\text{O}_{12}$ нет?

Вопросы и замечания не являются критическими и не влияют на общее позитивное впечатление от автореферата.

Сформулированные в диссертационной работе научные положения являются новыми, обоснованными и актуальными. Диссертация представляет собой оригинальное исследование и выполнена на высоком теоретическом уровне, а результаты опубликованы в ведущих международных журналах. Диссертационная работа «Первопринципное

моделирование решёточных и магнитных свойств низкоразмерных оксидов переходных металлов» соответствует требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней и Паспорту специальности 1.3.8 — Физика конденсированного состояния, обладает научной новизной и практической значимостью, а ее автор Е.В. Комлева заслуживает присуждения ей искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 — Физика конденсированного состояния.

Ведущий научный сотрудник, и.о. заведующего лабораторией физических и химических методов исследования минерального вещества ИГГ УрО РАН,
кандидат физ.-мат. наук (01.04. _____ го тела), доцент

Ю.В. Щапова

Почтовый адрес: 620110, г. Екатеринбург, ул. Академика Вонсовского 15

Тел.: (343) 287-90-27

E-mail: shchapova@igg.uran.ru

Я, Щапова Юлия Владимировна, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Научный сотрудник лаборатории _____ ских методов исследования минерального вещества ИГГ УрО

Е.А. Панкрушина

Почтовый адрес: 620110, г. Екатеринбург, ул. Академика Вонсовского 15

Тел.: +7-919-38-966-94

E-mail: pankrushina@igg.uran.ru

Я, Панкрушина Елизавета Алексеевна, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

«16» июня 2022 г.

Подпись Ще Ю.
Зав. общим о

Подпись Пс Е.А.
Зав. общим

С отзывами ознакомлена.
21.06.2022

5 Комлева Е.В.