

ОТЗЫВ

официального оппонента д.ф.-м.н., проф. Прудникова Павла Владимировича на диссертационную работу Комлевой Евгении Викторовны «Первопринципное моделирование решёточных и магнитных свойств низкоразмерных оксидов переходных металлов», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Комлевой Е.В. посвящена решению актуальных научных и практических задач, стоящих перед специалистами в области физики конденсированного состояния. В частности, в работе автор даёт интерпретацию существующих, но достаточно новых экспериментальных результатов, которые требовали объяснения. Автор также расширяет понимание и вносит вклад в определение границ применения современных физических моделей. Выбранные автором объекты исследования – недавно синтезированные и активно исследуемые в наши дни соединения переходных металлов, понимание свойств которых может в дальнейшем в том числе привести к их практическому использованию. В связи с этим представленные в диссертационной работе результаты являются интересными с практической и теоретической точек зрения, а **актуальность проведенных исследований не вызывает сомнения.**

Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав (четыре из которых носят оригинальный характер), заключения и списка литературы, содержащего 85 наименований цитируемых работ. В целом, диссертация занимает 110 страниц.

Во введении обосновывается тема диссертационной работы, формулируются её цель и задачи.

Первая глава диссертационной работы содержит описание формализма первопринципных методов расчётов, использованных для получения электронных и структурных свойств рассматриваемых материалов. В частности, рассматриваются основы теории функционала электронной плотности, а также метод теории возмущений функционала электронной плотности и метод «замороженных» фононов, их преимущества и недостатки.

Вторая глава посвящена исследованию решёточных и магнитных свойств квазидвумерных рутенатов с решёткой типа «пчелиные соты» SrRu_2O_6 и AgRuO_3 . Для обоих

соединений может быть применена картина квазимолекулярных орбиталей, что подтверждается результатами проведённых автором расчётов параметров прямого и непрямого перескоков электронов между ионами Ru. Благодаря полученным результатам первопринципного моделирования фононных спектров проведена интерпретация спектров комбинационного рассеяния света в SrRu_2O_6 и AgRuO_3 . Определены пики, соответствующие двухфононным процессам. Анализ симметрии кристаллической структуры и геометрий, в которых наблюдается высокочастотный пик в SrRu_2O_6 , позволил установить природу возбуждения, которое оказалось вызванным электронным переходом через запрещённую зону. Особенности спектров мюонной спиновой спектроскопии в AgRuO_3 интерпретированы автором как переход мюона между геометрически эквивалентными ловушками, локализованными вблизи одного из минимумов электростатического потенциала системы. Исчезновение наблюдаемых пиков с повышением температуры связано с высокой интенсивностью переходов и как следствие, усреднению дипольного магнитного поля до нуля.

Третья глава содержит результаты моделирования динамики решётки низкоразмерного рутената Li_2RuO_3 , содержащего в низкотемпературной фазе димеры ионов Ru. Согласно экспериментальным результатам других авторов, более короткие связи атомов рутения сохраняются и выше температуры фазового перехода, причём имеются свидетельства в пользу их динамического распределения. Автором были рассчитаны нормальные колебания атомов в соединении и определены моды, отвечающие эффективное перемещение димеров атомов Ru по решётке.

В четвёртой главе рассмотрены электронные и магнитные свойства серии изоструктурных соединений $\text{Ba}_4\text{NbTM}_3\text{O}_{12}$, где $\text{TM} = \text{Mn}, \text{Rh}, \text{Ir}$, в которых ионы переходного металла TM образуют линейные тримеры, хорошо изолированные друг от друга. Используя различные методы расчёта (расчёт параметров перескока электронов, зонные расчёты, СОНР анализ), автор приводит аргументы в пользу формирования молекулярных орбиталей в тримере из 5d ионов Ir и реализации немагнитного основного состояния. Согласно расчётам, в 3d тримерах Mn электроны локализуются на отдельных ионах Mn, что позволяет говорить о локализованных моментах с большой величиной эффективного момента на тример. В 4d кластерах Rh реализуется промежуточная картина, СОНР анализ показывает существование связывающих, несвязывающих и разрыхляющих орбиталей, реализуется ферромагнитный

порядок в тримере. Полученные автором результаты согласуются с экспериментально наблюдаемыми результатами – все три соединения являются диэлектриками, экспериментальные величины эффективных магнитных моментов описываются результатами первопринципных расчётов.

Пятая глава посвящена исследованию магнитных свойств квазидвумерного соединения с треугольной решёткой магнитных атомов PdCrO_2 . Автором из первых рассчитаны параметры изотропного обменного взаимодействия для атомов Cr вплоть до 3-го соседа в плоскости и 2-го между плоскостями. Расчёт температуры магнитного перехода в рамках достаточно точного подхода – самосогласованной спин-волновой теории – приводит к её переоценке в три раза, из чего автор делает вывод о необходимости выхода за пределы модели Гейзенберга для описания магнитных свойств рассматриваемой системы.

В Заключение автором перечислены основные результаты и выводы, полученные на их основании. Диссертация отличается внутренним единством, а полученные результаты демонстрируют эффективность выбранных автором расчётных методов. Изложение литературных данных, а также собственных результатов выполнено достаточно грамотно и полно.

Полученные в диссертационной работе Комлевой Евгении Викторовны результаты расширяют и дополняют современные представления о возможной природе возбуждений в спектрах комбинационного рассеяния света, а также о применимости модели молекулярных орбиталей и модели Гейзенберга к ряду оксидных соединений переходных металлов. Представленные результаты получены впервые и **несомненно представляют научную ценность и новизну**, о чём свидетельствуют публикации в ведущих научных журналах.

Достоверность полученных результатов и выводов диссертационной работы обеспечивается теоретической обоснованностью используемых методов исследования, а также согласием полученных результатов с экспериментальными данными.

Практическая ценность работы определяется тем, что ее результаты дополняют существующие представления о механизмах возникновения аномалий спектральных свойств рутенатов, возможности формирования молекулярных орбиталей в кластерных моттовских диэлектриках и применимости стандартной модели Гейзенберга к описанию магнитных свойств PdCrO_2 . Полученные автором результаты позволят приблизиться к задаче построения функциональных материалов с заданными свойствами, что определяет безусловную

практически значимость полученных результатов.

В качестве незначительных замечаний к диссертационной работе можно указать следующие:

1. В 5 главе в Таблице 5.1 представлены рассчитанные значения изотропного обменного взаимодействия и оценка температуры Кюри-Вейсса для различных значений кулоновского отталкивания U . В дальнейшем использовались результаты, полученные для «наиболее подходящего» значения $U=3.2$ эВ. Из текста диссертации не совсем ясно, использовались ли дополнительные критерии выбора значения U , кроме оценки близости рассчитанной температуры θ_{CW} к экспериментальному значению? Насколько чувствительны итоговые результаты к выбору параметра U ?
2. В 5 главе диссертации осуществлялась аккуратная оценка температуры магнитного упорядочения T_N в рамках подхода самосогласованной спин-волновой теории. Была выявлена существенная роль фрустраций. Оценивалось ли в работе влияние на значение температуры флуктуаций или условий при котором бы данное влияние могло стать существенным?
3. В 4 главе диссертации для оценки орбитальных заселенностей проводились первопринципные расчеты для разбиения k -сетки зоны Бриллюэна $8 \times 8 \times 8$. Возможны ли изменения результатов при уменьшении шага интегрирования и проводились ли в работе подобные исследования? Также следует отметить, что при широком использовании в исследованиях численных расчетов в диссертации практически не обсуждаются используемые вычислительные ресурсы, на которых были получены результаты.

Отмеченные замечания не носят принципиальный характер, не оказывают существенного влияния на общую положительную оценку диссертационной работы, а скорее демонстрируют интерес оппонента к диссертации.

Диссертация Комлевой Е.В. выполнена на высоком научном уровне с использованием современных методов и подходов теории конденсированного состояния. Результаты неоднократно докладывались автором на всероссийских и международных конференциях. Материалы диссертации опубликованы в ведущих научных журналах, таких как Physical Review B. Полученные результаты известны специалистам. Содержание автореферата полностью соответствует содержанию диссертации. Диссертационная работа Комлевой Е.В. является целостным завершённым научным исследованием и удовлетворяет всем заявленным требованиям.

Диссертация соответствует пункту 1. «Теоретическое и экспериментальное изучение

физической природы свойств металлов и их сплавов, неорганических и органических соединений, диэлектриков и в том числе материалов световодов как в твердом, так и в аморфном состоянии в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления» паспорта специальности 1.3.8 «Физика конденсированного состояния».

Диссертационная работа соответствует требованиям п. 2 «Положения о присуждении учёных степеней», предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор Комлева Евгения Викторовна безусловно заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент:

доктор физико-математических наук,

специальность - Физика конденсированного состояния,

профессор, проректор по научной работе,

профессор кафедры теоретической физики,

ФГАОУ ВО «Омский государственный

университет им. Ф.М. Достоевского»

Прудников Павел Владимирович

Дата: 14 июня 2022 г.

Адрес служебный: 644077, Российская Федерация, г. Омск, пр-т Мира, Д.55А, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Омский государственный, университет им. Ф.М. Достоевского», тел. 8 3812 630 445, факс: 8 3812 642 700, e-mail: PrudnikovPV@omsu.ru

Подпись д.ф.-м.н., проф. кафедры теор. физики, проректора по научной работе Омского государственного университета им. Ф.М. Достоевского Прудникова П.В. удостоверяю.

Ученый секретарь Омского государственного университета

им. Ф.М. Достоевского,

кандидат филологическ

Рогалева Ольга Сергеевна

С отзывом ознакомлена. 16.06.2022 г.
Комлева Е.В.

Сведения об официальном оппоненте

ФИО: Прудников Павел Владимирович

Ученая степень, звание: доктор физико-математических наук, специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния, профессор

Полное наименование организации: федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского»

Должность: профессор кафедры теоретической физики, проректор по научной работе

Почтовый адрес: 644077, г.Омск, пр-т Мира, д. 55-А

Тел.: (3812) 26-84-22

E-mail: prudnikovpv@omsu.ru

Публикации в сфере исследований, которым посвящена диссертация

1. Прудников, В.В. Исследование маргинального влияния дефектов структуры на неравновесное критическое поведение двумерной модели Изинга / В.В. Прудников, П.В. Прудников, П.Н. Маляренко, Л.Н. Щур // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2020. – Т. 157. – вып. 2. С. 308–326.
2. Popov, I.S. Non-equilibrium vortex annealing of structural disorder in Berezinskii-Kosterlitz-Thouless dynamics of the two-dimensional XY-model / I.S. Popov, A.P. Popova, P.V. Prudnikov // EPL. – 2019. – V. 128. – art. 26002.
3. Prudnikov, P.V. Influence of anisotropy on magnetoresistance in magnetic multilayer structures / P.V. Prudnikov, V.V. Prudnikov, M.V. Mamonova et al. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2019. – V. 482. – Pp. 201-205.
4. Prudnikov, P.V. Non-equilibrium critical dynamics of multilayer magnetic structures / P.V. Prudnikov, V.V. Prudnikov, A.N. Purto et al. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2019. – V. 470. – Pp.143-146.
5. Prudnikov, V.V. Manifestation of aging in giant magnetoresistance of the Co/Cu/Co nanostructure / V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, M.V. Mamonova, et al. // Journal of Physics Communication. – 2019. – V. 3. – art. 015002.
6. Прудников, В.В. Особенности неравновесного критического поведения модельных статистических систем и методы их описания / В.В. Прудников, П.В. Прудников, М.В. Мамонова // Успехи физических наук. – 2017. – Т. 187. – вып. 8. С. 817-855.
7. Popov, I.S. Universal Berezinskii-Kosterlitz-Thouless dynamic scaling in the intermediate time range in frustrated Heisenberg antiferromagnets on triangular lattice / I.S. Popov, P.V. Prudnikov, A.N. Ignatenko, A.A. Katanin // Physical Review B. – 2017. – V. 95. – art. 134437.
8. Prudnikov, V.V. Monte Carlo calculations of the magnetoresistance in magnetic multilayer structures with giant magnetoresistance effects / V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, D.E. Romanovskiy // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2016. – V. 49, no. 23. – art. 235002.

9. Dimensionality crossover in critical behaviour of ultrathin ferromagnetic films / P.V. Prudnikov, V.V. Prudnikov, M.A. Menshikova // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2015. – V. 387, no. 1. – Pp. 77-82.

Ученый секретарь Омского государственного университета

им. Ф.М. Достоевского,

кандидат филологических



О.С. Роголева