

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕТА

Шенна Игоря Роленовича

**на кандидатскую диссертацию Комлевой Евгении Викторовны
«Первопринципное моделирование решеточных и магнитных свойств
низкоразмерных окислов переходных металлов»
по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.**

Кандидатская диссертация Комлевой Евгении Викторовны «Первопринципное моделирование решеточных и магнитных свойств низкоразмерных окислов переходных металлов» на соискание ученой степени кандидата физико - математических наук представляет собой законченную диссертационную работу по специальности «Физика конденсированного состояния».

Актуальность работы

Данная диссертационная работа посвящена изучению методами первопринципного моделирования электронных, магнитных и динамических свойств низкоразмерных диэлектриков Мотта, которые являются перспективными материалами в различных областях современной техники и технологиях и, прежде всего, электроники. В последние годы научное сообщество начинает уделять пристальное внимание на т.н. кластерные моттовские диэлектрики. Их отличительной характеристикой является тот факт, что локализация электронов происходит не на отдельном атоме переходного металла, а на группе, состоящих из двух и более атомов, где происходит формирование молекулярных орбиталей. Соискатель в данной диссертационной работе рассмотрела несколько типов низкоразмерных структур. Это, во-первых, слоистая система Li_2RuO_3 с распределением димеров Ru, и, во-вторых, группа изоструктурных соединений $\text{Ba}_4\text{NbTM}_3\text{O}_{12}$ (TM = Mn, Rh, Ir), в структуру которых входят тримеры переходных металлов из различных периодов Периодической таблицы Д. И. Менделеева. Такие кластеры обуславливают дополнительные степени свободы атомов в кристаллической решетке, что приводит к появлению новых физических свойств, прежде всего магнитных. Соединения подобного рода очень перспективны для получения тонкопленочных магнитных гетероструктур, возможности применения которых в качестве микрокомпонентов электронной базы очень велики. Изучение этих явлений есть актуальная задача с точки зрения поиска и практического применения новых функциональных материалов.

Степень обоснованности научных результатов и выводов

Полученные в данной диссертационной работе результаты и выводы являются полностью научно обоснованными, т. к., во-первых, первопринципные расчеты были проведены с помощью хорошо известных и неоднократно апробированных в большинстве мировых научных групп вычислительных кодов (VASP, WIEN2K, PHONOPY и др.). Во-вторых, полученные соискателем результаты были подтверждены экспериментальными результатами.

Научная новизна

В данной диссертационной работе первопринципными методами квантовой теории представлены результаты, в которых впервые:

- установлена природа всех наблюдаемых в спектрах комбинационного рассеяния света возбуждений в рутенатах SrRu_2O_6 , AgRuO_3 и Li_2RuO_3 ;
- выявлены колебательные моды, отвечающие особенностям структурных свойств Li_2RuO_3 ;
- установлено, что для систем $\text{Ba}_4\text{NbTM}_3\text{O}_{12}$ (где $\text{TM} = \text{Mn}, \text{Rh}, \text{Ir}$) с увеличением атомного номера происходит изменение локализации электронов с одного атома к локализации на кластере из трёх атомов, что приводит формированию молекулярных орбиталей.

Так же соискателем показано, что для описания магнитных свойств соединения PdCrO_2 необходим выход за пределы модели Гайзенберга.

Все эти результаты являются абсолютно новые.

Полученные соискателем результаты, которые представлены в данной диссертационной работе, полностью отражают поставленные перед ней цели и задачи. Содержание автореферата соответствует содержанию диссертации. Тема диссертации соответствует заявленной специальности 1.3.8. «Физика конденсированного состояния».

Данная диссертация представляет собой целостное и логически завершенное научное исследование низкоразмерных моттовских изоляторов Li_2RuO_3 и соединений $\text{Ba}_4\text{NbTM}_3\text{O}_{12}$ ($\text{TM} = \text{Mn}, \text{Rh}, \text{Ir}$). Хорошо известно, что исследование электронной структуры, магнитных и динамических свойств соединений с сильными кулоновскими

корреляциями является одним из наиболее важных направлений в области современной физики конденсированных сред. Сложные взаимодействия между электронными и решеточными степенями свободы приводят к тому, что такие внешние параметры, как температура, давление, магнитные и электрические поля, дефектность и т.п., существенно влияют на свойства данных материалов. Это приводит к большому числу фаз и различных эффектов упорядочения (спинового, орбитального, зарядового), что важно как для фундаментальных исследований, так и для различных применений в современной микро- и оптоэлектронике, создания высокочувствительных датчиков, сверхбыстрых переключателей, катализаторов, накопителей энергии и т.д..

Представленные Комлевой Е.В. результаты по первопринципному моделированию решеточных и динамических свойств низкоразмерных окислов переходных металлов имеют важное значение для понимания физических процессов в этих соединениях и служат базой для дальнейшего изучения и объяснения свойств низкоразмерных мотттовских изоляторов, содержащих окислы переходных металлов.

Язык и стиль оформления автореферата и самой диссертации соответствует требованиям, предъявляемых к диссертационным работам.

По теме данной диссертации опубликовано пять работ в периодических научных изданиях, входящих в список ВАК (Phys. Rev. B). Результаты, полученные соискателем, были доложены на семи конференциях и симпозиумах, в том числе и международных.

В целом, данная кандидатская диссертационная работа Комлева Е.В. полностью соответствует Положению о порядке присуждения ученых степеней.

Но, при общей положительной оценке данной диссертационной работы у официального оппонента возник к соискателю ряд вопросов и замечаний.

Так, в тексте диссертации на:

1. Стр.5, 30. Термин решетка типа «пчелиные соты» не совсем корректен. Тут необходимо использовать термин «гексагональная решетка».
2. Стр. 22. Соискатель пишет: «В результате трансляции может быть получен кристалл любого размера». Это неверное суждение. В результате трансляции элементарной ячейки мы получаем модель бесконечного кристалла.
3. Стр. 32. Соискатель пишет: «Экспериментально полученные величины энергии активации составляют десятки мэВ для обоих соединений». Из текста диссертации не ясно, о какой энергии активации идет тут речь. Необходимо это пояснить.

4. Стр. 36. Соискатель пишет: «Расчитанный фононный спектр представлен на Рис. 2.6.» На этом рисунке представлен не фононный спектр, а фононные дисперсионные кривые.
5. Стр. 47. Термин «большая квазидвумерность» не совсем корректен. Здесь нужно подобрать другой термин.
6. Стр. 52. Термин «экспериментально пик пропадает» тоже не корректен.
7. Стр. 54 и 58. Термин «перемещение более коротких связей» не ясен и требует уточнения.
8. На стр. 72 (Рис. 4.4) и стр.76 (Рис. 7.6) представлены графики СОНР. На этих графиках отсутствуют обозначения осей абсцисс. Поэтому не ясно, где связывающие состояния, где несвязывающие, а где антисвязывающие. Полагаю, что это чисто ошибка оформления.

Но эти незначительные замечания никак не отражают общее положительное впечатление от диссертационной работы Комлевой Евгении Викторовны и она заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. «Физика конденсированного состояния».

Официальный оппонент, к.ф.-м.н., ведущий
научный сотрудник ИХТТ УрО РАН

_____ (ин И.Р.)

Подпись Шеина Игоря Роленовича заверяю. _____

Ученый секретарь ИХТТ УрО РАН

(Богданова Е.А.)

14.06.2022.

С отзывом ~~от~~ отмакашена. 14.06.2022 г.

Кашева Е.В.

Сведения об официальном оппоненте

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

Полное наименование организации в соответствии с Уставом	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук
Сокращенное наименование организации в соответствии с Уставом	ИХТТ УрО РАН
Ведомственная принадлежность и тип организации	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Место нахождения	620990, Россия, г. Екатеринбург, ул. Первомайская, д. 91
Почтовый адрес	620108, Россия, г. Екатеринбург, ул. Первомайская, д. 91
Телефон	+7 343 361-31-15
E-mail	shein@ihim.uran.ru
Web-site	ihim.uran.ru
Фамилия, имя, отчество	Шейн Игорь Роленович
Ученая степень, ученое звание	Кандидат физико-математических наук
Научная специальность	Химия твердого тела
Должность	Ведущий научный сотрудник Лаборатории квантовой химии и спектроскопии

Краткий список научных работ:

1. Krasnov A.G., Napalkov M.S., Vlasov M.I., Koroleva M.S., Shein I.R., Piir I.V. "Photocatalytic properties of $\text{Bi}_{2-x}\text{Ti}_2\text{O}_{7-1.5x}$ ($x=0, 0.5$) pyrochlores: hybrid DFT calculations and experimental study"// *Inorganic Chemistry*/ v. 59, № 17, pp. 12385-12396 (2020), DOI 10.1021/acs.inorgchem.0c0147.
2. Koroleva M.S., Krasnov A.G., Senyshyn A., Schokel A., Shein I.R., Vlasov M.I., Piir I.V. "Structure, thermal stability, optoelectronic and electrophysical properties of Mg- and Na-codoped bismuth niobate pyrochlores: Experimental and theoretical study"// *J. Alloys and Comp.*, v.858, № 157742 (2021), DOI 10.1016/j.jallcom.2020.157742.
3. Politov B.V., Shishkin R.A., Markov A.A., Shein I.R., Suntsov A.Y. "Defect formation peculiarities and redox properties of novel oxygen carrier material $\text{LaCu}_{0.5}\text{Ti}_{0.5}\text{O}_{3 \pm \delta}$ at elevated temperatures"// *Solid State Science*, v. 110, № 106480 (2020), DOI 10.1016/j.solidstatesciences.2020.106480.
4. Shein I.R., Novikov V.V., Kuznetsov S.V., Ponkratov K.V., Matovnikov A.V., Mitroshenkov N.V., Kornev B.I., Morozov A.V., Prishchep V.L., Bud'ko S.L. "Thermodynamic properties and lattice dynamics investigation of LuB_2C : experiment and ab initio calculations"// *Phys. Chem. Chem. Phys.*, v. 21, № 44, pp. 4684-24694 (2019), DOI 10.1039/c9cp02880c.
5. Шейн И.Р. "Механическая и динамическая стабильность комплектного и нестехиометрического $3\text{C}-\text{Si}_x\text{C}_y$ из ab initio расчетов"// *ФТТ*, т. 60, № 10, стр. 1969-1974 (2018), DOI 10.21883/FTT.2018.10.46525.090.

6. Suetin D.V., Shein I.R. "Electronic properties and Fermi surface for new layered high-temperature superconductors $\text{CaAFe}_4\text{As}_4$ (A = K, Rb, and Cs): FLAPW-GGA Calculations"// J. Supercond. And Novel Magnet., v. 31, № 6, pp. 1683-1692 (2018), DOI 10.1007/s10948-017-4404-y.

7. Baklanova I.V., Zhukov V.P., Krasil'nikov V.N., Gyrdasova O.I., Buldakova L.Y., Shalaeva E.V., Polyakov E.V., Kuznetsov M.V., Shein I.R., Vovkotrub E.G."Fe and C doped TiO_2 with different aggregate architecture: Synthesis, optical, spectral and photocatalytic properties, first-principle calculation"// J. Phys. Chem. Solid, v. 111, pp. 473-486 (2017), DOI 10.1016/j.jpss.2017.08.024.

Ведущий научный сотрудник
Лаборатории квантовой химии и спектроскопии

(Шейн И.Р.)

Подпись Шеина И.Р. заверяю:

Ученый секретарь ИХТТ УрО РАН



__ (Богданова Е.А.)