



ОТЗЫВ

ведущей организации 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

Актуальность темы диссертации

Актуальность диссертационной работы Е.В. Комлевой определяется тем, что в качестве объектов исследования выступают материалы, на протяжении последних лет привлекающие внимание широкого круга авторов и обладающие рядом необычных свойств. Результаты, представленные в диссертации, демонстрируют возможность успешного применения современных теоретических и численных подходов для понимания аномалий спектральных свойств рутенатов, а также описания поведения некоторых кластерных моттовских диэлектриков.

В диссертационной работе Е.В. Комлевой сформулирована актуальная цель – с помощью первопринципных расчётов исследовать решёточные и магнитные свойства некоторых низкоразмерных оксидов переходных металлов, а именно рутенатов с решёткой типа «пчелиные соты» SrRu_2O_6 , AgRuO_3 и Li_2RuO_3 , системы со структурными тримерами переходных металлов $\text{Ba}_4\text{NbTM}_3\text{O}_{12}$ ($\text{TM}=\text{Mn}, \text{Rh}, \text{Ir}$) и слоистого соединения с большим параметром фрустрации PdCrO_2 . Все эти соединения широко изучаются в настоящее время. Для них имеется ряд недавно полученных экспериментальных данных, для понимания и объяснения которых необходимо проведение теоретических расчётов и анализ этих результатов. Решение поставленных в данной диссертации задач даёт ответы на некоторые актуальные физические проблемы физики сильно коррелированных материалов.

Структура и основное содержание работы

Диссертационная работа Е.В. Комлевой состоит из введения, 5 глав, заключения и списка литературы.

Во введении автор обосновывает актуальность диссертационной работы, формулирует цель и задачи и аргументирует научную новизну исследований.

В первой главе автор проводит обзор методов расчётов электронной структуры из первых принципов, в частности основанных на теории функционала плотности, а также инструментов, позволяющих моделировать динамику решётки соединений.

Во второй главе с помощью моделирования фононных спектров и магнетонной плотности состояний в рамках теории функционала плотности и самосогласованной спин-волновой теории, а также рассмотрения симметричных свойств в совокупности с электронной структурой автором была проведена идентификация линий в спектрах комбинационного рассеяния света в SrRu_2O_6 и AgRuO_3 . Помимо этого были оценены параметры изотропного обменного взаимодействия и параметры прямого и непрямого перескоков электронов между ионами Ru. Для AgRuO_3 автором также было получено объяснение особенностей спектров мюонной спиновой спектроскопии на основании наличия в кристаллах мюонных ловушек, переход между которыми при низких температурах не приводит к компенсации внутреннего дипольного магнитного поля в образце.

Третья глава посвящена моделированию динамики решётки димеризованного слоистого рутената Li_2RuO_3 . Благодаря анализу полученных нормальных смещений атомов автором определены моды, которые соответствуют эффективному перемещению димеров по решётке, а именно «переключению» более короткой связи Ru-Ru между тремя связями с ближайшими соседями.

В четвёртой главе автором рассмотрена физика электронов, принадлежащих ионам переходного металла, образующим линейный тример, на примере серии изоструктурных соединений $\text{Ba}_4\text{NbTM}_3\text{O}_{12}$, где $\text{TM} = \text{Mn}, \text{Rh}, \text{Ir}$. Геометрическая близость атомов даёт основание ожидать формирование молекулярных орбиталей на тримерах, однако проведённые автором первопринципные и модельные расчёты и СОНР анализ свидетельствуют о формировании молекулярных орбиталей в $5d$ и $4d$ системах и их отсутствию в случае $3d$ Mn. Таким образом, установлена тенденция к формированию молекулярных орбиталей с ростом номера периода, которому принадлежит переходный металл в таблице Д.И. Менделеева. Наряду с этим, автор рассмотрел магнитные свойства соединений и результаты расчёта основного магнитного состояния хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Пятая глава содержит результаты первопринципного расчёта параметров обменного взаимодействия для различных значений параметра U для слоистого соединения с треугольной решёткой PdCrO_2 . Автором также построена магнитная фазовая диаграмма для треугольной решётки. Оценки температуры Нееля в рамках теории среднего поля и её расчёт в рамках самосогласованной спин-волновой теории показал значительную переоценку экспериментального значения, что дало автору основание судить о необходимости выхода за пределы модели Гайзенберга для корректного описания магнитных свойств PdCrO_2 .

В Заключении перечислены основные результаты и выводы диссертационной работы.

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.

Научная новизна результатов диссертационной работы

В ходе выполнения работы Е.В. Комлевой был получен ряд оригинальных результатов, которые определяют научную новизну диссертационной работой. Все результаты работы являются оригинальными. Впервые установлена природа всех наблюдаемых в спектрах комбинационного рассеяния света возбуждений в рутенатах SrRu_2O_6 , AgRuO_3 и Li_2RuO_3 . Предложено объяснение наблюдаемого пика в спектрах мюонной спиновой спектроскопии в AgRuO_3 . Впервые выявлены колебательные моды, отвечающие особенностям структурных свойств Li_2RuO_3 . Впервые установлено, что в серии соединений $\text{Ba}_4\text{NbTM}_3\text{O}_{12}$, где $\text{TM} = \text{Mn}, \text{Rh}, \text{Ir}$, с увеличением номера периода, к которому принадлежит переходный металл в таблице Д.И. Менделеева, происходит изменение от локализации электронов на одном узле к локализации на кластере из трёх ионов и формированию молекулярных орбиталей. Показано, что для описания магнитных свойств соединения PdCrO_2 необходим выход за пределы модели Гайзенберга.

Достоверность результатов и обоснованность выводов

Достоверность результатов, приведённых в диссертационной работе, обеспечивается применением надёжных расчётных методик, а также согласием результатов расчётов с экспериментальными данными. Выводы, выносимые на защиту, являются подтверждёнными и обоснованными.

Практическая значимость полученных результатов

Практическая значимость результатов определяется тем, что с их помощью удалось интерпретировать имевшиеся экспериментальные спектры рутенатов SrRu_2O_6 , AgRuO_3 и Li_2RuO_3 , объяснить установленное экспериментально различие магнитных свойств соединений серии $\text{Ba}_4\text{NbTM}_3\text{O}_{12}$ и выявить факторы, определяющие необычное понижение температуры магнитного перехода в PdCrO_2 . Полученные автором результаты могут быть также использованы при анализе соединений, изоструктурных к исследованным в работе.

Замечания по диссертационной работе

1. Работа содержит термин «первопринципное моделирование», и, действительно, основные результаты получены в рамках первопринципных подходов. В тоже время подход $\text{GGA}+U$, использованный в четвертой и пятой главах работы, нельзя назвать первопринципным, ибо он содержит подгоночный параметр U .
2. Расчет обменных взаимодействий для PdCrO_2 выполнен сравнением полных энергий различных рассчитанных магнитных состояний с энергией изотропной модели Гейзенберга. Почему именно с такой моделью? Может анизотропная модель Гейзенберга или другая более сложная модель дали бы лучшие результаты?

Отмеченные недостатки не затрагивают основных выводов и результатов диссертации, не снижают их ценности и не ставят под сомнение их значимость.

Заключение (выводы о работе)

Диссертационная работа Е.В. Комлевой обладает внутренним единством и является завершённой научно-квалификационной работой. С помощью первопринципных расчётов были получены результаты, хорошо согласующиеся с экспериментальными данными и способные объяснить их.

Результаты диссертации могут быть использованы в научных и образовательных организациях, где осуществляются теоретические и экспериментальные исследования магнитных низкоммерных материалов, например, ИФП РАН (г.Москва), ФИАН (г.Москва), ФИЦ КНЦ СОРАН (г. Красноярск), ФТИ им Иоффе (г. Санкт-Петербург), Московский, Санкт-Петербургский, Новосибирский, Дальневосточный федеральный Университеты.

Автореферат полно и правильно отражает основные результаты диссертационной работы.

Диссертация «Первопринципное моделирование решёточных и магнитных свойств низкоразмерных оксидов переходных металлов» полностью соответствует всем требованиям «Положения о присуждении учёных степеней», предъявляемым к кандидатским

диссертациям, а её автор – Комлева Евгения Викторовна – заслуживает присуждения ей учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Доклад Е.В. Комлевой по материалам её диссертационной работы был заслушан на заседании семинара отдела физики магнитных явлений ИФСОРАН-обособленного подразделения ФИЦ КНЦ СОРАН (протокол № 3 от 24.05.2022 г.) и получил одобрение участников семинара. Отмечена перспективность проведённых исследований, а также соответствие объёма и качества полученных результатов требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

Заведующий лабораторией физики магнитных явлений
Института физики имени Л.В. Киренского СО РАН,
доктор физ.-мат. наук

С.Г. Овчинников

Почтовый адрес: 660036, г. Красноярск, Академгородок, д. 50, стр. 38

Тел.: (391)2432906

E-mail: sgo@iph.krasn.ru

Подпись _____ С.Г. Овчинникова _____ заверяю

ученый секретарь ИФ СО РАН,

кандидат физ.-мат. наук



О. Злотников

*С отзывом ознакомлена. 10.06.2022 г.
Кашева Е.В.*

Сведения о ведущей организации

Полное наименование: Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН

Краткое наименование: ИФСОРАН

Почтовый адрес: 66036, г.Красноярск, ул. Академгородок, 50/38

Тел.: (391)243-26-35

E-mail: dir@iph.krasn.ru

<http://www.kirensky.ru/>

Основные научные направления

1. Электронная структура, межэлектронные взаимодействия и физические свойства переходных металлов, сплавов и соединений на их основе: оксидов, галогенидов, ферроборатов.
2. Магнитные структуры, спиновый транспорт и методы направленной модификации физических свойств в функциональных магнитных материалах.
3. Структура и физические свойства магнитных наночастиц и наноматериалов
4. Фазовые переходы в кристаллах, структурные, диэлектрические, термодинамические свойства. Мультиферроики.
5. Атомно-структурные превращения, нелинейные явления и неравновесные процессы в конденсированных средах.

Публикации в сфере исследований, которым посвящена диссертация

1. Balaev D.A., Poperechny I.S., Krasikov A.A., Semenov S.V., Popkov S.I., Knyazev Y.V., Kirillov V.L., Yakushkin S.S., Martyanov O.N., Raikher Yu.L. Dynamic remagnetisation of CoFe₂O₄ nanoparticles: Thermal fluctuational thawing of anisotropy. Journal of Physics D: Applied Physics. 2021, 54, 27, 275023.
2. Zhandun V.S. The magnetic, electronic, optical, and structural properties of the AB₂O₄ (A = Mn, Fe, Co; B = Al, Ga, In) spinels: Ab initio study // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. - 2021. - Vol. 533. - P. 168015.

3. Val'Kov V.V., Dzebisashvili D.M., Korovushkin M.M., Barabanov A.F. Spin-polaron concept in the theory of normal and superconducting states of cuprates // Physics-Uspokhi. - 2021. -Vol. 64, No. 7. - P. 641-670.
4. Sofronova S.N., Kazak N.V., Eremin E.V., Moshkina E.M., Chernyshov A.V., Bovina A.F. Magnetization reversal and sign reversal exchange bias field in polycrystalline Ni_{5.33}Ta_{0.67}B₂O₁₀ // Journal of Alloys and Compounds. - 2021. - Vol. 864. - P. 158200.
5. Shneyder E.I., Zotova M.V., Nikolaev S.V., Ovchinnikov S.G. Phonon-assisted insulator-metal transitions in correlated systems driven by doping // Physical Review B. - 2021. - Vol. 104, Is.15. - P. 155153.

Ученый секретарь ИФСО РАН



кандидат физ.-мат. наук А.О.Злотников