

## ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

на диссертацию **Драганюк Оксаны Николаевны** «Теоретическое исследование магнитных и электронных свойств  $M_2AX$ -фаз ( $M = Mn, Cr, Fe; A = Al, Si, Ga, Ge, Fe; X = C, N$ )», представленную к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа О.Н. Драганюк посвящена актуальной теме – теоретическому исследованию новых функциональных магнитных материалов, обладающих высокой намагниченностью и температурой Кюри. Объектами исследования в работе являются  $M_nAX_{n-1}$  – фазы (M-металл, A-элемент группы A, C – углерод или азот) – новейший класс материалов, сочетающих в себе металлические и керамические свойства благодаря своей уникальной слоистой структуре. Основная идея работы заключается в поиске новых стабильных  $M_nAX_{n-1}$  – фаз ( $M = Mn, Fe$  и  $Cr$ ), обладающих привлекательными магнитными свойствами, и способов формирования в них ферромагнетизма, в том числе с помощью давления и допирования. Кроме того, синтез магнитных  $M_nAX_{n-1}$ -фаз, как правило, безуспешен из-за низкой фазовой стабильности таких соединений, поэтому важно исследовать не только магнитные и электронные свойства, но и динамическую и термодинамическую стабильность соединений, а также изучить возможные пути стабилизации  $M_nAX_{n-1}$ -фаз. Обширные теоретические исследования позволяют выявить наиболее перспективные для дальнейшего исследования материалы и направить экспериментальный синтез. Поэтому целью диссертационной работы Драганюк О.Н. стало исследование стабильности, а также магнитных и электронных свойств магнитных  $M_2AX$ -фаз на основе марганца, железа и хрома в рамках первопринципного подхода, в частности, влияние состава и давления на физические свойства  $M_2AX$ -фаз.

О.Н. Драганюк успешно справилась с поставленной задачей. В ходе работы в рамках теории функционала плотности были рассчитаны магнитная и электронная структура  $M_2AX$ -фаз ( $M = Mn, Cr, Fe; A = Al, Si, Ga, Ge, Fe; X = C, N$ ) и исследована их фазовая стабильность. Был получен ряд оригинальных результатов в области физики конденсированного состояния, а именно: впервые показана возможность стабилизации некоторых  $M_2AX$ -фаз:  $Mn_2AlC$ ,  $Fe_2GaC$ ,  $Mn_2GeN$ ,  $Mn_2GeC$  при приложении давления. Обнаружены термодинамически стабильные ферромагнитные допированные соединения  $Mn_2(Al_{0.125}Ga_{0.875})C$ ,  $Mn_2(Al_{0.25}Ga_{0.75})C$ ,  $Mn_2(Al_{0.5}Ga_{0.5})C$ ,  $Mn_2Fe_{0.125}Ga_{0.875}C$  с высокой намагниченностью и температурой магнитного перехода. Полученные в ходе исследования результаты показывают перспективность использования  $M_2AX$ -фаз в приложениях спинtronики и микроэлектроники.

Основные положения и выводы диссертационного исследования изложены в 3 рецензируемых научных статьях в изданиях из Перечня ВАК, которые проиндексированы в наукометрических системах Web of Science и Scopus, а также в 5 тезисах докладов.

Представленные в работе результаты были получены лично Драганюк О.Н., либо при непосредственном ее участии. В своей научно-исследовательской работе она проявила себя самостоятельным заинтересованным специалистом, продемонстрировав умение находить пути решения поставленных задач, анализировать результаты и делать выводы. Хорошее владение современными теоретическими методами, корректность при проведении исследований и интерпретации полученных результатов позволили Драганюк О.Н. успешно завершить работу над кандидатской диссертацией.

На основании вышесказанного считаю, что работа «Теоретическое исследование магнитных и электронных свойств  $M_2AX$ -фаз ( $M = Mn, Cr, Fe$ ;  $A = Al, Si, Ga, Ge, Fe$ ;  $X = C, N$ )» полностью соответствует требованиям ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а ее автор Драганюк О.Н. заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Научный руководитель:

старший научный сотрудник  
лаборатории КФ, ИФ СО РАН,  
кандидат физ. - мат. наук, доцент

Жандун Вячеслав Сергеевич

«2» декабря 2024г

Подпись	<u>Жандун В.С.</u>	заверяю
Ученый секретарь	<u>Б.Г.-М.Н.</u>	
Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН (ИФ СО РАН)		
« <u>02</u> »	<u>12</u>	<u>2024</u> г.

