

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.228.01, СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО НАУЧНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ «ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КРАСНОЯРСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК» (ФИЦ КНЦ СО РАН, КНЦ СО РАН), ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 26.04.2024 г. № 8
о присуждении Полукееву Семёну Игоревичу,
гражданину Российской Федерации,
ученой степени кандидата физико-математических наук

Диссертация «Обменное взаимодействие в магнитных диэлектриках. Вклад возбуждённых состояний» по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния принята к защите 16.02.24 г. (протокол заседания №5) диссертационным советом 24.1.228.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук» (ФИЦ КНЦ СО РАН), 660036 Красноярск, Академгородок, д. 50, приказ Минобрнауки №1513/нк от 25.11.2016 г.

Соискатель Полукеев Семён Игоревич, 02 декабря 1992 года рождения, в 2020 году окончил очную аспирантуру Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук» по направлению 03.06.01 «Физика и астрономия», по программе 01.04.07 «Физика конденсированного состояния». Работает младшим научным сотрудником в лаборатории физики магнитных явлений Института физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленного подразделения ФИЦ КНЦ СО РАН.

Диссертация выполнена в лаборатории физики магнитных явлений Института физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленного подразделения ФИЦ КНЦ СО РАН.

Научный руководитель – *Гавричков Владимир Александрович*, доктор физико-математических наук, с.н.с., ведущий научный сотрудник лаборатории физики магнитных явлений Института физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленного подразделения ФИЦ КНЦ СО РАН.

Официальные оппоненты:

Некрасов Игорь Александрович, доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН, главный научный сотрудник лаборатории теоретической физики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук;

Михеенков Андрей Витальевич, доктор физико-математических наук, доцент, руководитель теоретического отдела Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук – дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук (ИФМ УрО РАН) в своем положительном отзыве, подписанным Ирхиным Валентином Юрьевичем, доктором физико-математических наук, главным научным сотрудником, заведующим лабораторией квантовой теории конденсированного состояния и Стрельцовым Сергеем Владимировичем, доктором физико-математических наук, членом-корреспондентом РАН, главным научным сотрудником, заведующим лабораторией теории низкоразмерных спиновых систем, утвержденным директором ИФМ УрО РАН Мушниковым Николаем Варфоломеевичем, доктором физико-математических наук, академиком РАН, указала, что диссертационная работа С. И. Полукеева является завершённой научно-квалификационной работой, содержащей важные новые результаты о магнитных свойствах оксидов переходных элементов, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение, имеющее значение для понимания тонких ме-

ханизмов взаимодействий, реализующихся в системах с сильными электронными корреляциями.

Соискатель имеет 14 опубликованных работ по теме диссертации, в том числе в рецензируемых научных изданиях опубликовано 5 работ.

1. Gavrichkov V. A., Polukeev S. I., Ovchinnikov S. G. Cation spin and superexchange interaction in oxide materials below and above spin crossover under high pressure, *Phys. Rev. B* 101, 094409 (2020).

2. Gavrichkov V. A., Polukeev S. I., Ovchinnikov S. G. Contribution from optically excited many-electron states to the superexchange interaction in Mott-Hubbard insulators, *Phys. Rev. B* 95, 144424 (2017).

3. Polukeev S.I., Gavrichkov V.A., Ovchinnikov S.G. Effects of optical intra-gap transitions on superexchange interaction in La_2CuO_4 with nonequilibrium photoexcited centers, *Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics*, 11(2), 159–170 (2018).

4. V. A. Gavrichkov, S. I. Polukeev, S. G. Ovchinnikov Superexchange Interaction in Magnetic Insulators with Spin Crossover, *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, volume 127, p.713–720 (2018).

5. Mikhaylovskiy R. V., Huisman T. J., Gavrichkov V. A., Polukeev S. I., Ovchinnikov S. G., Afanasiev D., Pisarev R. V., Rasing Th., Kimel A. V. Resonant pumping of d-d crystal field electronic transitions as a mechanism of ultrafast optical control of the exchange interactions in iron oxides, *Phys. Rev. Lett.* 125, 157201 (2020).

На диссертацию и автореферат поступили отзывы (все положительные):

Ведущая организация (ИФМ УрО РАН). Отзыв положительный. Замечания:

1. При получении критерия ферро- и антиферромагнитного упорядочения через значения спинов релевантных состояний в работе использован формализм многоэлектронных операторов Хаббарда. Следовало бы более явно сделать оговорку (особенно в Заключение), что проведенное рассмотрение не является универсальным, а (модельно) описывает пару магнитных ионов, а в общем случае необходим последовательный учет (I) кристаллического поля, (II) наличия спин-орбитального взаимодействия и (III) зависимости эффективного сверхобменного

взаимодействия от угла связи металл-лиганд-металл. Представляется важным сравнить полученные правила с правилами Гудинафа – Канамори в терминах заполнения зон. 2. При описании мотт-халльбардских систем La_2CuO_4 и FeVO_3 было бы полезно обсудить роль процессов переноса заряда (charge transfer) в формировании основного изоляторного состояния и важность аккуратного учета таких процессов для количественной оценки обменного взаимодействия (в том числе для ионов, находящихся в возбужденном состоянии). Аналогично для других систем с ионами переходных металлов середины и конца 3d ряда. 3. Также следовало бы гораздо более осторожно отнестись к применимости рассматриваемого подхода к металлам. Например, вызывает серьезные опасения даже сама возможность использования предлагаемого подхода для полуметаллического ферромагнетика CrO_2 , где доминирующим является двойное обменное взаимодействие, основанное на сосуществовании двух подсистем – локализованных и коллективизированных (металлических) электронов. Наличие коллективизированных носителей никак не учитывается в подходе автора. Мелкие замечания по тексту диссертации: Имеется ряд неудачных выражений («возбуждённая обменная петля», «в невозбуждённом материале») и не вполне ясных фраз, например: 1. Эти эффекты частично учитываются в настоящем подходе даже во втором порядке возбуждения ячейки посредством процедуры точной диагонализации для внутриячеечной части гамильтониана (2.1). – с. 61; 2. Не ясно, что понимается под «частичным вкладом» в заключении на с. 95? 3. Термин «спин электрон-дырочной пары», который используется, например, в заключении на с. 95, представляется не вполне адекватным. Вероятно, речь идет о магнитных моментах (спинах) ионов, образующих пару, а не двух выбранных носителей? Схожие не вполне корректные выражения используются в ряде мест диссертации. 4. Требуется пояснения фраза «... фактором сравнения ФМ и АФМ вкладов...» в заключении на с. 95. Что такое фактор сравнения? Имеются также незначительные погрешности пунктуации.

Д.ф.-м.н., доцент, Михеенков Андрей Витальевич – официальный оппонент.

Отзыв положительный. Замечания: 1. Преобразование (1.8), (1.9), появляющееся в

разделе 1.2, конечно, унитарное, но, все-таки, у него есть историческое «именное» название – преобразование Шриффера – Вульффа. 2. Базовые модели – Гейзенберга, Хаббарда, p - d модель – в диссертации представлены через стандартные спиновые и фермиевские операторы. А при переходе к конкретным расчетам неустрашимо возникают X -операторы. Конечно, здесь такая «двузначность» неизбежна – было бы странно представлять базовые модели в X -операторах. Но все-таки желательно уведомить о переходе на другой тип операторов, или представить в приложении их список. 3. Похожее замечание относительно проекторов. При первом появлении проекторов после формулы (1.10) они вводятся описательно, через их свойства, а в конкретных вычислениях выписаны явно, через X -операторы. 4. Относительно части работы, касающейся купратов. В этой области существуют два теоретических потока. В одном, восходящем еще к работам 1990-х годов по RVB, принимаются ограничения теоремы Мермина – Вагнера, связанные с двумерностью. В другом считается, что в реальном соединении эти ограничения несущественны. Диссертация, очевидно, принадлежит ко второму типу, и об этом было бы разумно упомянуть.

Д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН, Некрасов Игорь Александрович – официальный оппонент. Отзыв положительный. Замечания: 1. В работе для описания свойств реальных систем используются некоторые величины констант взаимодействия в спиновом гамильтониане (величины обменных интегралов). В настоящее время принято рассчитывать эти константы взаимодействия из «первых принципов», однако в работе таких расчетов не приводится. Скорее всего, такие расчёты для исследуемых материалов были проведены другими группами (рассмотренные материалы достаточно популярны). Хотелось бы увидеть сравнение, где возможно, величин параметров, использованных в данной работе и полученных в расчётах. 2. При использовании точной диагонализации конечных кластеров, в том числе и в методе GTB, всегда есть зависимость результата от размерности размера выбранного кластера и выбора базиса состояний включенных в рассмотрение. Хотелось бы услышать комментарии по данному вопросу. 3. Некоторое время назад каса-

тельно ионов кобальта и железа употреблялся термин «промежуточное спиновое состояние», который описывал некоторое стабильное состояние между низко- и высокоспиновыми состояниями, которое возникает либо при изменении давления, либо при изменении температуры. Однако, в настоящей работе данное состояние никак не обсуждается. Почему?

Д.ф.-м.н. Бебенин Николай Георгиевич. Отзыв положительный. Замечание: автору следовало быть аккуратнее при подготовке текста. Ссылка на работу А7 написана так, что догадаться о наличии С.И. Полукеева в списке авторов не просто. Посредством букв J и D обозначают не гамильтонианы сверхобменного взаимодействия и взаимодействия Дзялошинского – Мории, а только параметры, фигурирующие в соответствующих формулах.

Д.ф.-м.н., Вахитов Роберт Минниславович. Отзыв положительный. Замечаний нет.

Д.ф.-м.н. Прудников Павел Владимирович. Отзыв положительный. Замечания: 1. На стр. 13 автореферата в формуле (14) для величин сверхобменного и спин-орбитального взаимодействий используются обозначения D_{ex} и J_{ex} , которые появляются в автореферате в этой формуле и в дальнейшем не используются. 2. На стр. 9 автореферата используется фраза «В LDA+GTV методе параметры гамильтониана были вычислены *ab initio* [7]». Хотелось бы уточнить, что означает термин *ab initio* именно в этом случае.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается соответствием направлений научных исследований, выполняемых оппонентами и реализуемых в ведущей организации, тематике представленной диссертационной работы, наличием публикаций и высоких достижений в соответствующей области исследований.

Диссертационный совет отмечает, что в выполненном соискателем исследовании: – Впервые была построена теория сверхобменного взаимодействия в магнитных диэлектриках с учётом полного набора возбуждённых многоэлектронных состояний магнитного катиона, в отличие от существующих теоретических работ, где учитываются только основные состояния.

– Показано, что соединения с магнитными ионами в конфигурациях d^5 и d^7 могут изменить характер магнитного упорядочения с АФМ на ФМ при оптической накачке или при переходе с изменением спинового состояния под давлением.

Теоретическая значимость исследования заключается в том, что полученные результаты позволяют без сложных вычислений определить характер сверхобменного взаимодействия в магнитных диэлектриках и его изменений при различных внешних воздействиях, который зависит только от соотношения спинов электрон-дырочной пары, возникающей в процессе сверхобмена, и от величины перекрытия между ними.

Значение результатов исследования для практики обусловлена тем, что обсуждаемые магнитные соединения имеют широкую область применения. Понимание механизмов воздействия на их магнитное состояние необходимо для поиска способов получения материалов с заданными магнитными свойствами. Развиваемые в данной диссертационной работе методы исследования магнитных диэлектриков вносят важный вклад в этом направлении.

Достоверность полученных результатов определяется согласованностью с данными, полученными в ходе большого количества экспериментальных исследований магнитных свойств оксидов переходных элементов под высоким давлением и под оптическим облучением посредством фемтосекундных лазерных импульсов.

Личный вклад соискателя заключается в выводе аналитического выражения для сверхобменного гамильтониана и анализе изменений суперобменного взаимодействия в оксидах, магнитные катионы переходных элементов в которых находятся в электронной конфигурации d^n ($n=2-9$), при оптическом заселении возбуждённых состояний магнитного катиона и при спиновом кроссовере, вызванном ростом кристаллического поля при высоком давлении.

В ходе защиты диссертации критических замечаний высказано не было.

На заседании 26.04.2024 г. диссертационный совет сделал вывод о том, что диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, содержит решение научной задачи, имеющей значение для развития физики конденсированного состояния, соответствует критериям, установленным Положением ВАК РФ о порядке присуждения ученых степеней, и принял решение присудить

Полукееву С. И. ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 Физика конденсированного состояния.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 9 докторов наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение ученой степени – 17, против присуждения ученой степени – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель

диссертационного совета 24.1.228.01

д.ф.-м.н., академик РАН



Шабанов Василий
Филиппович

Ученый секретарь

диссертационного совета 24.1.228.01

д.ф.-м.н., с.н.с.

Втюрин Александр
Николаевич

26 апреля 2024 года