

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Полукеева Семёна Игоревича «Обменное взаимодействие в магнитных диэлектриках. Вклад возбуждённых состояний», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Актуальность работы. В последние годы магнитные соединения, в которых под различными внешними воздействиями происходят изменения магнитного состояния, привлекли к себе большое внимание в связи с широким кругом применимости данных явлений. Особый интерес представляет возможность сверхбыстрого оптического контроля магнитного состояния вещества, а также фазовые переходы с изменением спина на магнитном ионе, вызванные ростом кристаллического поля при высоких давлениях. В настоящее время накоплен обширный объём экспериментальных данных о возможности влиять на магнитное состояние различных систем с сильными электронными корреляциями, например, купратов, манганитов и других. Это требует соответствующего развития теории магнетизма в таких соединениях.

Диссертационная работа С. И. Полукеева посвящена построению теории сверхобменного взаимодействия в оксидах переходных элементов и его изменений при оптическом заселении возбуждённых состояний магнитного иона, а также при спиновом кроссовере, индуцированном ростом кристаллического поля под высоким давлением. Данная задача является актуальной как с теоретической, так и с практической точки зрения.

Структура и содержание диссертации. Диссертация имеет чёткую структуру, состоит из введения, трёх глав, заключения и списка цитируемой литературы. Объём работы составляет 120 страниц. Автореферат состоит из 24 страниц и хорошо отражает содержание диссертации и основные результаты работы.

Во введении обсуждается актуальность и научная новизна диссертационной работы, приводятся цели и задачи работы, структура и объём работы, выносимые на защиту основные положения и краткое описание методов исследования.

Первая глава посвящена детальному обзору существующих экспериментальных и теоретических исследований обменного взаимодействия и магнитного состояния различных магнитных соединений при обычных условиях и под различными внешними воздействиями, в том числе под оптической накачкой и высокими гидростатическими давлениями.

Во второй главе представлены результаты исследования сверхобменного взаимодействия в магнитных диэлектриках, а именно оксидах переходных металлов, при сверхбыстрой лазерной накачке возбуждённых состояний

магнитного иона. Здесь же приводится построение общей теории сверхобменного взаимодействия при учёте полного набора всех возбуждённых состояний магнитного иона. Основной вывод, сделанный соискателем в данной главе, заключается в том, что в антиферромагнитном борате железа FeBO_3 знак сверхобменного взаимодействия пары ионов Fe^{3+} , один из которых перешёл в возбуждённое состояние, меняет знак на противоположный, давая ферромагнитный вклад в общую величину сверхобмена.

В третьей главе приводятся результаты, связанные с изменением величины и знака сверхобменного взаимодействия в оксидах переходных элементов с магнитными катионами в электронных конфигурациях d^2 - d^8 . Показано, что знак вклада в сверхобмен от каждой электрон-дырочной пары, появляющейся при перескоке между соседними узлами, определяется соотношением спинов электронного (S_e) и дырочного (S_h) термов. Если их спины отличаются на единицу ($S_h = S_e \pm 1$), то такая пара даёт ферромагнитный вклад, а если спины равны ($S_h = S_e$), то такой вклад будет антиферромагнитным. В ходе работы было обнаружено, что в соединениях с магнитными ионами в конфигурациях d^7 (FeBO_3) и d^7 (CoO , Ni_2O_3) спиновый кроссовер при критическом давлении приводит к изменению знака сверхобменного взаимодействия с АФМ на ФМ в результате перехода магнитных ионов в низкоспиновое состояние. Также приводится подробное сравнение полученных результатов с имеющимися в литературе экспериментальными данными, показывающее высокую степень достоверности результатов диссертационной работы.

В заключении дана подробная формулировка основных выводов и результатов диссертационной работы.

Выносимые на защиту результаты являются новыми, актуальными и физически обоснованными, они были опубликованы в пяти научных статьях в высокорейтинговых научных изданиях из перечня ВАК, все они проиндексированы в наукометрических системах Web of Science, Scopus и РИНЦ.

Диссертация представляет собой завершённое научное исследование, выполненное автором самостоятельно и на высоком уровне, а полученными результаты являются хорошо аргументированными. Применяемые в работе методы представляются хорошо обоснованными и проверенными, а наличие сравнений с экспериментальными данными обеспечивает высокую степень достоверности результатов.

К диссертационной работе, однако, имеется ряд **вопросов и замечаний**:

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 расчеты 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 расчетах.

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 касательно 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?

Указанные замечания не искажают основных результатов диссертации и не снижают её общей высокой оценки. Основываясь на вышеизложенном, считаю, что диссертационная работа С.И. Полукуева «Обменное взаимодействие в магнитных диэлектриках. Вклад возбуждённых состояний» является актуальной и законченной научно-исследовательской работой, полностью соответствующей критериям, установленным Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 №842 «О порядке присуждения учёных степеней» и всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям. С.И. Полукуев безусловно заслуживает присуждения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент Некрасов Игорь Александрович член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук - специальность 01.04.07 «Физика твердого тела», главный научный сотрудник Лаборатории теоретической физики ИЭФ УрО РАН.

09.04.2024



Подпись Некрасова И.А. удостоверяю

Ученый секретарь ИЭФ УрО РАН, к.ф.-м.н.



Кокорина Е.Е.

Сведения об официальном оппоненте

по диссертации Полукеева Семёна Игоревича «Обменное взаимодействие в магнитных диэлектриках. Вклад возбуждённых состояний», представленный на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Ф.И.О.: Некрасов Игорь Александрович

Гражданство: РФ

Ученая степень и шифр специальности: доктор физико-математических наук,
01.04.07 «Физика твердого тела»

Ученое звание: член-корреспондент РАН

E-mail: nekrasov@ier.uran.ru

Тел.: +7 343 267 8823

Основное место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук

Краткое наименование: ИЭФ УрО РАН

Адрес: 620016, Екатеринбург, ул. Амундсена, 106

Должность: главный научный сотрудник

Подразделение: Лаборатория теоретической физики

Список публикаций по теме диссертации за последние пять лет (2020-2024 гг.)

[1] Anomalous metallic oxygen band in the potential superconductor $\text{KCa}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{O}_{22}$: A DFT study / N.S. Pavlov, K.S. Pervakov, I.A. Nekrasov // Computational Materials Science 218, 111916 (2023) (SJR Q1)

<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2022.111916>

[2] Weakness of Correlation Effect Manifestation in BaNi_2As_2 : An ARPES and LDA+DMFT Study / N.S.Pavlov, T.K.Kim, A.Yaresko, Ki-Young Choi, I.A.Nekrasov, D.V.Evtushinsky // J. Phys. Chem. C 125 (51), 28075 (2021). (SJR Q1)

<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c08142>

[3] Simplicity Out of Complexity: Band Structure for $\text{W}_{20}\text{O}_{58}$ Superconductor / A.A.Slobodchikov, I.A.Nekrasov, N.S.Pavlov, M.M.Korshunov // Nanomaterials 11, 97 (2021). (SJR Q1)

<https://doi.org/10.3390/nano11010097>

[4] Electronic Structure of InCo_2As_2 and $\text{KInCo}_4\text{As}_4$: LDA + DMFT / N.S. Pavlov, I.R. Shein, K.S. Pervakov, I.A. Nekrasov / JETP Letters, 117, 61 (2023) (SJR Q2)
<https://doi.org/10.1134/S0021364022602834>

[5] Quantitative Comparison of LDA + DMFT and ARPES Spectral Functions / I.A. Nekrasov, N.S. Pavlov // JETP Letters 113, 115 (2021). (SJR Q2)
<https://doi.org/10.1134/S0021364021020089>

[6] Band Structure of Tungsten Oxide W_2O_5 with Ideal Octahedra / M.M. Korshunov, I.A. Nekrasov, N.S. Pavlov, A.A. Slobodchikov // JETP Letters 113, 57 (2021). (SJR Q2)
<https://doi.org/10.1134/S0021364021010057>

[7] Hydrides under High Pressure, Igor Nekrasov & Sergei Ovchinnikov, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism volume 35, pages 959–963 (2022),
<https://doi.org/10.1007/s10948-021-06087-3> (SJR Q3)

[8] Electronic Structure and Minimal Models for Flat and Corrugated CuO Monolayers: An Ab Initio Study
by Anatoly A. Slobodchikov, Igor A. Nekrasov, Lyudmila V. Begunovich, Ilya A. Makarov, Maxim M. Korshunov and Sergey G. Ovchinnikov, Materials 2023, 16(2), 658;
<https://doi.org/10.3390/ma16020658> (SJR Q2)

Официальный оппонент Некрасов Игорь Александрович член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Лаборатории теоретической физики ИЭФ УрО РАН.

ВЕРНО

Ученый секретарь ИЭФ УрО РАН, к.ф.-м.н.



Кокорина Е.Е.