



УТВЕРЖДАЮ

Директор ИФМ УрО РАН
академик РАН

Н.В. Мушников

«13» марта 2024 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу
Полукеева Семена Игоревича
на тему «Обменное взаимодействие в магнитных диэлектриках.
Вклад возбуждённых состояний»,

представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Актуальность темы диссертации

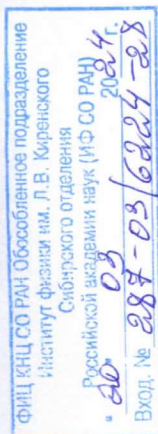
Актуальность диссертационной работы Полукеева С.И. обусловлена получением ряда новых экспериментальных результатов, связанных с исследованием сверхбыстрого оптического перемангничивания магнитных диэлектриков и фазовых переходов с изменением величины спина на магнитном ионе под сверхвысоким давлением. Исследованные в диссертации оксиды переходных элементов относятся к классу систем с сильными электронными корреляциями, интересных с точки зрения изучения высокотемпературной сверхпроводимости и дальнейшего развития физики магнитных явлений.

Структура и основное содержание диссертации

Диссертация Полукеева С.И. состоит из введения, трех глав и заключения.

Во введении описаны актуальность исследования магнитных соединений, в которых под различными внешними воздействиями происходят изменения их магнитного состояния, и научная новизна диссертационной работы. Указан предмет исследований – оксиды переходных элементов, магнитные катионы которых находятся в электронных конфигурациях d^2-d^9 (CrO_2 , LaMnO_3 , LaCrO_3 , FeVO_3 , FeO , CoO , NiO и др.). Сформулированы цель и задачи исследования, а также основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена систематическому обзору экспериментальных и теоретических исследований различных эффектов, связанных с изменением магнитной структуры и свойств магнитных диэлектриков при оптическом заполнении возбужденных состояний магнитного иона, а также при спиновом кроссовере, индуцированном ростом



кристаллического поля под сверхвысоким гидростатическим давлением. Использовано большое количество научных работ, что обеспечило хорошую основу для постановки конкретных задач исследования. Основным недостатком более ранних теоретических методов исследования обменного взаимодействия в магнитных диэлектриках является учет только основных состояний электрон-дырочной пары, появляющейся в процессе обменного взаимодействия между двумя магнитными 3d ионами.

Вторая глава посвящена исследованию влияния оптического возбуждения магнитного иона на сверхобменное взаимодействие и магнитные свойства мотт-хаббардовских диэлектриков. Приводится вывод эффективного сверхобменного гамильтониана при помощи обобщенного метода сильной связи в приближении локальной плотности (LDA+GTB), причем при построении ячеечной теории возмущений использован обобщенный метод проекционных операторов. Данный подход позволяет учесть полный спектр основных и возбужденных многоэлектронных состояний электрон-дырочной пары, возникающей в сверхобменном процессе. Представлены результаты исследования вклада оптически возбужденных состояний в сверхобменное взаимодействие в мотт-хаббардовских диэлектриках La_2CuO_4 и FeVO_3 , а также взаимодействие Дзялошинского-Мории. Показано, что в FeVO_3 сверхобменное взаимодействие пары ионов железа Fe^{3+} , один из которых находится в основном состоянии, а другой – в оптически возбужденном состоянии, меняет свой знак с АФМ на ФМ.

В третьей главе представлены результаты исследования изменений сверхобменного взаимодействия в оксидах переходных элементов с магнитными катионами в электронных конфигурациях d^2 - d^8 и их сравнение с имеющимися экспериментальными данными. Показано, что знак вклада в сверхобменное взаимодействие от каждой электрон-дырочной пары определяется соотношением спинов электронного (S_e) и дырочного (S_h) термов. Возможны только два варианта: $S_h = S_e \pm 1$ соответствует ферромагнитному вкладу, $S_h = S_e$ – антиферромагнитному. Сравнение теоретических результатов с экспериментальными данными выявило отсутствие необходимости суммирования всех возможных вкладов, достаточно определить основной вклад в соответствии с выведенным критерием сравнения в зависимости от величины перекрытия. Обнаружено, что только в соединениях с магнитными ионами в конфигурациях d^5 (FeVO_3) и d^7 (CoO , Ni_2O_3) спиновый кроссовер при критическом давлении приводит к изменению знака сверхобменного взаимодействия с АФМ на ФМ.

В заключении подведены итоги работы, сформулированы выводы, из которых видно, что в ходе работы было предпринято систематическое исследование магнитных

свойств целого класса оксидов переходных элементов при изменении спина на магнитном ионе в результате внешних воздействий и показана высокая степень согласованности результатов с имеющимися экспериментальными данными.

Научная новизна результатов диссертационной работы

В рамках локального подхода представлена теория сверхобменного взаимодействия в магнитных диэлектриках с учетом полного спектра возбужденных многоэлектронных состояний магнитного иона, имеющего произвольную электронную конфигурацию.

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.

Обнаружено, что взаимодействие Дзялошинского-Мории в FeVO_3 не меняется значительно под воздействием оптической накачки. Это дополняет представления о том, что генерация терагерцового излучения при оптическом возбуждении связана только с сильным изменением в соотношении D/J констант взаимодействия Дзялошинского-Мории D и обменного взаимодействия J . В диссертационной работе показано, что природа этого излучения может быть связана с переворотом спина на магнитном ионе при изменении знака сверхобменного взаимодействия.

Достоверность полученных результатов

Достоверность полученных результатов гарантируется приведенным в диссертации сравнением с имеющимися экспериментальными исследованиями магнитных свойств соединений, для которых в ходе работы было произведено вычисление сверхобменного взаимодействия при обычных условиях и при изменении состояния магнитного иона в результате оптического возбуждения или под высоким давлением.

Основные результаты исследования были опубликованы в ведущих международных научных журналах и докладывались на многих международных и российских конференциях.

Практическая значимость полученных результатов

Полученные результаты обладают не только научной, но и практической ценностью, поскольку 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.

Замечания

Основное замечание к работе касается желательности конкретизации полученных результатов для учета реальных параметров рассматриваемых соединений и получения более детальных количественных оценок, что может быть сделано обращением к первопринципным расчетам, включая уже имеющиеся данные.

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 Заклучении), 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-хаббардовских 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:

- 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;

- Не ясно, что понимается под “частичным вкладом” в заключении на с. 95?

- 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.
- Требуется пояснения фраза “... фактором сравнения ФМ и АФМ вкладов...” в заключении на с. 95. Что такое фактор сравнения?

Имеются также незначительные погрешности пунктуации.

Заключение

Диссертационная работа Полукеева С.И. является завершенной научно-квалификационной работой, содержащей важные новые результаты о магнитных свойствах оксидов переходных элементов, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение, имеющее значение для понимания свойств систем с сильными электронными корреляциями и дальнейшего развития физики магнитных явлений. Высказанные выше замечания не влияют на общую положительную оценку диссертации и могут быть учтены в ходе дальнейших исследований. Работа выполнена на высоком научном уровне, материал изложен достаточно логично и последовательно. Выводы и результаты обоснованы, доказательны и достоверны.

Автореферат полностью отражает основное содержание диссертации. Содержание диссертации соответствует паспорту научной специальности 1.3.8. «Физика конденсированного состояния» (отрасль науки: физико-математические), по направлению исследований «Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы и свойств металлов и их сплавов, неорганических и органических соединений, диэлектриков и, в том числе, материалов световодов как в твердом (кристаллы, поликристаллы), так и в аморфном состоянии в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления». Полученные результаты соответствуют цели и задачам диссертационной работы и отражены в 5 публикациях соискателя в рецензируемых и включенных в Перечень ВАК журналах, индексируемых информационно-аналитическими системами РИНЦ, WOS и SCOPUS.

Диссертационная работа Полукеева Семёна Игоревича на тему «Обменное взаимодействие в магнитных диэлектриках. Вклад возбуждённых состояний» отвечает требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, установленным в «Положении о порядке присуждения ученых степеней», утвержденном постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013

года, № 842 в редакции от 26.05.2020 г. № 751 с изменениями от 18.03.2023 г. № 415. Указанные замечания не снижают общую положительную оценку диссертационной работы. Полукеев Семен Игоревич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Диссертация заслушана на объединенном научном семинаре лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем, лаборатории оптики металлов и лаборатории квантовой теории конденсированного состояния ИФМ УрО РАН 21 февраля 2024 года (протокол № 3). Положительный отзыв на диссертационную работу Полукеева Семена Игоревича «Обменное взаимодействие в магнитных диэлектриках. Вклад возбужденных состояний» одобрен Ученым советом ИФМ УрО РАН «13» марта 2024 года (протокол № 4).

Главный научный сотрудник, заведующий лабораторией
квантовой теории конденсированного состояния ИФМ УрО РАН,
доктор физико-математических наук

В.Ю. Ирхин

620108, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 18
Телефон: (343) 374-30-92; e-mail: valentin.irkhin@imp.uran.ru

Я, Валентин Юрьевич Ирхин, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

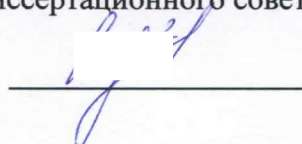
 Валентин Юрьевич Ирхин

Главный научный сотрудник, заведующий лабораторией
теории низкоразмерных спиновых систем ИФМ УрО РАН,
профессор, член-корреспондент РАН,
доктор физико-математических наук

С.В. Стрельцов

Почтовый адрес: 620108, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
Телефон: (343) 378-36-65; e-mail: streltsov@imp.uran.ru

Я, Сергей Владимирович Стрельцов, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

 Сергей Владимирович Стрельцов

Подпись В.Ю. Ирхина и С.В. Стрельцова заверяю
И.о. ученого секретаря ИФМ УрО РАН
кандидат техн. наук

А.М. Поволоцкая

13.03.2024



Сведения о ведущей организации
по диссертации Полукеева Семена Игоревича
«Обменное взаимодействие в магнитных диэлектриках. Вклад возбужденных состояний»,
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по
специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

1.	Полное наименование организации	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук
2.	Сокращенное наименование организации	ИФМ УрО РАН
3.	Организационно-правовая форма организации	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
4.	Ведомственная принадлежность организации	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
5.	Место нахождения	г. Екатеринбург, Российская Федерация
6.	Почтовый адрес организации	620108, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
7.	Телефон организации	+7 (343) 374-02-30
8.	Адрес электронной почты организации	physics@imp.uran.ru
9.	Адрес официального сайта организации в сети Интернет	http://www.imp.uran.ru/
10.	Руководитель организации	Мушников Николай Варфоломеевич
11.	Наименование профильного структурного подразделения, занимающегося проблематикой диссертации	Отдел теоретической и математической физики
12.	Сведения о лице, утверждающем отзыв ведущей организации	Директор института, д.ф.-м.н., академик РАН, Мушников Николай Варфоломеевич
13.	Сведения о составителе отзыва из ведущей организации	Стрельцов Сергей Владимирович, д.ф.-м.н., профессор РАН, член-корреспондент РАН, главный научный сотрудник, заведующий лабораторией теории низкоразмерных спиновых систем; Ирхин Валентин Юрьевич, д.ф.-м.н., главный научный сотрудник, заведующий лабораторией квантовой теории конденсированного состояния
14.	Список основных публикаций работников структурного подразделения, составляющего отзыв, за последние пять лет по теме диссертации (не более 15 публикаций).	
	1. Multiorbital exchange Hamiltonians: Derivation and examples / Petr A. Igoshev, Sergey V. Streltsov, Kliment I. Kugel. – Текст: непосредственный // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2023. — V. 587. — P. 171315—171322. 2. Quantum spin liquid and cluster Mott insulator phases in the Mo₃O₈ magnets / S.A. Nikolaev, I.V. Solov'yev, S.V. Streltsov. – Текст: непосредственный // NPJ Quantum Materials. — 2021. — V. 6. — P. 25—32. 3. Hubbard Bands and Exotic States in Doped and Undoped Mott Systems: The Kotliar–Ruckenstein Representation / V.Yu. Irkhin. – Текст: непосредственный // Condensed Matter. — 2023. — V. 8. — P. 75—87. 4. Metal-insulator transition and antiferromagnetism in the generalized Hubbard model: Treatment of correlation effects / P.A. Igoshev, V.Yu. Irkhin. – Текст: непосредственный // Physical Review B. — 2021. — V. 104. — P. 45109—45124.	

5. Ab initio guided minimal model for the “Kitaev” material $\text{BaCo}_2(\text{AsO}_4)_2$: Importance of direct hopping, third-neighbor exchange, and quantum fluctuations / P.A. Maksimov, A.V. Ushakov, Z.V. Pchelkina, Y. Li, S.M. Winter, S.V. Streltsov. – Текст: непосредственный // Physical Review B. — 2022. — V. 106. — P. 165131—165139.
6. Origin of ferromagnetic interactions in NaMnCl_3 : How the response theory reconciles with Goodenough-Kanamori-Anderson rules / I.V. Solovyev, A.V. Ushakov, S.V. Streltsov. – Текст: непосредственный // Physical Review B. — 2022. — V. 106. — P. L180401—L180405.
7. Resonant inelastic X-ray scattering as a probe of $J_{\text{eff}} = 1/2$ state in 3d transition-metal oxide / H.Y. Huang, A. Singh, C.I. Wu, J.D. Xie, J. Okamoto, A.A. Belik, E. Kurmaev, A. Fujimori, C.T. Chen, S.V. Streltsov, D.J. Huang. – Текст: непосредственный // NPJ Quantum Materials. — 2022. — V. 7. — P. 33—38.

Ведущая организация подтверждает, что соискатель не является ее сотрудником и не имеет научных работ по теме диссертации, подготовленных на базе ведущей организации или в соавторстве с ее сотрудниками.

И.о. ученого секретаря института
канд. техн. наук



А.М. Поволоцкая

13.03.2024