



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«КАЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «КГЭУ»)

УТВЕРЖДАЮ
Ректор

Абдуллазянов Э.Ю.
17 2017 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу
Агзамовой Полины Александровны
«Сверхтонкие взаимодействия в оксидах $3d^1$ переходных
металлов со структурами перовскита и пироклора»,
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-
математических наук по специальности 01.04.11 – Физика
магнитных явлений

Представленная диссертация является обобщением результатов теоретических исследований сверхтонких взаимодействий в соединениях $RTiO_3$ (R – редкоземельный ион или ион иттрия) и $Lu_2V_2O_7$.

В большинстве публикаций сверхтонкие взаимодействия связываются с изучением спиновой структуры магнитных материалов. Влиянию орбитальной электронной структуры на сверхтонкие эффекты уделялось гораздо меньше внимания. В основном, рассчитывались сверхтонкие поля на магнитных ядрах с использованием метода молекулярных орбиталей. Следует отметить, что возможности использования результатов таких расчётов, в особенности для изучения эффектов, связанных с орбитальным упорядочением, оказались слишком ограниченными. Это сделало **актуальным** разработку теоретических методов, пригодных для анализа орбитальной структуры магнитных материалов. Исследования, направленные на решение этой задачи с использованием сверхтонких эффектов, определяют **содержание** диссертации П.А. Агзамовой.

Диссертационная работа состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка сокращений и списка литературы. Общий объём диссертации составляет 144 страницы, включая 36 рисунков, 28 таблиц и список цитируемой литературы, содержащий 167 наименований.

Во *введении* обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цели и задачи исследования, показаны научная новизна и практическая значимость результатов работы, описаны основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена обзору литературы по тематике диссертации. В ней дано представление о кристаллической, орбитальной и магнитной структурах титанатов с общей формулой $RTiO_3$ (R – редкоземельный ион или ион иттрия) и ванадата $Lu_2V_2O_7$, о природе сверхтонких взаимодействий в магнетиках, и приведён подробный обзор имеющихся в литературе данных по экспериментальным и теоретическим исследованиям сверхтонких полей в указанных соединениях.

Во *второй главе* дано достаточно подробное и полное описание первопринципных методов, применяемых автором для расчётов параметров сверхтонких взаимодействий на ядрах магнитных и немагнитных ионов.

В *третьей главе* обсуждаются результаты первопринципных расчётов параметров сверхтонких взаимодействий на ядре ^{51}V в соединении $Lu_2V_2O_7$ со структурой пирохлора в сравнении с данными, извлечёнными из эксперимента с помощью специально разработанной микроскопической модели.

В *четвёртой главе* обсуждаются результаты первопринципных расчётов параметров сверхтонких взаимодействий на ядрах $^{47,49}Ti$, ^{89}Y , ^{139}La в соединениях $RTiO_3$ ($R = La, Nd, Sm, Gd, Y$) со структурой перовскита, а также результаты расчётов сверхтонких полей на ядрах ^{139}La в $LaTiO_3$ и ^{89}Y в $YTiO_3$ в рамках специально разработанной микроскопической модели.

В *заключении* сформулированы основные результаты и выводы по диссертационной работе.

Основные результаты диссертационной работы, определяющие **научную новизну**, удобно разделить на две части. К первой части мы относим результаты, полученные при использовании первопринципных методов для расчёта сверхтонких полей на магнитных ядрах. Первопринципные расчёты ранее неплохо зарекомендовали себя при вычислении электронных спектров кристаллов. Для изучения возможностей использования первопринципных расчётов при анализе сверхтонких эффектов диссертантом проведён большой объём численных вычислений. Сравнение полученных результатов между

собой и с экспериментальными данными позволил получить ряд новых, **теоретически и практически значимых** выводов, которые отражены в тексте диссертации и автореферата. К их числу мы относим обнаружение значительной анизотропии сверхтонких взаимодействий, сравнимой с их изотропной частью и обусловленной особенностями орбитальных состояний ионов V^{4+} и Ti^{3+} в соединениях $Lu_2V_2O_7$, $LaTiO_3$, $YTiO_3$. Главным же, на наш взгляд, является микроскопический подход к описанию сверхтонких эффектов. Он предполагает строгий учёт свойств симметрии описываемых объектов, а величины необходимых матричных элементов операторов взаимодействий предлагает считать подгоночными параметрами. От известной схемы макроскопического описания свойств веществ со спиновым упорядочением упомянутый модельный подход отличается учётом в явном виде симметрии орбитальных состояний электронов.

Результаты, полученные при использовании модельного подхода, составляют вторую часть диссертации П.А. Агзамовой. В рамках этого подхода получена формула, определяющая расщепление в спектре частот ЯМР на ядрах ^{51}V в $Lu_2V_2O_7$ и зависимость этих частот от ориентации внешнего магнитного поля относительно осей кристалла. Результаты сопоставления рассчитанных по этой формуле данных с экспериментом демонстрируют хорошее согласие.

Обобщение модельного подхода, необходимого для описания сверхтонких полей на ядрах немагнитных ионов, является ещё одним новым и важным результатом диссертации. К таким немагнитным ионам относятся La^{3+} и Y^{3+} в $LaTiO_3$ и $YTiO_3$ соответственно. Недостаточность экспериментальных данных не позволила определить подгоночные параметры в том объёме, в каком это удалось проделать для $Lu_2V_2O_7$. Однако включение немагнитных ионов в схему описания сверхтонких эффектов значительно расширяет возможности модельного подхода, поэтому является важным результатом работы.

Основные результаты диссертации П.А. Агзамовой, несомненно, могут найти практическое применение при разработке новых подходов к обоснованию природы ферроидного состояния и поиска новых материалов, обладающих одновременно ферроэлектрическими и магнитными свойствами.

Все полученные результаты перечислены в текстах диссертации и автореферата.

Достоверность результатов, полученных в диссертационной работе П.А. Агзамовой, определяется использованием разработанных и обоснованных в мировой литературе численных методов и подходов, а также тем фактом, что

результаты находятся в хорошем согласии с теоретическими и экспериментальными литературными данными.

При чтении текста диссертации у нас возникли следующие **замечания**.

1. Недостаточно чёткая формулировка результата, который, по нашему мнению, является одним из основных её достижений. Речь идёт о связи орбитального упорядочения с угловыми зависимостями линий спектра ЯМР. Хотя существование такой связи пока установлено только для одного соединения $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$, нет никаких сомнений в том, что угловая зависимость спектра ЯМР может быть с таким же успехом использована для изучения орбитального упорядочения в других веществах. Данный результат упомянут в тексте заключительного раздела диссертации (см. п.2 раздела для $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$), но не выделен специально. Однако мы считаем его более важным, чем обнаружение сильной анизотропии сверхтонкого взаимодействия, которое выделено в качестве общего вывода по работе в конце заключительного раздела диссертации.

2. В тексте диссертации и автореферата автор упоминает о состоянии «орбитальной жидкости», которое может существовать в исследуемых соединениях. Однако в заключении автором ничего не говорится о том, возможно ли наличие такого состояния по данным расчётов, проведённых в диссертации.

3. В тексте диссертации и автореферата для обозначения величин изотропного и анизотропного сверхтонких взаимодействий, рассчитываемых из первых принципов, используются обозначения A_{iso} и A_{an} . Похожие обозначения вводятся автором для операторов изотропного (A^{is}) и анизотропного (A^{anis}) сверхтонких взаимодействий при описании модельного подхода к расчётам сверхтонких полей на ядрах немагнитных ионов, что несколько осложняет восприятие информации при чтении текста диссертации и автореферата.

Указанные замечания носят преимущественно уточняющий характер и не снижают положительного впечатления от диссертации.

Все основные результаты работы своевременно и в полной мере опубликованы в авторитетных отечественных и зарубежных физических журналах (5 статей). Они хорошо известны научной общественности, поскольку были предметом обсуждения на многочисленных представительных российских и международных конференциях, семинарах и школах.

Автореферат практически полностью и правильно отражает содержание диссертации.

Считаем, что диссертационная работа «Сверхтонкие взаимодействия в оксидах $3d^1$ переходных металлов со структурами перовскита и пироклора», как по объёму проведённых исследований, так и по важности полученных результатов, соответствует требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор, Агзамова Полина Александровна, заслуживает присуждения ей учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.11 – физика магнитных явлений.

Настоящий отзыв обсуждён и одобрен на заседании кафедры «Промышленная электроника и светотехника» Казанского государственного энергетического университета, протокол № 13 от 16 мая 2017 г.

Заведующий кафедрой «Промышленная
электроника и светотехника»
ФГБОУ ВО «Казанский государственный
энергетический университет»,
доктор физ.-мат. наук, профессор
Голенищев-Кутузов Александр Вадимович _____

Почтовый адрес: 420066, г. Казань, ул. Красносельская, 51
Тел.: (843)519-42-77, e-mail: alex.kutuzov@mail.ru

Абдуллазянов Эдвард Юнусович: кандидат технических наук, доцент
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего
образования «Казанский государственный энергетический университет», ректор,
420066, Республика Татарстан, г. Казань, ул. Красносельская, 51.
Тел. (843)519-42-02, e-mail: rector@kgeu.ru

С отзывом ознакомлена
09.06.2017 / *Агзамова П.А.*

СВЕДЕНИЯ

о ведущей организации по диссертации Агзамовой Полины Александровны

«Сверхтонкие взаимодействия в оксидах $3d^1$ переходных металлов со структурами перовскита и пирохлора»

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.11 – Физика магнитных явлений

Наименование полное и сокращенное, ведомственная принадлежность	Адрес, телефон, e-mail, официальный сайт; структурное подразделение, подготовившее отзыв	Работы сотрудников структурного подразделения, давшего отзыв, по профилю диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (по физике магнитных явлений, перовскитоподобных манганитов и сегнетоэлектриков)
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский государственный энергетический университет» (ФГБОУ ВО «КГЭУ») Министерства образования и науки Российской Федерации	420066, Россия, Республика Татарстан, г. Казань, ул. Красносельская, д. 51, Телефон: +7 (843) 519-42-20 e-mail: kgeu@kgeu.ru Веб-сайт: http://kgeu.ru Кафедра «Промышленная электроника и светотехника»	1. Golenishchev-Kutuzov A.V., Golenishchev-Kutuzov V.A., Kalimullin R.I., Semennikov A.V. Interplay between structural, Jahn-Teller and magnetic states of slightly doped lanthanum manganites // Journal of Low Temperature Physics. – 2016. – Vol. 185. – № 5/6. – P. 558-563. 2. Голенищев-Кутузов А.В., Голенищев-Кутузов В.А., Калимуллин Р.И., Семенников А.В. Роль ян-теллеровских ионов в формировании доменных структур в ниобате лития // Известия Российской академии наук. Серия Физическая. – 2016. – Т. 80. – № 5. – С. 570-572. 3. Голенищев-Кутузов А.В., Голенищев-Кутузов В.А., Калимуллин Р.И., Семенников А.В. Упорядоченные состояния ян-теллеровски искаженных октаэдров MnO_6 в слабодопированных лантан-стронциевых манганитах // Физика твердого тела. – 2015. – Т. 57. – № 8. – С. 1596-1601. 4. Голенищев-Кутузов А.В., Голенищев-Кутузов В.А., Исмаилов И.Р., Калимуллин Р.И., Потапов А.А., Семенников А.В., Уланов В.А. Магнитоуправляемые структурные, ян-теллеровские, диэлектрические и транспортные эффекты в $La_{0.875}Sr_{0.125}MnO_3$ // Известия РАН. Серия Физическая. – 2015. – Т. 79. – № 6. – С. 768-770. 5. Голенищев-Кутузов А.В., Голенищев-Кутузов В.А., Калимуллин Р.И., Семенников А.В. Влияние ян-теллеровского упорядочения на структурные и магнитные фазовые переходы в слабодопированных манганитах // Известия РАН. Серия Физическая. – 2015. – Т. 79. – № 11. – С. 1592-1594. 6. Голенищев-Кутузов А.В., Голенищев-Кутузов В.А., Исмаилов И.Р., Калимуллин Р.И., Потапов А.А., Семенников А.В. Регулируемая линия задержки акустических волн на температурно-управляемом фазовом переходе в манганите // Письма в журнал технической физики. – 2014. – Т. 78. – № 4. – С. 372-374.

	7. Голенищев-Кутузов А.В., Голенищев-Кутузов В.А., Калимуллин Р.И., Потапов А.А. Роль наносекундных процессов в формировании доменов в сегнетоэлектрических кристаллах // Известия РАН. Серия физическая. – 2014. – Т. 78. – № 4. – С. 372-374. 8. Голенищев-Кутузов А.В., Голенищев-Кутузов В.А., Калимуллин Р.И., Потапов А.А. Двумерный фотонный и фононный кристаллы, сформированные в ниобате лития // Известия РАН. Серия физическая. – 2014. – Т. 78. – № 4. – С. 413-415. 9. Голенищев-Кутузов В.А., Синицин А.М., Зайнуллин Р.Р., Уланов В.А. Резко неоднородное распределение гадолиния в кристаллах $Pb_{(1-x)}Gd_xTe$ при $x > 0,005$ // Известия РАН. Серия физическая. – 2014. – Т. 78. – № 8. – С. 950-952. 10. Голенищев-Кутузов А.В., Голенищев-Кутузов В.А., Калимуллин Р.И., Потапов А.А. Влияние примесных ионов железа на формирование фотоиндуцированных решеток и доменных структур в ниобате лития // Известия РАН. Серия физическая. – 2013. – Т. 77. – № 3. – С. 326-328. 11. Golenishchev-Kutuzov A.V., Golenishchev-Kutuzov V.A., Kalimullin R.I., Mardanov G.D., Potapov A.A. Ultrasonic Tunable Transducer on Domain Structures // Ferroelectrics. – 2012. – V. 441. – Issue 1. – 25-29. 12. Golenishchev-Kutuzov A.V., Golenishchev-Kutuzov V.A., Kalimullin R.I., Potapov A.A. Tunable acoustic resonator on a periodic domain structure // Technical Physics Letters. – 2012. – V. 38. – Issue 9. – P. 825-827. 13. Голенищев-Кутузов А.В., Голенищев-Кутузов В.А., Калимуллин Р.И., Потапов А.А. Фотон-фононное взаимодействие на периодических структурах // Известия РАН. Серия физическая. – 2012. – Т. 76. – № 7. – С. 818-820.
--	---

Проректор по научной работе
ФГБОУ ВО «КГЭУ»

Шамсутдинов Эмиль Васильевич/

2017 г.