

ОТЗЫВ официального оппонента

**на диссертацию на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук Гончарь Людмилы Эдуардовны
на тему: «Орбитально-зависимое сверхобменное взаимодействие и его
роль в формировании магнитных структур ян-теллеровских
псевдоперовскитных мanganитов»
по специальности 1.3.12. Физика магнитных явлений**

Изучению взаимодействий в системах с подрешеткой орбитально-вырожденных ионов посвящено значительное количество работ. Кристаллы псевдоперовскитных мanganитов, содержащих подрешетки как ян-теллеровских, так и не ян-теллеровских ионов марганца привлекают внимание взаимосвязью решеточных, зарядовых, орбитальных и магнитных степеней свобод, благодаря которой они приобретают интересные магнитные свойства. Исследование влияния решеточных, зарядовых и орбитальных степеней свободы на магнитную подсистему является **актуальным** в связи с появлением прикладного применения мanganитов в электронике. Таким образом, тема диссертации Гончарь Л.Э., посвященной изучению зависимости сверхобменного взаимодействия и, следовательно, магнитной структуры от орбитального упорядочения, **актуальна** и соответствует заявленной научной специальности 1.3.12. Физика магнитных явлений.

Диссертация Гончарь Л. Э. составляет 265 страниц машинописного текста и состоит из введения, пяти глав, заключения и списка цитируемой литературы из 187 наименований.

Во **Введении** обосновывается актуальность диссертационной работы, сформулированы цель и задачи исследования, аргументируются научная новизна, значимость и достоверность результатов, сформулированы положения, выносимые на защиту, а также отмечен личный вклад автора.

Первая глава сочетает обзор кристаллических структур исследуемых соединений, моделей орбитальных структур и получение моделей магнитных взаимодействий, используемых в диссертационном исследовании.

Вторая глава содержит обзор методик описания магнитных структур и спектров магнитных возбуждений. В ней приведенные методики адаптированы для многоподрешеточного магнетика.

Третья глава посвящена исследованию орбитальной структуры, обменного взаимодействия орторомбических мanganитов $RMnO_3$ и моноклинного соединения $BiMnO_3$. В ней получены магнитные структуры этих соединений, спектры магнитного резонанса и спиновых волн; проанализировано влияние редкоземельной подрешетки, немагнитного замещения, температуры, магнитного поля и гидростатического давления на магнитную структуру.

В четвертой главе рассмотрены зарядово-упорядоченные мanganиты, в которых половина редкоземельных ионов замещены неизовалентными щелочноземельными ионами. Проведено исследование орбитальной структуры подрешетки трехвалентного марганца, исследовано ее влияние на магнитную структуру и спектры спиновых волн и антиферромагнитного резонанса.

В пятой главе исследованы зарядово-упорядоченные мanganиты с высокой концентрацией неизовалентной примеси ($x=2/3, 3/4, 4/5$). Описана орбитальная структура и ее зависимость от ближайшего окружения трехвалентного марганца. Показано, каким образом конкуренция сверхобменных взаимодействий между ближайшими соседями приводит к тримерно-страйповской магнитной структуре. Предсказан частичный спин-флоп переход под влиянием внешнего магнитного поля.

В **Заключении** сформулированы выводы по диссертационной работе.

Текст диссертации написан понятным языком, хорошо структурирован и обладает внутренним единством, проиллюстрирован формулами, таблицами и цветными рисунками. Диссертационная работа представляет собой завершенное исследование, выводы достаточно обоснованы, полученные результаты обладают научной новизной и соответствуют цели и задачам исследования.

Наиболее интересными, на мой взгляд, являются следующие **модели** и **результаты**.

1. Модель орбитально-зависимого сверхобменного взаимодействия, которая устанавливает количественную связь между орбитальной и

магнитной подсистемами в чистых ($x=0$) и зарядово-упорядоченных ($x=1/2, 2/3, 3/4, 4/5$) манганитах $R_{1-x}A_x\text{MnO}_3$.

2. Методика определения многоподрешеточных неколлинеарных магнитных структур в манганитах при наличии подрешетки янтеллеровских ионов.
3. Продемонстрировано успешное применение модели орбитально-зависимого обмена для моделирования магнитной структуры LaMnO_3 , барической зависимости температуры Нееля и зависимости магнитной структуры от количества динамических обменных пар при немагнитном замещении ионов Mn^{3+} на ионы Ga^{3+} .
4. Показано, что орбитально-зависимые обменные взаимодействия в ряде соединений манганитов приводят к квази-низкоразмерной магнитной структуре ($\text{R}_{1/2}\text{A}_{1/2}\text{MnO}_3$, BiMnO_3) или могут конкурировать (BiMnO_3 , $\text{Bi}_{1/2}(\text{Ca}, \text{Sr})_{1/2}\text{MnO}_3$, $\text{La}_{1/3}\text{Ca}_{2/3}\text{MnO}_3$, $\text{La}_{1/4}\text{Ca}_{3/4}\text{MnO}_3$, $\text{Bi}_{1/5}\text{Ca}_{4/5}\text{MnO}_3$).
5. Для зарядово-упорядоченных манганитов с высокой концентрацией неизовалентной примеси предложена тримерно-страйповая модель магнитной структуры, обусловленная зарядово-орбитальной структурой типа «вигнеровский кристалл». Такая магнитная структура описывает экспериментальные данные для $\text{La}_{1/3}\text{Ca}_{2/3}\text{MnO}_3$ ($x=2/3$) и может быть предложена для обсуждения для более высоких концентраций ($x=3/4, 4/5$).

Достоверность полученных в диссертационной работе новых результатов (или, иными словами, адекватность развиваемых модельных представлений и методов) обосновывается последовательным применением современных методов расчета, детальным сопоставлением полученных результатов с предшествующими работами и тем, что полученные результаты хорошо описывают различные экспериментальные данные.

Результаты диссертационной работы могут быть применены при моделировании магнитных свойств манганитов и родственных соединений, а также могут послужить основой для экспериментального изучения сложных структур, описанных в работе.

Автореферат соответствует содержанию диссертации.

Результаты работы опубликованы в российских и зарубежных рецензируемых изданиях, входящих в Перечень ВАК и международные базы

Web of Science и Scopus, и цитируются научным сообществом. Гончарь Л.Э. аprobировала результаты, регулярно представляя доклады на международных конференциях высокого уровня.

Все результаты других авторов, использованные при написании диссертации и получении результатов исследования, отмечены ссылками в списке источников. Результаты, полученные соавторами публикаций, отмечены в тексте диссертационной работы.

К диссертационной работе имеются следующие **вопросы и замечания**.

1. На странице 29 приведен гамильтониан (1.3) линейного электронно-колебательного взаимодействия и упомянуто, что константа взаимодействия V_e определена в работах [68, 69], однако величина константы не приводится. На странице 34 приведены формулы (1.20)–(1.21) дополнительных вкладов в электронно-колебательное взаимодействие, но величины констант V_b , N_e и V_e^R не определены. Хотелось бы пояснений, с чем это связано.
2. В работе приведены аналитические выражения для всех симметризованных искажений e_g -типа, кроме BiMnO_3 .
3. В работе приведена зависимость зеемановского взаимодействия от орбитального состояния магнитного ян-теллеровского иона (страница 56, формулы (1.65)–(1.67)). Насколько g -тензор влияет на полевые зависимости магнитной структуры и спектров магнитного резонанса, можно ли его заменить на g -фактор?
4. В диссертационном исследовании основной упор делается на использование 180-градусного сверхобмена между ближайшими магнитными соседями. Насколько другие виды обменного взаимодействия (сверхобмен между следующими магнитными соседями, биквадратичный обмен, анизотропные обменные взаимодействия) и их зависимости от орбитальной структуры могут изменить результаты моделирования?

Отмеченные замечания не являются принципиальными и не влияют на общее положительное впечатление от работы.

Диссертация «Орбитально-зависимое сверхобменное взаимодействие и его роль в формировании магнитных структур ян-теллеровских псевдоперовскитных манганитов» представляет собой научно-

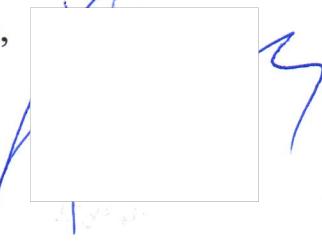
квалификационную работу, в которой разработаны теоретические положения для исследования взаимосвязи кристаллической, орбитальной, зарядовой и магнитной структур в диэлектрических мanganитах, позволяющие описать сложные неколлинеарные магнитные структуры в зависимости от орбитальной и зарядовой сверхструктур кристаллов, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение. Диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к работам на соискание ученой степени доктора наук и установленным в "Положении о присуждении ученых степеней" №842 от 24 сентября 2013 года (с последующими изменениями), а ее автор Гончарь Людмила Эдуардовна несомненно заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.12. Физика магнитных явлений.

Официальный оппонент:

доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник
лаборатории статики и кинетики процессов
ФГБУН Институт metallургии

Уральского отделения Российской академии наук,
Митрофанов Валентин Яковлевич

Контактные данные
+7 (912) 633 97 22,
e-mail: vyam@mail.ru



Специальность, по которой официальным оппонентом
защищена диссертация:
01.04.07 – физика твердого тела

Адрес места работы:

620016 г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 101,
тел.: +7 (912) 633 97 22



Подпись д.ф.-м.н. В.Я. Митрофанова заверю
Ученый секретарь ИМЕТ УрО РАН,
к.х.н.

Чесников П.В.

09.09.2024

С отзывом однаково
12.09.2024

Л.Э. Гончарь

Сведения об официальном оппоненте

ФИО: Митрофанов Валентин Яковлевич

Ученая степень, звание: доктор физико-математических наук, специальность 01.04.07–Физика конденсированного состояния

Полное наименование организации: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук

Должность: старший научный сотрудник лаборатории статики и кинетики процессов

Почтовый адрес: 620016 г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 101

Тел.: 8 912 633 97 22

e-mail: vyam@mail.ru

Публикации в сфере исследований, которым посвящена диссертация

1. S. Kh. Estemirova, V. Ya. Mitrofanov, S.A. Uporov, G.A. Kozhina. Cationic nonstoichiometry, structural and magnetic properties of hexagonal $Tm_{2-x}Mn_xO_3$ manganites. Journal of Alloys and Compounds. 960, 2023, 17108.
2. L. A. Cherepanova, Kh. Estemirova, V.Ya.Mitrofanov, S. A. Uporov. Cationic Nonstoichiometry, Crystal Structure, and Magnetic Properties of $Eu_{1-x}Mn_{1+x}O_3$. Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. 35(2), 2022, 1-7.
3. Kh. Estemirova, V. Ya. Mitrofanov, S.A. Uporov, G.A. Kozhina. Magnetocaloric properties of Fe-substituted La–Sr-manganites. Solid State Sciences. 124, 2022, 10686.
4. G. Kozhina, V. Mitrofanov, O. Fedorova, A. Fetisov, A. Murzakaev, S. Estemirova. Grain growth kinetics, microstructure and magnetic properties of mechanically activated $Nd_{1-x}Ca_xMnO_{3+\delta}$ manganites. Journal of Alloys and Compounds. 864, 2021, 158816.
5. S.Kh. Estemirova , V.Ya. Mitrofanovb, S.A. Uporov , R.I. Gulyaeva . Effect of cation substitution on structural, magnetic and magnetocaloric properties of $(La_{0.7}Eu_{0.3})_{0.75}Sr_{0.25}Mn_{0.9}(Me)_{0.1}O_3$ ($Me = Co, Ti$). JMMM. 502, 2020, 166593.

Ученый секретарь ИМЕТ УрО РАН,

К.Х.Н.

Котенков П.В.

