

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.133.01,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ИНСТИТУТА ФИЗИКИ
МЕТАЛЛОВ ИМЕНИ М.Н. МИХЕЕВА УРАЛЬСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК (ИФМ УрО РАН)
МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ
НАУК**

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 25.10.2024, № 12

О присуждении Гончарь Людмиле Эдуардовне ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Орбитально-зависимое сверхобменное взаимодействие и его роль в формировании магнитных структур ян-теллеровских псевдоперовскитных манганитов» по специальности 1.3.12. Физика магнитных явлений принята к защите 13.05.2024, протокол заседания №4, диссертационным советом 24.1.133.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук (ИФМ УрО РАН), Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, 620108, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18, приказы Минобрнауки РФ № 714/нк от 02.11.2012 и № 188/нк от 26.02.2015.

Соискатель Гончарь Людмила Эдуардовна, 1974 года рождения, в 1998 году окончила с отличием Уральский государственный университет им. А. М. Горького, диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук «Магнитная структура и спектры магнонов ян-

теллеровских магнитных диэлектриков» защитила в 2001 году в диссертационном совете, созданном на базе Уральского государственного университета им А.М. Горького (диплом КТ № 057136), работает доцентом в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Уральский государственный университет путей сообщения» (г. Екатеринбург) и электроником по совместительству в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» (г. Екатеринбург).

Диссертация выполнена на кафедре конденсированного состояния и наноразмерных систем Института естественных наук и математики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» (г. Екатеринбург) и на кафедре «Естественнонаучные дисциплины» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уральский государственный университет путей сообщения» (г. Екатеринбург).

Официальные оппоненты:

1. **Еремина Рушана Михайловна**, доктор физико-математических наук, доцент, ведущий научный сотрудник лаборатории радиоспектроскопии диэлектриков Казанского физико-технического института им. Е.К. Завойского – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук» (КФТИ – обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН), г. Казань;
2. **Митрофанов Валентин Яковлевич**, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории статики и кинетики процессов

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург;

3. Михалев Константин Николаевич, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, заведующий лабораторией кинетических явлений Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург.

дали положительные отзывы на диссертацию Л.Э. Гончарь.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук» (ФИЦ КНЦ СО РАН), Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН (ИФ СО РАН) в своем положительном отзыве, подписанном Гавричковым Владимиром Александровичем, доктором физико-математических наук, старшим научным сотрудником, ведущим научным сотрудником лаборатории физики магнитных явлений и Балаевым Дмитрием Александровичем, доктором физико-математических наук, доцентом, директором Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук, указала, что «диссертация «Орбитально-зависимое сверхобменное взаимодействие и его роль в формировании магнитных структур ян-теллеровских псевдоперовскитных манганитов» удовлетворяет всем критериям, 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 заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.12. Физика магнитных явлений».

Соискатель имеет 97 (97,6 п.л.) опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 68 работ, из них в рецензируемых российских и международных научных изданиях, входящих в Перечень ВАК, опубликовано 25 статей.

В результате проведенных исследований автором разработан единый подход к определению параметров сверхобменного взаимодействия и сформулированы теоретические положения модели орбитально-зависимого сверхобменного взаимодействия в диэлектрических манганитах.

Наиболее значимые работы по теме диссертации:

1. Гончарь, Л. Э. Спектр антиферромагнитного резонанса в LaMnO_3 : взаимосвязь орбитальной структуры и магнитных свойств / Л. Э. Гончарь, А. Е. Никифоров, С. Э. Попов. – Текст : непосредственный // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2000. – Т. 118, № 6. – С. 1411–1413.
2. Gontchar, L. E. Interplay between orbital, charge and magnetic orderings in $\text{R}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0, 0.5$) / L. E. Gontchar, A. E. Nikiforov, S. E. Popov. – Текст : непосредственный // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2001. – Vol. 223, No. 2. – P. 175–191.
3. Gontchar, L. E. Superexchange interaction in insulating manganites $\text{R}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$ ($x=0, 0.5$) / L. E. Gontchar, A. E. Nikiforov. – Текст : непосредственный // Physical Review B. – 2002. – Vol. 66, No. 1. – P. 014437
4. Гончарь, Л. Э. Спектр антиферромагнитного резонанса в зарядово-упорядоченных манганитах $\text{R}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$ ($\text{R} = \text{La}, \text{Pr}, \text{Tb}$): влияние орбитальной и зарядовой структур / Л. Э. Гончарь, А. Е. Никифоров. – Текст : непосредственный // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2003. – Т. 123. – С. 575–589.
5. Влияние давления на магнитные свойства манганита лантана / Л. Э. Гончарь, Ю. В. Лескова, А. Е. Никифоров, Д. П. Козленко. – Текст : непосредственный // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2010. – Т. 138, № 2. – С. 221–225.

6. Gonchar, L. E. Crucial role of orbital structure in formation of frustrated magnetic structure in BiMnO_3 / L. E. Gonchar, A. E. Nikiforov. – Текст : непосредственный // *Physical Review B*. – 2013. – Vol. 88, No. 9. – P. 094401.
7. Гончарь, Л. Э. Особенности формирования магнитной структуры в орбитально-вырожденном манганите BiMnO_3 / Л. Э. Гончарь, Т. О. Никитина, А. Е. Никифоров. – Текст : непосредственный // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 2013. – Т. 143, № 5. – С. 935–940.
8. Gonchar, L. E. Orbital state dependence of insulating manganites' magnetic ordering / L. E. Gonchar. – Текст : непосредственный // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2018. – Vol. 465. – P. 661–669.
9. Gonchar, L. E. Theoretical study of frustrated magnetic ordering in $\text{La}_{1/3}\text{Ca}_{2/3}\text{MnO}_3$: The role of charge-orbital ordering / L. E. Gonchar. – Текст : непосредственный // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2020. – Vol. 513. – P. 167248.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы.

1. От доктора физико-математических наук Козленко Дениса Петровича, начальника научно-экспериментального отдела нейтронных исследований конденсированных сред лаборатории нейтронной физики им. И.М.Франка Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна.

Замечание 1. Одна из задач диссертации сформулирована как “Установить влияние химического состава и внешних воздействий на орбитальное упорядочение и магнитные взаимодействия и спектры магнитных возбуждений в регулярных (RMnO_3) и зарядово-упорядоченных ($\text{R}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$ при $x = 1/2, 2/3, 3/4, 4/5$, $\text{R}_{1/2}\text{A}_{3/2}\text{MnO}_4$, $\text{RA}_2\text{Mn}_2\text{O}_7$) манганитах и определить роль орбитальной структуры”. Для соединений $\text{LaSr}_2\text{Mn}_2\text{O}_7$, $\text{NdSr}_2\text{Mn}_2\text{O}_7$ в Таблице 2 приведены несколько наборов обменных параметров. Означает ли это, что они соответствуют нескольким возможным моделям магнитного упорядочения? В тексте реферата отсутствуют пояснения на этот счет.

Замечание 2. В ряде перовскитоподобных соединений RMnO_3 с малыми ионными радиусами ($\text{R} = \text{Tb} - \text{Lu}$) возникают более сложные магнитные структуры по сравнению с рассматриваемыми в работе АФМ структурой А-типа и ФМ структурой, включая структуру

Е-типа и несоразмерные АФМ структуры. Может ли разработанная автором диссертации модель быть использована для описания орбитальной и магнитной структуры данной группы соединений?

2. От доктора физико-математических наук Рахманова Александр Львовича, заведующего лабораторией теоретической электродинамики конденсированных сред ФГБУН Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН и кандидата физико-математических наук Кугеля Климента Ильича, ведущего научного сотрудника той же лаборатории.

Замечание 1. При описании используемых методик упоминается, что предложенные гамильтонианы анализируются в приближении молекулярного поля, но не уточняется, какой именно конкретный вариант этого приближения находит применение в диссертации.

Замечание 2. При иллюстрации полученных орбитальных структур практически на всех рисунках изображены различные виды чередования орбиталей типа $x^2 - y^2$ и $2z^2 - x^2 - y^2$. Но приводимое рассмотрение ясно демонстрирует, что конкретный тип орбиталей не столь тривиален. Надо было бы либо изобразить реальные орбитали, либо указать, что это их просто схематичное изображение.

Замечание 3. На фазовой диаграмме, изображённой на рис. 4, не даны определения имеющихся там фаз.

3. От доктора физико-математических наук Прудникова Павла Владимировича, главного научного сотрудника отдела материаловедения и физико-химических методов исследования Центра новых химических технологий ИК СО РАН, г. Омск.

Замечание 1. Из текста автореферата не вполне понятно, на основе каких принципов определялось значение параметра $P = -0.1$ мэВ, который характеризует значение эффективного вклада в Гамильтониан от одноионной анизотропии (12) на стр. 11.

Замечание 2. В автореферате не указано проводилось ли сравнение с *ab initio* расчетами? На стр. 32 указано, что предложенная тримерно-страйповая модель описывает экспериментальные данные для $\text{La}_{1/3}\text{Ca}_{2/3}\text{MnO}_3$. Хотелось уточнить, наблюдался ли экспериментально для предсказанных полей спин-флоп переход?

4. От доктора физико-математических наук Глазкова Василия Николаевича, ведущего научного сотрудника ФБГУН Института физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, г. Москва.

Замечание 1. Работа Л.Э.Гончарь выполнена не как «абстрактная» теория, а как теоретическое описание экспериментально наблюдаемых эффектов. Это является, с точки зрения экспериментатора, достоинством этой работы. Однако, именно с точки зрения эксперимента хотелось бы видеть в некоторых моментах более наглядную интерпретацию результатов теории. Например, фазовые диаграммы на рис. 4 и 11 построены в координатах не наблюдаемых непосредственно углов смешивания. Было бы полезно видеть на этих фазовых диаграммах точки, соответствующие параметрам известных манганитов (на рис.4 отсутствует, на рис 11 приведена только для одного соединения из богатого семейства манганитов с $x=1/2$, приведенного в таблице 2).

Замечание 2. В автореферате не отмечены необычные особенности расчётных и экспериментальных спектров АФМР (рис. 6, рис. 14): неполное смягчение низкочастотной моды, «расталкивание» ветвей антиферромагнитного резонанса. При этом в полном тексте диссертационной работы эти особенности анализируются и показывается их связь именно с неколлинеарностью антиферромагнитной структуры.

5. От доктора физико-математических наук Курбакова Александра Ивановича, руководителя отделения нейтронных исследований «Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», г. Гатчина, Ленинградская обл., без замечаний.

Все отзывы положительные, замечания имеют характер уточнений и пожеланий, не влияя на общую оценку работы.

Выбор официальных оппонентов доктора физико-математических наук Р.М. Ереминой, доктора физико-математических наук В.Я Митрофанова и доктора физико-математических наук К.Н. Михалева, а также ведущей организации Федерального государственного бюджетного научного

учреждения «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук» (ФИЦ КНЦ СО РАН), Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН (ИФ СО РАН) обосновывается публикациями оппонентов, тематикой структурного подразделения ведущей организации, относящимся к сфере исследований, которым посвящена диссертация.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

1. Предложена полуколичественная модель орбитально-зависимого сверхобменного взаимодействия, позволяющая объяснить формирование магнитных структур и спектров магнитных возбуждений для псевдоперовскитных диэлектрических манганитов, исходя из кристаллической структуры. Описаны зарядово-орбитально-магнитные структуры диэлектрических псевдоперовскитных манганитов в рамках заданной кристаллической структуры с точки зрения единого подхода, которые коррелируют с имеющимися экспериментальными данными.
2. Построены фазовые диаграммы магнитных структур в зависимости от орбитального состояния при неизменной симметрии орбитального упорядочения; определены количественные характеристики магнитных структур ряда диэлектрических манганитов, в том числе зарядово-упорядоченных, предсказаны низкоразмерный магнетизм и конкуренция обменного взаимодействия за счет ближайших магнитных соседей.
3. Дана теоретическая интерпретация спектров спиновых волн и антиферромагнитного резонанса в рассмотренных соединениях, описаны угловые и полевые зависимости резонансных частот от внешнего магнитного поля. Предложены методы использования спектров антиферромагнитного резонанса для уточнения магнитной структуры, образовавшейся в результате конкуренции обменных взаимодействий.

4. Установлены механизмы влияния внешнего гидростатического давления и немагнитного допирования на магнитную структуру и температуру Нееля в манганите лантана. Показана решающая роль орбитального состояния подрешетки марганца в этих механизмах.
5. Предложена тримерно-страйповая магнитная структура для высокодопированных зарядово-упорядоченных манганитов ($x = 2/3, 3/4, 4/5$) в рамках зарядово-орбитального упорядочения типа «вигнеровский кристалл». Объяснена магнитная структура для манганита с $x = 2/3$. Предсказаны многоподрешеточные магнитные структуры для манганитов с $x = 3/4, 4/5$.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что

1. Разработан подход к определению параметров сверхобменного взаимодействия между ближайшими соседями с учетом кристаллической, зарядовой и орбитальной структур;
2. Установлена количественная связь между орбитальной и магнитной подсистемами в чистых и зарядово-упорядоченных манганитах различной степени допирования; полученные параметры орбитальных зависимостей обменного взаимодействия для пар ионов $Mn^{3+}-Mn^{3+}$, $Mn^{3+}-Mn^{4+}$ в кислородном окружении использованы для моделирования влияния внешних воздействий (магнитного поля, давления, немагнитного замещения ионов Mn^{3+}) на магнитную структуру манганитов.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

1. Рассчитанные спектры могут служить основанием для постановки новых экспериментов при исследовании магнетиков со сложной многоподрешеточной структурой.
2. Модель и результаты моделирования могут быть применены при использовании ян-теллеровских магнетиков, в частности манганитов

различных составов в приборах терагерцовой спектроскопии, а также для описания магнитных свойств высокоэнтропийных манганитов.

3. Рассчитанные параметры предсказанных магнитных структур могут пополнить базы данных.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что в диссертационной работе применены широко апробированные методы расчета магнитных структур и спектров магнитных возбуждений, симметричный подход. Результаты исследования согласуются с экспериментальными данными и с исследованиями других авторов, а выводы, приведенные в работе, не противоречат литературным данным, опубликованным в открытой печати.

Личный вклад соискателя состоит в том, что Л.Э. Гончарь самостоятельно выбрала тему исследования, поставила цели и задачи диссертационной работы, разработала методики расчета орбитальных структур исходя из положений ионов в кристаллической структуре и определения магнитных структур во многоподрешеточной модели; определила орбитальные структуры зарядово-упорядоченных фаз некоторых диэлектрических манганитов и BiMnO_3 ; определила вид и коэффициенты орбитальной зависимости обменных параметров и одноионной анизотропии во всех соединениях, их орбитальную зависимость, величины для конкретных соединений, а также провела их анализ; теоретически определила температуру Нееля в чистых манганитах и ее барическую зависимость; рассчитала магнитные структуры, фазовые диаграммы и спектры магнитных возбуждений всех рассмотренных в работе соединений.

В публикациях с соавторами симметричный анализ орбитальных структур выполнен д.ф.-м.н., проф. А.Е. Никифоровым; орбитальная структура манганита лантана, вибронная постоянная и адиабатический потенциал получены к.ф.-м.н. С.Э. Поповым; влияние немагнитного допирования на кристаллическую структуру манганита и модель электронно-колебательного взаимодействия при наличии не-ян-теллеровской примеси

исследованы А.А. Фирсиным и к.ф.-м.н. С.Э. Поповым; температурная зависимость спектров антиферромагнитного резонанса для LaMnO_3 и их зависимость от направления магнитного поля, влияние антисимметричного обмена, общий вид нелинейных вкладов в вибронный гамильтониан выполнены совместно с к.ф.-м.н. А.А. Можегоровым; расчет локальных симметризованных искажений кислородного окружения ионов марганца в BiMnO_3 выполнены совместно с Т.О. Никитиной; экспериментальные данные о влиянии давления на кристаллическую и магнитную структуры LaMnO_3 предоставлены д.ф.-м.н. Д. П. Козленко из ОИЯИ г. Дубна.

Автор внесла определяющий вклад в подготовку статей и тезисов, лично представляла доклады на научных конференциях.

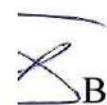
Диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, в которой разработаны теоретические положения для исследования взаимосвязи кристаллической, орбитальной, зарядовой и магнитной структур и моделирования сверхобменного взаимодействия в диэлектрических манганитах, позволяющие описать сложные неколлинеарные магнитные структуры при различных степенях неизовалентного замещения редкоземельных ионов, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение. Диссертация соответствует критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (с последующими изменениями).

В ходе защиты диссертации критических замечаний высказано не было.

На заседании 25.10.2024, проведенном в очном режиме, диссертационный совет принял решение присудить Гончарь Людмиле Эдуардовне учёную степень доктора физико-математических наук по специальности 1.3.12. Физика магнитных явлений.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации 1.3.12. Физика магнитных явлений, 6 докторов наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния, 4 доктора наук по специальности 2.6.1. Металловедение и термическая обработка металлов, участвовавших в заседании, из 21 человека, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту – нет, проголосовали: «за» – 14, «против» – нет, «недейств.» – 2

Председатель диссертационного совета,
доктор физ.-мат. наук, академик РАН


В.В. Устинов

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физ.-мат. наук


Т.Б. Чарикова

28 октября 2024 г.