

Відгук

офіційного опонента на дисертаційну роботу **ЛЕГЕНЬКОЇ Анастасії Олександрівни «ПРОЯВИ ОСОБЛИВОСТЕЙ ЕЛЕКТРОННОЇ СТРУКТУРИ В МАГНІТНИХ ТА НАДПРОВІДНИХ ВЛАСТИВОСТЯХ ШАРУВАТИХ СПОЛУК ПЕРЕХІДНИХ МЕТАЛІВ З МЕТАЛОЇДАМИ»**, поданої на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук із спеціальності 01.04.07 – фізика твердого тіла

Дисертація Легенької Анастасії Олександрівни присвячена вирішенню важливої проблеми сучасної фізики твердого тіла – а саме, теоретичному дослідженню електронних енергетичних спектрів складних сполук перехідних металів, що мають незвичайні фізичні властивості. В даній дисертації також вирішується проблема виявлення зв'язку термодинамічних, надпровідних і магнітних властивостей шаруватих сполук перехідних металів з особливостями їх електронної структури. В останні роки, у зв'язку з дослідженнями фізичних явищ у складних матеріалах та надзвичайним зростом кількості експериментальних даних, стає очевидною необхідність поєднання сучасних експериментальних методів з теоретичними розрахунками на основі квантової теорії твердого тіла. Це особливо актуально для вивчення шаруватих та квазі-двовимірних систем, де важливість врахування неодорідного розподілу зарядової і спінової густини викликає потребу в застосуванні адекватних теоретичних методів. Процес отримання нових матеріалів методом проб і помилок є дуже дорогим, і оптимізація цього процесу без математичного моделювання з використанням методів квантової механіки твердих тіл не представляється можливою.

В дисертації А.О. Легенької вивчені особливості анізотропії електронного впорядкування в гексагональних і тетрагональних системах на основі перехідних металів, зокрема досліджено еволюцію неоднорідного розподілу електронної і спінової густини, а також надпровідних та магнітних властивостей цих систем під впливом всебічного тиску. Були детально досліджені електронні структури різноманітних класів шаруватих сполук, зокрема новітніх надпровідників RNi_2B_2C , RRh_4B_4 , і $FeSe(Te)$, антиферромагнітних сполук $FeGe_2$ і $FeTe$, а також сполук графіту з 3d-металами MC_6 . Вважаю, що новизна і актуальність дисертаційної роботи, як з точки зору фундаментальної фізики твердого тіла, так і з точки зору практичних застосувань, не викликають сумніву.

Відповідність обраній спеціальності. Предметом досліджень дисертаційної роботи А.О. Легенької є деталі електронної структури і кореляції виявлених особливостей електронної структури з аномаліями в проявах магнітних та надпровідних властивостей сполук перехідних металів з металоїдами. Успішне вирішення поставлених задач стало можливим завдяки використанню надійних теоретичних методик, що базуються на методології теорії функціоналу електронної та спінової густини (DFT). Це дозволило провести комплексне теоретичне дослідження електронних структур і термодинамічних властивостей вивчаємих сполук. Безумовно, дисертація А.О. Легенької повністю відповідає спеціальності 01.04.07 – фізика твердого тіла.

Мету дисертаційної роботи – детальне дослідження особливостей електронних енергетичних спектрів анізотропних металевих систем на основі перехідних металів та їхнього впливу на надпровідні і магнітні властивості — вважаю досягнутою. Дисертація є закінченою науковою роботою.

Новизна отриманих наукових результатів. Засвідчую, що всі положення та результати, які сформульовані автором дисертації в пункті «наукова новизна», є новими, вперше отриманими та коректно сформульованими автором.

Перший розділ дисертації присвячений детальному опису теоретичних методів досліджень. Зокрема, описана теорія функціоналу густини. Основна увага приділяється деталям повнопотенціального методу FP-LMTO, який використовується у наступних розділах дисертації. У цьому розділі також надані відомості про реалізацію методів обчислювальної фізики для розрахунків різноманітних властивостей твердих тіл, а також, що вважаю важливим, оригінальні доповнення до вже відомих методів.

У **другому розділі** приведені результати розрахунків електронної структури і термодинамічних характеристик сполук борокарбідів YNi_2B_2C , $LaNi_2B_2C$ і $LuNi_2B_2C$. Ці сполуки містять немагнітні тривалентні перехідні метали Y, La і Lu, зовнішні електронні оболонки яких аналогічні рідкісноземельним елементам. Виявлені кореляції надпровідних та магнітних властивостей цих сполук.

Третій розділ містить результати розрахунків з перших принципів електронної структури, густини електронних станів і термодинамічних характеристик сполук родієвих боридів RRh_4B_4 з немагнітними тривалентними перехідними металами Y і Lu. Встановлено наявність в густині електронних станів в обох системах піку на рівні Фермі E_F , а також псевдощільни в районі 1 eV нижче енергії Фермі. Розрахунки магнітної сприйнятливості досліджених боридів родію вказують на присутність значних діаманітних внесків електронів провідності в їх сприйнятливості.

Четвертий розділ стосується досліджень особливостей електронної структури

сполуки FeSe, що є представником класу новітніх залізовмісних надпровідників. Розрахунки з перших принципів електронної структури та парамагнітної сприйнятливості проводилися для аналізу впливу тиску на магнітні та надпровідні властивості FeSe. Характерною особливістю надпровідника FeSe є експериментально встановлений швидкий зріст температури надпровідного переходу T_c в умовах тиску. Зокрема, в широкому інтервалі тисків спостерігалася немонотонна поведінка $T_c(P)$. Проведені розрахунки впливу тиску на поведінку густини електронних станів на рівні Фермі $N(E_F, P)$ демонструють немонотонну поведінку в області низьких тисків, що якісно корелює з поведінкою $T_c(P)$.

У *п'ятому розділі* теоретично досліджені особливості основного стану зонних антиферромагнетиків FeTe і FeGe₂. Встановлені особливості магнітного впорядкування в FeTe і FeGe₂. Доведено, що основному стану FeTe відповідає фрустрована біколінеарна АФМ фаза. Для сполуки FeGe₂ встановлена колінеарна АФМ фаза, якій відповідає поверхня Фермі, що узгоджується з експериментальними даними по ефекту де Гааза - ван Альфена.

У *шостому розділі* досліджена еволюція електронної структури графіту при інтеркаляції магнітними атомами перехідних 3d-металів V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni. Фактично, об'єктом досліджень були електронні спектри та магнітні властивості сполук графіту зі стехіометричною формулою MC_6 .

Не повторюючи численних висновків роботи, я хотів би відзначити найбільш важливі — на мій погляд — результати роботи.

1. Для сполуки FeSe вперше встановлено немонотонну залежність густини електронних станів на рівні Фермі від тиску, що якісно корелює з характерною поведінкою температури надпровідного переходу цієї сполуки. Така згода дозволяє припустити, що в механізмі виникнення надпровідності в сполуці FeSe певну роль відіграє поведінка густини електронних станів на рівні Фермі.
2. Для сполук YRh₄B₄ і LuRh₄B₄ встановлена природа значного діамагнітного внеску електронів провідності, що пов'язана з наявністю квазівироджених електронних станів з аномально малою ефективною масою поблизу рівня Фермі.
3. Виявлено фрустрований характер біколінеарної антиферромагнітної фази сполуки FeTe, що пояснює суперечливі дані нейтронографічних досліджень та зміну знака анізотропії магнітної сприйнятливості.

4. Вперше встановлена можливість реалізації стану феромагнітного половинного металу (half-metal) в системах MnC_6 , FeC_6 та CoC_6 , що може бути використано в галузі спінтроники.

Наукова та практична цінність отриманих результатів полягає в тому, що вони можуть бути використані для розвитку фізики, технології та діагностики нових шаруватих сполук перехідних металів. Отримані оригінальні результати також сприяють одержанню фундаментального уявлення про електронну структуру для практично актуальних квазі-двовимірних функціональних матеріалів, і безумовно є цінними як для фізики твердого тіла, так і для фізичного матеріалознавства.

Всі результати, отримані в дисертації, і її висновки, безумовно, є **достовірними і науково обґрунтованими**, мають чітку фізичну інтерпретацію, є добре проаналізованими. Вірогідність одержаних результатів забезпечується використанням сучасних розрахункових методів та адекватних моделей. Також зазначу, що на користь коректності низки результатів свідчить їхня узгодженість з відомими з літератури експериментальними даними.

Вважаю за необхідне також висловити наступні зауваження:

1. В дисертації детально вивчалась електронна структура сполуки $FeTe$ в умовах антиферомагнітного впорядкування. Однак зовсім не розглянута причина переходу в феромагнітну фазу $FeTe$, яка виявлена експериментально під впливом високого тиску.

2. Відомо, що в $FeSe$ при тисках більш ніж 0,9 ГПа виникає антиферомагнітне впорядкування з малими магнітними моментами, які не перевищують 0,2 μ_B . Ця магнітновпорядкована фаза співіснує з надпровідною фазою. Але можливість виникнення антиферомагнітної фази в $FeSe$ під тиском в дисертації не була розглянута.

3. В літературі є дані про інтеркальовані сполуки графіту типу MC_{12} , які не були розглянуті в дисертації. Відповідні розрахунки електронної структури і магнітних властивостей MC_{12} дозволили б виявити особливості еволюції цих характеристик при інтеркаляції графіту металами.

Ці зауваження не стосуються сутності дисертації Легенької А.О., не ставлять під сумнів її основні положення і висновки, і не впливають на загальну високу оцінку роботи. Основні результати дисертаційної роботи викладено в 7 статтях у фахових наукових виданнях та оприлюднені на багатьох міжнародних конференціях. Опубліковані за

матеріалами дисертаційної роботи праці повністю відображають зміст і основні положення дисертації. Це ж стосується і автореферату.

На підставі викладеного вище вважаю, що дисертаційна робота Легенької А.О. є завершеним науковим дослідженням в галузі фізики твердого тіла. За актуальністю теми, змістом і об'ємом, науковим рівнем і новизною, практичною спрямованістю дисертація «Прояви особливостей електронної структури в магнітних та надпровідних властивостях шаруватих сполук перехідних металів з металоїдами» задовольняє вимогам МОН України до кандидатських дисертацій, зокрема пунктам 9, 11, 12 "Порядку присудження наукових ступенів", а її автор, Легенька Анастасія Олександрівна, заслуговує присудження наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла.

Офіційний опонент:

доктор фізико-математичних наук, професор
лауреат Державної премії України з науки та техніки
завідувач відділу теорії динамічних властивостей складних систем
Донецького фізико-технічного інституту
ім. О.О. Галкіна НАН України (м. Київ)

Ю. Г. Пашкевич

Підпис Ю.Г. Пашкевича засвідчую:

Вчений секретар
Донецького фізико-технічного інституту
ім. О.О. Галкіна НАН України
кандидат технічних наук



В. Ю. Дмитренко