

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 вивченню за допомогою сучасних квантово-механічних методів зонних розрахунків електронної структури низки шаруватих сполук перехідних металів та встановленню зв'язку між її особливостями та магнітними і надпровідними властивостями цих сполук. Розробка нових функціональних матеріалів потребує інтенсивних теоретичних досліджень. Одними з найбільш ефективних методів таких досліджень є методи обчислювальної фізики твердого тіла, які дозволяють проводити розрахунки фізичних властивостей існуючих та модельних структур, виходячи з перших принципів. Комп'ютерні експерименти дають змогу відтворити фізичні процеси і на основі аналізу адекватних моделей провести дослідження та оцінити ступінь впливу різних мікроскопічних механізмів, а також прогнозувати поведінку матеріалів під впливом тиску, механічних напруг та деформацій, домішок, температури, випромінювання тощо. У цьому контексті тема дисертаційної роботи А.О. Легенької є актуальною як з точки зору фундаментальної науки, так і з точки зору практичних застосувань. Дисертаційну роботу виконано у групі д.ф.-м.н. професора Г. Є. Гречнева – наукового керівника дисертантки – за тематикою й у відповідності до планів держбюджетних досліджень відділу магнітних і пружних властивостей твердих тіл ФТІНТ ім. Б. І. Веркіна НАН України.

В своїй дисертаційній роботі А.О. Легенька вивчає такі сполуки перехідних металів з металоїдами, як надпровідні борокарбіди нікелю RNi_2B_2C , бориди родію RRh_4B_4 , сполуки на основі заліза $FeSe$ і $FeTe$, антиферомагнітні сполуки на основі заліза, інтеркальований $3d$ металами графіт. Розрахунки у роботі виконані в рамках теорії функціоналу густини (DFT) з використанням наближення локальної густини (LDA) та узагальненого градієнтного наближення (GGA), які вже є стандартними у зонних розрахунках. Чисельний розв'язок рівнянь DFT виконувався відомими лінійними методами MT-орбіталей і приєднаних пласких хвиль з потенціалом загальної форми (відповідно FP-LMTO і FP-LAPW). Обрані методи є цілком адекватними поставленим в роботі задачам. Дисертаційна робота безумовно повністю відповідає спеціальності 01.04.07 – фізика твердого тіла.

Наведені в дисертаційній роботі наукові обґрунтування виконані коректно на високому науковому рівні. Результати, що містяться в дисертації, отримані вперше. Зокрема, хотілося б зазначити наступні нові й найбільш важливі результати:

1) для надпровідних сполук RNi_2B_2C і RRh_4B_4 встановлено наявність піків густини

електронних станів поблизу рівня Фермі;

- 2) для сполук YRh_4B_4 і LuRh_4B_4 встановлено наявність і конкуренцію аномально великих орбітальних внесків в магнітну сприйнятливість;
- 3) для сполуки FeSe встановлено, що залежність густини електронних станів на рівні Фермі від тиску якісно корелює з характерною немонотонною поведінкою температури надпровідного переходу сполуки в широкому інтервалі тисків;
- 4) встановлено, що в основному стані магнітна структура сполуки FeTe є фрустрованою біколінеарною антиферомагнітною;
- 5) встановлено, що в основному стані магнітне впорядкування в сполуці FeGe_2 є антиферомагнітним з колінеарним впорядкуванням моментів заліза в базальній площині;
- 6) встановлено, що сполуки MnC_6 , FeC_6 і CoC_6 можуть бути напівметалічними феромагнетиками, тобто сполуками, що для одного з напрямків спіну мають щілину на рівні Фермі.

Дисертація складається з Вступу, шести розділів, Висновків, списку цитованої літератури.

У *Вступі* висвітлено актуальність обраної теми і сформульовано мету й задачі дисертаційної роботи, зазначено наукову новизну одержаних результатів, зроблено короткі висновки щодо значущості дисертації для науки і практики, коротко сформульовано зміст дисертації.

В *першому розділі* наведено основні відомості з теорії функціоналу електронної густини та коротко викладено формалізм лінійних методів з потенціалом загальної форми FP-LMTO і FP-LAPW, за допомогою яких отримано результати роботи.

Другий розділ присвячений аналізу результатів розрахунків електронної структури борокарбідів нікелю $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$, $\text{LaNi}_2\text{B}_2\text{C}$ і $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$, а також аналізу впливу її особливостей на надпровідні та магнітні властивості. Розрахунки розподілу електронної густини дали можливість виявити характер хімічних зв'язків та міжатомних сил у борокарбідах нікелю. Наводяться результати розрахунків поверхні Фермі. Проведена оцінка температур надпровідного переходу для досліджуваних борокарбідів нікелю з використанням формули Макміллана. Зроблено висновок, що отримані результати в цілому свідчать про електрон-фононний механізм надпровідності типу БКШ в борокарбідах нікелю.

Третій розділ присвячений розрахункам електронної структури та аналізу на їх основі властивостей надпровідних сполук боридів родію YRh_4B_4 та LuRh_4B_4 . Для обох сполук встановлена присутність піку густини електронних станів поблизу рівня Фермі. Проведено розрахунки парамагнітної сприйнятливості досліджених боридів, а також зіставлення розрахованої сприйнятливості з даними експериментів, яке вказує на наявність великих

діамагнітних внесків електронів провідності в магнітну сприйнятливість.

Четвертий розділ містить результати досліджень електронної структури надпровідної сполуки FeSe. В ньому наведені результати теоретичного дослідження поведінки густини електронних станів та парамагнітної сприйнятливості під впливом зовнішнього тиску. З'ясовано природу незвичайного зростання магнітної сприйнятливості під тиском, а також виявлено немонотонну поведінку густини електронних станів на рівні Фермі під тиском, яка корелює з поведінкою температури переходу у надпровідний стан.

У *п'ятому розділі* наводяться результати дослідження електронної структури та особливостей магнітного впорядкування в сполуках FeTe і FeGe₂. Наводяться результати розрахунків поверхні Фермі сполук FeTe і FeGe₂, які узгоджуються з експериментальними даними ефекту де Гааза - ван Альфена. Встановлено, що при переході від парамагнітної до біколінеарної антиферромагнітної фази поверхня Фермі сполуки FeTe зазнає кардинальних змін, що може бути причиною зміни знаку коефіцієнта Холла. Для сполуки FeGe₂ підтверджена колінеарна антиферромагнітна фаза. Для сполуки FeTe на основі розрахованих розподілу електронної густини і заселеності перекриття кристалічних орбіталей проведений аналіз характеру хімічного зв'язку.

У *шостому розділі* моделюється перебудова електронної структури графіту при інтеркаляції атомами перехідних металів V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni. Встановлені особливості електронної структури сполук графіту зі стехіометричною формулою MC₆.

Висновки дисертації відповідають її змісту і стисло висвітлюють одержані наукові результати.

Наближення, що застосовані в дисертації, здаються мені цілком фізичними й аргументованими і забезпечують достатню обґрунтованість сформульованих наукових положень і висновків. Достовірність виконаних досліджень забезпечується обраною методикою розв'язання поставлених задач та підтверджується узгодженням з відомими із літератури даними теоретичних та експериментальних досліджень.

Дисертантка виконала ґрунтовну і трудомістку роботу. Низка питань, які розглянуті в дисертації, носить досить загальний характер, і здобуті в роботі фундаментальні уявлення можуть бути корисними для обґрунтування і в деякій мірі для завбачення властивостей аналогічних металовмісних шаруватих сполук. Одержані результати можуть бути використані у подальших теоретичних і експериментальних дослідженнях надпровідних та магнітних сполук, а також для застосувань в області спінтроніки, можуть скласти сучасну основу відповідного розділу в навчальному процесі при підготовці спеціалістів і магістрів з фізики конденсованого стану речовини і матеріалознавства.

Дисертацію побудовано логічно, написано ясною, науковою мовою і оформлено

відповідно вимогам до кандидатських дисертацій.

Матеріали дисертації висвітлені в 7 статтях у іноземних та вітчизняних періодичних фахових виданнях, доповідалися і обговорювалися на міжнародних наукових конференціях.

Автореферат дисертації, а також опубліковані праці цілком і вірно відображають зміст і основні положення дисертації.

Разом з тим, по дисертаційній роботі слід зробити наступні зауваження:

1) у першому розділі дисертації недостатньо детально описаний лінійний метод приєднаних пласких хвиль з потенціалом загальної форми (FP-LAPW);

2) у дисертації не була виконана якісна оцінка аномально великого орбітального діаманетизму сполук RRh_4B_4 , хоча автором були проведені детальні розрахунки електронної структури, і всі необхідні параметри спектра могли бути отримані;

3) у дисертації не роз'яснено, чому перебудова поверхні Фермі сполуки FeTe при антиферромагнітному впорядкуванні призводить до зміни знака коефіцієнта Холла;

4) бажано б було навести більше відомостей щодо деталей розрахунків, зокрема, числові значення параметрів ґратки, кількість k-точок в незвідній частині зони Бріллюена.

Ці зауваження не торкаються сутності дисертації, не ставлять під сумнів її основні висновки, і не можуть знизити загальної високої оцінки роботи. Вважаю, що за своїм вмістом, актуальністю теми, науковим рівнем, новизною та значенням одержаних результатів дисертаційна робота А. О. Легенької «Прояви особливостей електронної структури в магнітних та надпровідних властивостях шаруватих сполук перехідних металів з металоїдами» задовольняє вимогам "Порядку присудження наукових ступенів і присвоєння вченого звання старшого наукового співробітника" (Постанова КМУ 24.07.2013р. № 567), зокрема, пп. 9, 11, 12, а також вимогам МОН України до кандидатських дисертацій, а її автор, Легенька Анастасія Олександрівна, заслуговує присудження наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук зі спеціальності 01.04.07 – фізика твердого тіла.

Офіційний опонент:

кандидат фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник відділу
обчислювальної фізики
Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова
НАН України



Л.В. Бекеньов

Підпис Л.В. Бекеньова засвідчую:
Учений секретар
Інституту металофізики
ім. Г.В. Курдюмова НАН України
кандидат фізико-математичних наук




С.В. Кочелаб