

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Моцейко Алексея Витальевича** «Атомное упорядочение, магнитные и магнитоэлектрические свойства оксидов и сульфидов со структурами перовскита и шпинели» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Диссертация Моцейко Алексея Витальевича посвящена исследованию атомного упорядочения, магнитных и магнитоэлектрических свойств перовскитных оксидов и шпинельных сульфидов. В работе проведено теоретическое исследование процессов атомного упорядочения в *B*-подрешётке высокоэнтропийных оксидов семейства перовскита, магнитных свойств твёрдых растворов перовскитов $(1 - x)\text{BiFeO}_3 - x\text{AFe}_{1/2}\text{M}_{1/2}\text{O}_3$ ($A = \text{Pb, Ba, Ca, Sr}$; $M = \text{Nb, Sb}$), а также магнитных и магнитоэлектрических свойств сульфида со структурой шпинели MnCr_2S_4 .

Результаты диссертации вносят существенный вклад в развитие представлений о функциональных материалах. Получено простое соотношение для оценки температур атомного упорядочения в высокоэнтропийных перовскитах, полезное для экспериментальных исследований, а разработанная модель позволяет рассчитывать распределение катионов по подрешёткам, что важно для интерпретации рентгendifракционных данных. Рассчитаны зависимости температур магнитного упорядочения от концентрации в твёрдых растворах систем $(1 - x)\text{BiFeO}_3 - x\text{AFe}_{1/2}\text{M}_{1/2}\text{O}_3$ ($A = \text{Pb, Ba, Ca, Sr}$; $M = \text{Nb, Sb}$) с различным характером распределения катионов по *B*-подрешётке перовскита, значимые для поиска мультиферроиков с близкими температурами сегнетоэлектрического и магнитного переходов. Индуцирование электрической поляризации в MnCr_2S_4 объяснено треугольным спиновым упорядочением Яфета-Киттеля, открывающее новые перспективы для поиска мультиферроиков в этом классе материалов.

Полученные в диссертации результаты опубликованы в 9 работах, из которых 4 статьи в рецензируемых зарубежных и российских научных журналах, индексируемых в международных базах данных Scopus и Web of Science, а остальные – статьи и тезисы в сборниках трудов международных и всероссийских конференций.

К работе можно сделать следующие замечания:

1. В работе широко используется метод Монте-Карло, что, безусловно, оправдано для задач такого рода. Однако в автореферате практически отсутствует обсуждение ограничений данного метода применительно к моделированию высокоэнтропийных систем, таких как влияние размера моделируемой сверхъядчейки на точность определения температур упорядочения и параметров порядка. Проводились ли тесты на сходимость относительно размера системы?
2. В разделе, посвящённом MnCr_2S_4 , качественно описан механизм возникновения

поляризации. Однако, для оценки практической значимости результата в выводах раздела неплохо бы было указать порядок величины вычисленной электрической поляризации для сравнения с известными мультиферроиками.

3. В описании расчётов методом DFT (Раздел 2) указано использование поправки Хаббарда (GGA+U) при расчете обменных взаимодействий. К сожалению, в автореферате не указано какие значения параметра U для различных ионов (Fe, Cr, Mn и др.) использовались, однако, от этого выбора могут существенно зависеть рассчитанные обменные параметры.

4. В работе приведены расчёты параметров решётки для некоторых синтезированных барий-содержащих соединений, показавшие расхождение с экспериментом. Интересно было бы провести краткий анализ возможных причин этих расхождений и то, как они могут быть учтены в модели.

Приведенные замечания носят скорее конструктивный характер и не снижают общего высокого уровня исследования. Таким образом, диссертация Моцейко А. В. представляет собой завершённое исследование на актуальную тему, имеющее существенное значение для физики конденсированного состояния. Выводы работы достаточно обоснованы. Работа соответствует всем предъявляемым к кандидатским диссертациям требованиям действующего Положения о присуждении учёных степеней в ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», а автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

05.09.2025 г.

Жандун Вячеслав Сергеевич,
доцент, кандидат физико-математических наук
(специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния),
старший научный сотрудник

Института физики имени Л. В. Киренского Сибирского отделения РАН – обособленное подразделение ФИЦ КИЦ СО РАН, Красноярск 660036, Академгородок 50/38, тел. +79504068950, jvc@iph.krasn.ru.

Согласен на обработку персональных данных

Подпись Жандуна Вячеслава Сергеевича заверяю:

Заверяю
Ученый секретарь К. Ф. - и. н.
Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского
отделения Российской академии наук - обособленное
подразделение ФИЦ КИЦ СО РАН (ИФ СО РАН)

