

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА ЮФУ801.01.06,
созданного на базе Научно-исследовательского института физики ЮФУ,
по диссертации на соискание учёной степени **кандидата наук**

аттестационное дело № _____,
решение диссертационного совета от 30.09.2025 № 62

О присуждении **Моцейко** Алексею Витальевичу, гражданину РФ, учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация **«Атомное упорядочение, магнитные и магнитоэлектрические свойства оксидов и сульфидов со структурами перовскита и шпинели»** по специальности **1.3.8. Физика конденсированного состояния**, принятая к защите 10.07.2025 (протокол заседания № **52**) диссертационным советом ЮФУ801.01.06, созданным на базе НИИ физики ЮФУ, приказ № 236-ОД от 20.09.2024.

Соискатель Моцейко Алексей Витальевич, 1996 года рождения, в 2021 году окончил магистратуру физического факультета Южного федерального университета по направлению 03.04.02 Физика. В период с 01.10.2021 по 30.09.2025 был аспирантом федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южный федеральный университет» по направлению 03.06.01 – Физика и астрономия, по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Диссертация выполнена в отделе кристаллофизики НИИ физики ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет» Министерства науки и высшего образования РФ.

Научный руководитель: **Тер-Оганесян** Никита Валерьевич, доктор физ.-мат. наук, главный научный сотрудник, зав. отделом кристаллофизики НИИ физики Южного федерального университета.

Официальные оппоненты: **Пятаков** Александр Павлович, доктор физико-математических наук, профессор РАН, Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова (Москва), Физический факультет, Кафедра физики

колебаний, профессор, и **Метлов** Константин Леонидович, доктор физико-математических наук, Донецкий физико-технический институт имени А. А. Галкина (Донецк), отдел теории электронных и кинетических свойств нелинейных систем, ведущий научный сотрудник, дали положительные отзывы.

Соискатель имеет 9 опубликованных работ по теме диссертации (общим объёмом 2,1 п. л. в соавторстве, из которых соискателю принадлежит 1,5 п. л.), из них 4 статьи в российских и международных журналах, входящих в базы данных Scopus и/или Web of Science, и в изданиях, входящих в Перечень научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёных степеней, остальные публикации – статьи и тезисы в трудах конференций различного уровня.

Наиболее значимые публикации соискателя:

1. Motseyko, A. V. Electric Polarization Induced by Yafet–Kittel Ordering in Spinels / **A. V. Motseyko**, N. V. Ter-Oganessian // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics.* – 2023. – Vol. 87, No. 9. – P. 1282-1287. – DOI 10.3103/s1062873823703161. [*Русскоязычная версия*: Моцейко, А. В. Индуцирование электрической поляризации упорядочением типа Яфета–Киттеля в шпинелях / А. В. Моцейко, Н. В. Тер-Оганесян // *Известия Российской академии наук. Серия физическая.* – 2023. – Т. 87, № 9. – С. 1242-1247. – DOI 10.31857/S0367676523702198.].

2. Motseyko, A. V. On the atomic ordering in the *B*-sublattice of high-entropy perovskites / **A. V. Motseyko**, N. V. Ter-Oganessian // *Journal of Alloys and Compounds.* – 2024. – Vol. 976. – P. 172945. – DOI: 10.1016/j.jallcom.2023.172945.

3. Monte Carlo studies of magnetic phase transitions in $(1-x)\text{BiFeO}_3 - x\text{AFe}_{1/2}\text{M}_{1/2}\text{O}_3$ ($A = \text{Pb, Ba, Ca, Sr}$; $M = \text{Nb, Sb}$) solid solutions / **A. V. Motseyko**, S. A. Guda, A. V. Pushkarev, N. M. Olekhovich, Y. V. Radyush, I. P. Raevski, N. V. Ter-Oganessian // *Ferroelectrics.* – 2025. – V. 619. – No. 4-6. – P. 216–224. – DOI: 10.1080/00150193.2024.2328847.

4. Magnetic phase transitions in $(1-x)\text{BiFeO}_3 - x\text{PbFe}_{1/2}\text{Sb}_{1/2}\text{O}_3$ solid solutions studied by the Monte Carlo method / **A. V. Motseyko**, A. V. Pushkarev, N. M. Olekhovich, Y. V. Radyush, N. V. Ter-Oganessian // *Computational Materials Science.* – 2025. – Vol. 253. – P. 113860. – DOI 10.1016/j.commatsci.2025.113860.

На автореферат диссертации поступило 4 положительных отзыва. Замечания и вопросы имеются в отзыве **Жандуна** В. С. (ИФ имени Л. В. Киренского СО РАН, Красноярск): 1) «...практически отсутствует обсуждение ограничений метода Монте-Карло применительно к моделированию высокоэнтропийных систем»: «...влияние размера ... сверхячейки на точность определения температур упорядочения и параметров порядка» и вопрос: «Проводились ли тесты на сходимость относительно размера системы?»; 2) «...неплохо бы было указать порядок величины вычисленной электрической

поляризации MnCr_2S_4 для сравнения с известными мультиферроиками...»; 3) в расчётах методом DFT «... 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...» и 4) пожелание: «...Интересно было бы провести краткий анализ возможных причин ... расхождений расчётных параметров решётки для некоторых синтезированных барий-содержащих соединений и то, как они могут быть учтены в модели».

В отзывах Лушников С. Г. (ФТИ имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург); Бебихова Ю. В. (ФПТИ СВФУ имени М. Л. Аммосова, Мирный, Республика Саха, Якутия) и Абалмасова В. А. (ИМ имени С. Л. Соболева СО РАН, Новосибирск) об автореферате диссертации замечаний и вопросов не обнаружено.

Выбор официальных оппонентов обосновывается тем, что **Пятаков А. П.** является известным специалистом в области теоретической физики конденсированного состояния, в частности, физики магнитных материалов и физики твёрдого тела, и обладает значительным опытом исследований магнитных и магнитоэлектрических свойств, а **Метлов К. Л.** является специалистом в области теории магнитных фазовых переходов и физики твёрдого тела.

Диссертационный совет отмечает, что в результате проведённых соискателем исследований разработан в приближении ненапряжённых катион-анионных связей с использованием метода Монте-Карло оригинальный подход к моделированию процесса атомного упорядочения в высокоэнтропийных оксидах со структурой типа перовскита, который позволяет учитывать влияние произвольного приложенного давления на процессы упорядочения катионов в В-подрешётке и показано, что в этих оксидах могут формироваться упорядоченные структуры типа каменной соли; определены температуры фазового перехода «порядок – беспорядок» $T_{\text{поряд}}$, и рассчитано температурное поведение параметра приведённой перовскитовой ячейки, заселённость возникающих подрешёток различными катионами и установлена зависимость $T_{\text{поряд}} = C\sigma_l^2$, где $C = 1.73 \cdot 10^6$ К, которая на основе расчёта нормированного

среднеквадратичного отклонения длин ненапряжённых катион-анионных связей σ_l в B -подрешётке высокоэнтропийных оксидов позволяет оценить температуры их фазовых переходов в упорядоченное состояние; с использованием метода Монте-Карло *рассчитаны* температуры фазовых переходов атомного упорядочения, параметры приведённых элементарных ячеек и распределение катионов по позициям упорядоченных подрешёток в структуре типа перовскита высокоэнтропийных оксидов известных и новых гипотетических составов.

Разработаны алгоритм и компьютерная программа для численного моделирования магнитных фазовых переходов в кристаллах с учётом одноионной магнитной анизотропии и биквадратного обмена с использованием метода Монте-Карло и теории функционала плотности и *рассчитаны* обменные константы для твёрдых растворов нескольких систем составов вида $(1-x)\text{BiFeO}_3 - xA^{\text{II}}\text{Fe}_{1/2}^{\text{III}}B_{1/2}^{\text{V}}\text{O}_3$ со структурой типа перовскита, где $A^{\text{II}} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Pb}$ или Ba и $B^{\text{V}} = \text{Nb}$ или Sb , температуры их магнитных фазовых переходов и тип возникающего магнитного порядка с учётом различных распределений атомов по B -подрешётке; *установлено* влияние случайного, кластеризованного, частично или полностью упорядоченного распределения катионов на температуры их магнитных фазовых переходов, а экспериментально наблюдаемое для Nb-содержащих систем с $A = \text{Ca}$ или Sr уменьшение температуры Нееля T_N при $x > 0,7$ *объяснено* изменением локального катионного порядка в их подрешётках.

Построены магнитные фазовые диаграммы для твёрдых растворов системы $(1-x)\text{BiFeO}_3 - x\text{PbFe}_{1/2}^{\text{III}}\text{Sb}_{1/2}^{\text{V}}\text{O}_3$ при неупорядоченном, частичном или полностью упорядоченном распределении катионов Fe^{III} и Sb^{V} и *обнаружена* магнитная морфотропная фазовая граница между магнитной структурой G-типа, характерной для BiFeO_3 , при $x < 0,7$ и магнитным порядком, наблюдаемым у упорядоченного $\text{PbFe}_{1/2}^{\text{III}}\text{Sb}_{1/2}^{\text{V}}\text{O}_3$, при $x > 0,7$.

На примере кристалла MnCr_2S_4 *установлено*, что треугольное ферромагнитное упорядочение Яфета – Киттеля в шпинелях с неколлинеарными спинами в A -подрешётке приводит к возникновению электрической поляризации,

а сам кристалл шпинели становится мультиферроиком II типа, и *определён* магнитоэлектрический вклад в разложение термодинамического потенциала, который отвечает при таком упорядочении за индуцирование электрической поляризации в кристалле шпинели.

Теоретическая значимость полученных результатов обоснована тем, что впервые *разработаны* метод, алгоритм и компьютерная программа для моделирования атомного упорядочения в оксидах со структурой типа перовскита с произвольным многокатионным заполнением *B*-подрешётки; для ряда высокоэнтропийных оксидов со структурой типа перовскита *рассчитаны* температуры фазовых переходов атомного упорядочения, и *выявлена* их зависимость от нормированного среднеквадратичного отклонения длин ненапряженных катион-анионных связей в их *B*-подрешётке.

Для твёрдых растворов со структурой типа перовскита нескольких систем $(1-x)\text{BiFeO}_3 - xA^{\text{II}}\text{Fe}_{1/2}^{\text{III}}B_{1/2}^{\text{V}}\text{O}_3$, где $A^{\text{II}} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Pb}$ или Ba и $B^{\text{V}} = \text{Nb}$ или Sb , при учёте возможности кластеризации атомов, а также локального или дальнего атомного упорядочения в их *B*-подрешётке *выявлена* концентрационная зависимость температур их магнитных фазовых переходов, магнитных свойств и типа возникающего магнитного порядка.

Показано, что треугольное упорядочение типа Яфета – Киттеля с неколлинеарным упорядочением спинов в *A*-подрешётке шпинелей приводит к возникновению электрической поляризации, а сложная фазовая диаграмма шпинели MnCr_2S_4 в координатах «магнитное поле – температура» объясняется учётом одноионной магнитной анизотропии.

Значение полученных результатов для практики определяется 1) важностью установленного соотношения между температурой катионного упорядочения в высокоэнтропийных оксидах со структурой типа перовскита с произвольным заполнением *B*-подрешётки и нормированного среднеквадратичного отклонения длин их ненапряженных катион-анионных связей для использования при дизайне и структурном исследовании новых

высокоэнтропийных упорядоченных оксидов; 2) полезностью рассчитанных концентрационных зависимостей температур магнитного упорядочения твёрдых растворов ряда систем $(1-x)\text{BiFeO}_3 - xA^{\text{II}}\text{Fe}_{1/2}^{\text{III}}B_{1/2}^{\text{V}}\text{O}_3$, где $A^{\text{II}} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Pb}$ или Ba и $B^{\text{V}} = \text{Nb}$ или Sb , с учётом различных вариантов распределения катионов по B -подрешётке для поиска новых мультиферроиков с программируемым сближением температур их сегнетоэлектрического и магнитного фазовых переходов и 3) целесообразностью использования обнаруженного индуцирования электрической поляризации треугольным упорядочением типа Яфета - Киттеля в шпинелях с неколлинеарными спинами в A -подрешётке для направленного поиска новых мультиферроиков II-типа в кристаллическом семействе шпинели.

Оценка достоверности полученных результатов и выводов выявила, что они базируются на теоретических подходах и методах современной физики конденсированного состояния и не противоречат опубликованным данным, а их достоверность обеспечивается корректным применением актуальных теоретических методов анализа, в частности, метода Монте-Карло и спин-поляризованной теории функционала плотности, а также применением современных методов обработки числовых данных.

Личный вклад соискателя состоит в том, что он лично выбрал теоретические методы для моделирования процессов атомного упорядочения в подрешётках сложных оксидов со структурой типа перовскита, магнитного упорядочения в оксидах со структурой типа перовскита и сульфидах со структурой типа шпинели, провёл апробацию этих методов, разработал модели и соответствующие компьютерные программы, а также провёл все необходимые расчёты. Выбор направления, цели и задач исследования, интерпретация основных полученных результатов и выводов, формулирование научных положений, выносимых на защиту, и подготовка совместных публикаций и докладов к конференциям осуществлялись совместно с научным руководителем.

На заседании 30.09.2025 диссертационный совет отметил, что рассматриваемая диссертация соответствует критериям раздела 2 «Положения о

присуждении учёных степеней в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Южный федеральный университет», и принял решение присудить **Моцейко А. В.** учёную степень **кандидата физико-математических наук.**

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из которых 9 докторов наук по научной специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета (дополнительных членов не вводилось), проголосовали: за – 18, против – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Зам. председателя
диссертационного совета



Козаков Алексей Титович

Учёный секретарь
диссертационного совета

Гегузина Галина Александровна

03.10.2025