

ОТЗЫВ

официального оппонента доктора физ.-мат. наук
Пятакова Александра Павловича на диссертацию
Моцейко Алексея Витальевича «Атомное упорядочение, магнитные и
магнитоэлектрические свойства оксидов и сульфидов со структурами
перовскита и шпинели», представленную на соискание
ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности
1.3.8. Физика конденсированного состояния

Высокоэнтропийные материалы и, в частности, оксиды со структурой перовскита привлекают значительное внимание исследователей в последние годы, поскольку зачастую обладают повышенной прочностью, термической стабильностью и коррозионной стойкостью. Однако, возможность атомного упорядочения в таких системах, условия его возникновения и влияние на функциональные свойства остаются малоизученными и представляют как практический, так и фундаментальный интерес.

Особый интерес представляют мультиферроики – кристаллы, сочетающие сегнетоэлектрическое и магнитное упорядочения и открывающие перспективы для создания новых типов сенсоров, элементов памяти и устройств спинтроники. В связи с этим активно исследуются твердые растворы BiFeO_3 – наиболее известного мультиферроика – с другими перовскитами, в том числе $\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ и $\text{PbFe}_{1/2}\text{Sb}_{1/2}\text{O}_3$, в которых распределение катионов по *B*-подрешетке может существенно влиять на сегнетоэлектрические и магнитные свойства.

Наряду с перовскитами важное место занимают кристаллы со структурой шпинели, обладающие богатым спектром магнитных и магнитоэлектрических явлений. Среди них выделяется шпинель MnCr_2S_4 , которая в магнитном поле демонстрирует сложную магнитную фазовую диаграмму с чередованием различных магнитных и магнитоэлектрических фаз, понимание причин возникновения которых важно для поиска новых магнитоэлектриков и мультиферроиков со структурой шпинели.

Все это делает актуальной диссертационную работу А. В. Моцейко посвященную теоретическому исследованию возможности и процессов атомного упорядочения в *B*-подрешетке высокоэнтропийных оксидов со структурой типа перовскита, магнитных свойств твердых растворов перовскитов-мультиферроиков с различным характером распределения атомов по подрешетке перовскита, а также магнитных и магнитоэлектрических свойств шпинели MnCr_2S_4 .

Диссертация представляет собой чисто теоретическое исследование. Для решения поставленных в диссертации задач разработаны программы для

численного моделирования с использованием метода Монте-Карло фазовых переходов порядок-беспорядок в *B*-подрешетке перовскитов произвольного состава в рамках модели ненапряженных катион-анионных связей и для исследования магнитных фазовых переходов с использованием модели гейзенберговских спинов.

Диссертация состоит из введения, пяти разделов, заключения и списка литературы представленных на 132 страницах. Во **введении** описана актуальность, объекты исследований, цель работы, новизна, практическая значимость, научные положения, выносимые на защиту.

В **первом разделе** представлен литературный обзор мультиферроиков семейств перовскита и шпинели, а также высокоэнтропийных перовскитных оксидов. Особое место отведено ферриту висмута и твердым растворам на его основе, а также высокоэнтропийным перовскитам, в которых комбинация нескольких катионов приводит к перспективным функциональным свойствам.

Второй раздел описывает методику исследования атомного и магнитного упорядочения, а именно разработанные алгоритмы Монте-Карло для моделирования соответствующих фазовых переходов. Эти программы позволяют рассчитывать температуры фазовых переходов, типы возникающего упорядочения и другие характеристики.

Третий раздел посвящен численному исследованию атомного упорядочения в *B*-подрешетке низко-, средне- и высокоэнтропийных перовскитов. Моделирование охватывает большое количество как уже синтезированных, так и гипотетических составов. Рассчитаны температуры фазовых переходов «порядок-беспорядок», выявлены распределения катионов по упорядоченным подрешёткам *B'* и *B''*, формирующимся при 1:1 упорядочении типа «каменная соль». В качестве обобщения результатов предложена функциональная форма для оценки температуры упорядочения катионов в *B*-подрешетке высокоэнтропийных перовскитов произвольного состава.

Четвертый раздел посвящен исследованию магнитных фазовых переходов в твердых растворах $(1-x)\text{BiFeO}_3 - x\text{AFe}_{1/2}\text{M}_{1/2}\text{O}_3$ ($A = \text{Pb, Ba, Ca, Sr}$; $M = \text{Nb, Sb}$) методом Монте-Карло с использованием обменных констант, рассчитанных с помощью теории функционала плотности. Рассчитаны магнитные фазовые диаграммы температура – концентрация для твердых растворов с различным распределением катионов по *B*-подрешетке, определены возникающие магнитные состояния при низких температурах, зависимости магнитной восприимчивости от температуры.

Пятый раздел посвящен исследованию MnCr_2S_4 с треугольным упорядочением типа Яфета-Киттеля, которое, как показано в работе, индуцирует электрическую поляризацию, а кристалл становится

мультиферроиком. Сложная фазовая диаграмма $MnCr_2S_4$ исследована при помощи метода Монте-Карло с учетом одноионной магнитной анизотропии.

Научная новизна работы определяется полученными впервые оценками температуры и типа возникающего в высокоэнтропийных перовскитах атомного упорядочения, расчетом концентрационной эволюции магнитных свойств перспективных твердых растворов перовскитов-мультиферроиков. Особенно хотел бы выделить красивое объяснение магнитных, магнитоэлектрических и механических аномалий в шпинелях как следствие перехода от упорядочения типа Яфета-Киттеля к коллинеарной ориентации спинов в Mn-подсистеме шпинели. Полученные результаты полезны для практических поисков и дизайна новых функциональных материалов.

Достоверность и надёжность результатов и выводов обеспечивается корректным использованием современных подходов физики конденсированного состояния, таких как метод Монте-Карло и теория функционала плотности, их верификацией на более простых системах, а также сопоставлением полученных результатов с опубликованными в литературе экспериментальными данными.

Автореферат полностью отражает содержание диссертации и полученные научные результаты. Основные результаты диссертации 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.

Несмотря на несомненные достоинства работы, к диссертации можно сделать следующие замечания:

1. На с. 35 говорится, что при моделировании методом Монте-Карло используются обменные константы, расчет которых выполнялся с помощью DFT-модели. А на с. 43 утверждается, что ключевой для DFT-модели параметр ϵ_{xc} определяются методом Монте-Карло. Здесь требуется пояснение.

2. На с.70 упоминается вращение кислородных октаэдров как причина анизотропии или несоразмерной структуры, что не вполне точно, поскольку данная дисторсия отвечает за взаимодействие Дзялошинского-Мории.

3. В записи инварианта (5.1) у параметра порядка M , автор забыл указать индекс «A», тогда как в объяснении механизма поляризации ниже по тексту явно подразумевается только намагниченность в подсистеме A-ионов.

4. Работа написана очень аккуратно, но одну опечатку все же можно найти: с. 24 «четырёх».

Сформулированные замечания, однако, не затрагивают принципиальные выводы диссертационного исследования и не снижают его общую высокую оценку. По моему мнению, диссертационная работа «Атомное упорядочение, магнитные и магнитоэлектрические свойства оксидов и сульфидов со структурами перовскита и шпинели» выполнена А.В. Моцейко на высоком профессиональном уровне на актуальную тему физики конденсированного состояния, полностью соответствует требованиям пп. 2.1 – 2.4, которые предъявляются к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук действующего «Положения о присуждении ученых степеней в ФГАОУ ВО "Южный федеральный университет", утвержденного Приказом № 66-ОД от 29.03.2024, а ее автор, Моцейко Алексей Витальевич, заслуживает присуждения ему искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент

Пятаков Александр Павлович

доктор физ.-мат. наук

(специальность 01.04.11 Физика магнитных явлений),

профессор РАН,

профессор кафедры физики колебаний

физического факультета МГУ

Дата: 10 сентября 2025 г.

Согласен на обработку персональных данных.

Адрес: ФГОУ ВПО «Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова», 119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

Телефон: +7 (916) 522-05-87, e-mail: pyatakov@physics.msu.ru.

И.О. декана физического факультета МГУ

проф. В.В. Белокуров

