Отзыв руководителя

о магистерской диссертации студента кафедры Ядерно-физических методов исследования Физического факультета СПбГУ

Подчезерцева Станислава Юрьевича

**Дифракционные исследования кристаллической структуры сотообразных слоистых оксидов**

Диссертационная работа Подчезерцева С.Ю. посвящена исследованию малозаметных искажений кристаллической структуры новых слоистых оксидов щелочных и переходных металлов, представляющих собой квазидвумерные соединения с «сотовидной» сверхструктурой слоев. Данная работа является частью большого проекта, направленного на выявление микроскопической природы низкоразмерного магнетизма таких соединений. Попытки построить спиновые структуры магнитоупорядоченных материалов по данным нейтронной дифракции невозможны без полного, детального и досконального знания кристаллического строения объекта. Поэтому первым этапом изучения сложных оксидов являлось проведение при комнатной температуре высокоразрешающих дифракционных экспериментов с последующей математической обработкой полученных экспериментальных данных с целью расшифровки или уточнения кристаллической структуры материалов и ее тонких деталей. В представленной к защите работе, для исследования были выбраны два соединения, Na3Co2SbO6 и Li3Ni2SbO6, отличающиеся размером иона щелочного металла, и, соответственно, расстояниями между слоями, и природой иона переходного металла (Ян-Теллеровский или не ЯТ ионы). В результате точно решены кристаллические структуры этих новых слоистых квазидвумерных соединений с «сотовидной» сверхструктурой (пространственная группа, параметры элементарной ячейки, точные положения атомов и заселенности атомных позиций) с определением характеристик тонких ее фрагментов (длины связей и валентные углы в кислородных окружениях d-ионов, М-O, М-O-М, расстояния М-М, расстояния связанные с легкими элементами Li и Na).

Подчезерцев С.Ю. самостоятельно выполнил полный анализ всех полученных нейтронных и синхротронных экспериментальных данных. Конкретно, он провел комбинированную полнопрофильную обработку нейтронных и синхротронных дифракционных данных, что еще очень редко встречается в мировой практике. Основные научные результаты работы заключаются в том, что Подчезерцев С.Ю. установил, с требуемой высокой точностью, наличие искажений кислородных CoO6 октаэдров, связанное расщеплением электронных уровней в Na3Co2SbO6. Из анализа полученных длин связей и величин валентных углов показана возможность существования внутрислоевого слабого ферромагнитного обменного взаимодействия в обоих исследованных соединениях.

Для квалифицированного выполнения всех расчетов Подчезерцеву понадобилось освоить метод полнопрофильного анализа порошковых дифрактограмм и его программную реализацию в пакете FullProf\_Suite, последние разработки по анализу уширений дифракционных пиков при наличии анизотропных микроструктурных эффектов, алгоритм совершенно новой программы, Fault, позволяющей учесть влияние дефектов упаковки слоистых материалов на дифракционный профиль, пока, к сожалению, только в самых простых случаях, далеких от реальных.

Для успешного осуществления поставленных задач Подчезерцеву С.Ю. потребовалось досконально разобраться в тонкостях сложных экспериментальных дифракционных методик и их особенностей для тепловых нейтронов и довольно жесткого синхротронного рентгеновского излучения.

Хочу отметить, что часть результатов, представленные в диссертации Подчезерцева С.Ю., отмечена Ученым Советом ФГБУ ПИЯФ в ряду важнейших достижений института в 2015 г. и подготовлена к публикации в сборнике «Основные результаты научной деятельности ПИЯФ 2015» в виде отдельной статьи.

Считаю, что работа студента Подчезерцева Станислава Юрьевича заслуживает оценки «отлично», а он сам – присуждения степени магистра по направлению 011200 Физика.

Также считаю необходимым продолжение начатого исследования в двух направлениях, проведение аналогичного анализа для других родственных соединений со слоистой кристаллической структурой, содержащих легкие щелочные элементы и d-металлы и направлении определения и изучения спиновых конфигураций составов, исследование которых начато в данной диссертации. Поэтому я рекомендую Подчезерцева С.Ю. для поступления в аспирантуру СПбГУ.

Руководитель Отделения нейтронных исследований

ФГБУ Петербургский институт ядерной физики

им. Б.П. Константинова

Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт",

профессор кафедры Ядерно-физических методов исследования СПбГУ

доктор физ.-мат. наук А.И. Курбаков

«19» мая 2016 г.