

ОТЗЫВ

на автореферат кандидатской диссертации СМИРНОВОЙ ЕКАТЕРИНЫ СЕРГЕЕВНЫ «Структурные особенности монокристаллов мультиферроиков $R_{1-x}Bi_xFe_3(BO_3)_4$, $R=Gd, Y, Ho$, в интервале температур 11-500К», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.18 - «Кристаллография, физика кристаллов»

Целью диссертационной работы Е.С. Смирновой было установление особенностей строения и закономерных связей между химическим составом и атомной структурой монокристаллов редкоземельных ферроборатов $RFe_3(BO_3)_4$, $R=Gd, Y, Ho$ при изменении температуры. Тема диссертации соответствует заявленной специальности с 01.04.18 - «Кристаллография, физика кристаллов».

Цель работы достигнута. Впервые методом рентгеноструктурного анализа на монокристаллах выполнено исследование структуры редкоземельных ферроборатов $(Gd_{0.95}Bi_{0.05})Fe_3(BO_3)_4$, $(Y_{0.95}Bi_{0.05})Fe_3(BO_3)_4$, $(Ho_{0.96}Bi_{0.04})Fe_3(BO_3)_4$ в интервале температур 11 – 500 К.

Впервые экспериментально установлено вхождение примесных атомов Bi в структуру монокристаллов $RFe_3(BO_3)_4$, $R = Gd, Y, Ho$, выращенных с использованием $Bi_2Mo_3O_{12}$ в качестве растворителя. Примесь Bi частично замещает кристаллографическую позицию редкоземельного элемента. Впервые на основе рентгеноструктурных данных для кристаллов $(Y_{0.95}Bi_{0.05})Fe_3(BO_3)_4$, $(Ho_{0.96}Bi_{0.04})Fe_3(BO_3)_4$ вычислены характеристические температуры Дебая и Эйнштейна.

Методом рентгеноструктурного анализа на монокристаллах подтверждено существование структурного фазового перехода, уточнены значения температур и характер перехода для кристаллов $(Gd_{0.95}Bi_{0.05})Fe_3(BO_3)_4$, $(Y_{0.95}Bi_{0.05})Fe_3(BO_3)_4$, $(Ho_{0.96}Bi_{0.04})Fe_3(BO_3)_4$. Проанализированы изменения характерных расстояний, локального окружения атомов, параметров атомного смещения монокристаллов редкоземельных ферроборатов $(Gd_{0.95}Bi_{0.05})Fe_3(BO_3)_4$, $(Y_{0.95}Bi_{0.05})Fe_3(BO_3)_4$, $(Ho_{0.96}Bi_{0.04})Fe_3(BO_3)_4$ под действием температуры.

Автореферат диссертации содержит последовательное изложение проделанной работы, изложены литературные данные по исследованию структуры редкоземельных ферроборатов и структурного фазового перехода, который существует для кристаллов $RFe_3(BO_3)_4$ ($R = Eu - Er, Y$) при изменении температуры. Отмечено, что исследования структуры, приведенные в литературе, проводились на образцах, полученных в присутствии разных растворителей без анализа влияния возможных примесей. Однако значительная часть современных исследований физических свойств $RFe_3(BO_3)_4$ проводится с использованием образцов, выращенных в присутствии растворителя $Bi_2Mo_3O_{12}$. Описаны экспериментальные установки и методы исследований.

В третьей главе приведены результаты изучения химического состава, зависимостей параметров элементарной ячейки от температуры и особенностей строения в широком диапазоне температур для всех трех монокристаллов. Показаны температурные зависимости параметров структуры. Отмечено, что кристаллы не монодоменны. Показано поведение структуры кристаллов при понижении температуры.

Данная работа вносит заметный вклад в исследование методами многотемпературных монокристаллических рентгеноструктурных измерений в сочетании с другими экспериментальными методами, в первую очередь, магниточувствительными, взаимосвязи

кристаллической структуры и физических свойств мультиферроидных соединений. Результаты определения и уточнения кристаллических структур депонированы в международную базу неорганических кристаллических структур ICSD и Кембриджскую структурную базу данных CSD для использования в качестве справочного материала.

Установлено, что в высокотемпературной фазе $T > T_{str}$ параметры a , b , c слабо уменьшаются с понижением температуры. Уменьшение параметра c выражено сильнее, и именно оно в большей степени отвечает за сокращение объема при высоких температурах.

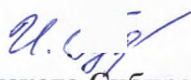
Во всех исследованных кристаллах обнаружен структурный фазовый переход, которому отвечает скачок параметров a , b . В $Gd_{0.95}Bi_{0.05}Fe_3(BO_3)_4$ скачок наблюдался при $T_{str} \approx 155$ К, в $Ho_{0.96}Bi_{0.04}Fe_3(BO_3)_4$ при 365–370 К, а в $Y_{0.95}Bi_{0.05}Fe_3(BO_3)_4$ в диапазоне 360–380 К. Значение температуры структурного фазового перехода, уточненное по результатам анализа систематических погасаний, составило $T_{str} \approx 370$ К для соединения с $R = Y$ и $T_{str} \approx 365$ К для $R = Ho$. Фазовый переход в $Gd_{0.95}Bi_{0.05}Fe_3(BO_3)_4$ и $Ho_{0.96}Bi_{0.04}Fe_3(BO_3)_4$ достаточно резкий, а в $Y_{0.95}Bi_{0.05}Fe_3(BO_3)_4$ размыт в диапазоне 350–380 К.

Установлено, что структурный фазовый переход в монокристаллах $Gd_{0.95}Bi_{0.05}Fe_3(BO_3)_4$, $Y_{0.95}Bi_{0.05}Fe_3(BO_3)_4$ и $Ho_{0.96}Bi_{0.04}Fe_3(BO_3)_4$ обусловлен значительными смещениями бора ($B2$, $B3$) и кислорода ($O1$, $O2$).

В качестве замечания можно отметить, что не все буквенные сокращения в тексте автореферата расшифрованы при первом появлении. Кроме того, на рис. 3 элементарная ячейка выделена не черными, как написано в пояснении, а светло-серыми линиями, что затрудняет понимание. На рисунке 3 вероятно в пояснении ошибочно указано, что в скобках находятся названия атомов в высокотемпературной фазе, хотя на графике стоят отметки о низкотемпературной фазе. В пояснении к рисунку 6 одновременно использовано два обозначения низкой температуры: LT и HT. Однако, данные замечания не умаляют важности выполненной работы.

Работы Екатерины Сергеевны Смирновой опубликованы в престижных российских и зарубежных научных журналах и представлены на российских и международных конференциях. Актуальность тематики и надежность примененных методов, оригинальность и научная новизна дают все основания для утверждения, что диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Екатерина Сергеевна Смирнова безусловно заслуживает присуждения степени кандидата химических наук по специальности 01.04.18 - «Кристаллография, физика кристаллов».

Старший научный сотрудник Лаборатории Радиоспектроскопии и Спиновой Электроники

Кандидат физ.-матем. наук  /Ирина Анатольевна Гудим/
Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук - обособленного подразделения ФИЦ КНЦ СО РАН (660036, Красноярский край, г. Красноярск, ул. Академгородок, 50, стр. 38). М.т. +79080136185

Я, Гудим Ирина Анатольевна, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.

Подпись <u>Гудим И.А.</u>	заверяю
Ученый секретарь <u>К.Ф.-И.И.</u>	
Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН (ИФ СО РАН)	
« 16 » сентября 20 20 г.	

