

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук **Мацнева Михаила Евгеньевича** на тему: «Обработка и анализ мессбауэровских спектров со сложной сверхтонкой магнитной и электрической структурой» по специальности 1.3.8 – «Физика конденсированного состояния».

Мёссбауэровская спектроскопия как мощный инструмент неразрушающего исследования электронной, магнитной и кристаллической структуры вещества в настоящее время применяется практически во всех областях естественных наук от физики до биологии. Развитие науки и технологий приводит к тому, что объектами исследований становятся все более сложные и многокомпонентные вещества, обладающие сложными химическими связями и/или типом магнитного порядка, испытывающие различные превращения при изменении внешних условий. Основной проблемой при использовании метода мёссбауэровской спектроскопии в современном исследовании является корректная обработка и анализ экспериментальных спектров на основе модельных представлений с использованием имеющейся априорной информации об объекте исследования. Решению этой актуальной проблемы, преодолению возникающих у исследователей сложностей при анализе спектров соединений со сложной структурой и посвящена диссертационная работа М.Е. Мацнева.

Одной из целей диссертационной работы было создание программы обработки и анализа сложных мёссбауэровских спектров. Созданная в результате программа SpectrRelax позволяет проводить обработку мёссбауэровских спектров для практически всех задач, встречающихся в работе исследователя, и превосходит по своим возможностям все мировые аналоги. В программе реализованы возможности безмодельной обработки спектра, автоматической калибровки спектрометра по калибровочному спектру, повышения разрешения спектра, подавления шума и устранения эффекта толщины образца, применения различных форм огибающей и базовой линий спектра, обработки спектра методом восстановления распределения сверхтонких параметров с учетом их возможной линейной корреляции. Созданная в результате диссертационной работы программа позволяет применять различные модели парциальных спектров - не только традиционные синглет, дублет и простой зеемановский секстет (для случая, когда сверхтонкое магнитное взаимодействие резонансного ядра во много раз сильнее электрического квадрупольного взаимодействия), но и секстет со смещенными линиями (для случая сильного квадрупольного взаимодействия), октет Гамильтона для комбинированного сверхтонкого взаимодействия, релаксационные модели, модели пространственных спин-

модулированных структур. Также в диссертации предлагается способ создания новых пользовательских моделей парциальных спектров без изменения программы.

Безусловным преимуществом созданной М.Е. Мацневым программы SpectrRelax над всеми ранее разработанными программами обработки мёссбауэровских спектров является возможность создания пользователем новых варьируемых переменных и записи выражений с использованием варьируемых параметров, физических констант, алгебраических операций и элементарных функций, а также возможность налагать прямые связи между варьируемыми параметрами и/или выражениями. Стоит отметить еще одно отличие SpectrRelax от других программ обработки спектров — это реализация в программе вычисления и отображения ортонормированного базиса и сингулярных значений из процедуры сингулярного разложения (SVD), что позволяет выявлять корреляции варьируемых параметров модели между собой и, таким образом, обнаруживать некорректность применяемой модели обработки. Это дает возможность существенно повысить достоверность получаемых при анализе мёссбауэровских спектров результатов.

В автореферате приведены примеры обработки и анализа мёссбауэровских спектров со сложной сверхтонкой структурой. Детально исследованы пространственная спин-модулированная структура и сверхтонкие взаимодействия в ортоферрите висмута  $\text{BiFeO}_3$ . Определен параметр ангармонизма спин-модулированной структуры  $\text{BiFeO}_3$ , измерена его температурная зависимость во всей области существования магнитного упорядочения, определен тип магнитной анизотропии и построена температурная зависимость эффективной константы магнитной анизотропии, измерены температурные зависимости изотропных и анизотропных сверхтонких полей на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  в  $\text{BiFeO}_3$ , оценена температура Дебая. Ранее столь детальные исследования спин-модулированных структур мёссбауэровской спектроскопией были невозможны из-за отсутствия инструмента для расшифровки спектров с такой сложной сверхтонкой структурой.

Отметим несколько не совсем ясных моментов:

1. В автореферате на рис.1 показана форма ангармонической спиновой волны в виде зависимости  $\sin(\vartheta(x))$ . Визуально форма волны неотличима от гармонической. Насколько значимо это отличие даже при большом значении параметра ангармонизма? Для демонстрации отличия наблюдаемой волны от гармонической имело бы смысл на рисунке продемонстрировать гармоническую функцию.
2. Вызывает вопрос увеличение абсолютного значения эффективной константы магнитной анизотропии  $\text{BiFeO}_3$ , определенной по данным мёссбауэровской спектроскопии, при приближении к температуре Нееля. Учитывалось ли температурное расширение и

соответствующее изменение параметра решетки при расчете обменной жесткости для построения температурной зависимости константы магнитной анизотропии?

Перечисленные выше вопросы ни в коей мере не снижают ценность и практическую значимость работы М.Е. Мацнева, которая, безусловно, служит большим шагом в развитии мёссбауэровских методов исследования вещества в конденсированном состоянии. Созданная в результате работы программа SpectrRelax для обработки мёссбауэровских спектров со сложной сверхтонкой структурой успешно применяется во множестве исследовательских лабораторий по всей России и за рубежом. Опыт ее использования в нашем институте показал, что реализованные в ней методы и модели существенно расширяют экспериментальные возможности мёссбауэровской спектроскопии. Полученные в диссертационной работе экспериментальные данные о мультиферроике  $\text{BiFeO}_3$  вносят значимый вклад в физические представления о спин-модулированных структурах и сверхтонких взаимодействиях в мультиферроиках и могут служить основой для дальнейших разработок в области физики твердого тела.

Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 1.3.8 – «Физика конденсированного состояния» (по физико-математическим наукам), удовлетворяет критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова. Соискатель Мацнев Михаил Евгеньевич, бесспорно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – «Физика конденсированного состояния».

Директор Института физики металлов им. М.Н. Михеева Уральского отделения  
Российской академии наук  
академик РАН, д.ф.-м.н., профессор  
Мушников Николай Варфоломеевич

Научный сотрудник Института физики металлов им. М.Н. Михеева Уральского отделения  
Российской академии наук  
Наумов Сергей Павлович

Адрес места работы: 620108, г. Екатеринбург, ул. С.Ковалевской, 18  
тел.: 8-343-374-02-30  
e-mail: [mushnikov@imp.uran.ru](mailto:mushnikov@imp.uran.ru), [naumov\\_sp@imp.uran.ru](mailto:naumov_sp@imp.uran.ru)

Подпись со  
Ученый сек  
23.04.2024 г

Г Мушникова Н.В. и Наумова С.П. удостоверяю

И.Ю. Арапова