

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Мазуренко Владимира Владимировича «Влияние гибридизации атомных состояний, электронных корреляций и спин-орбитальной связи на магнитные свойства соединений переходных металлов», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Исследование магнитных свойств новых материалов является активно развивающейся областью теории конденсированного состояния. Возможность правильного описания их магнитных свойств существенно зависит от правильного предсказания магнитных взаимодействий в рассматриваемых веществах. Существующие методы вычисления обменных магнитных взаимодействий позволяют предсказывать доминирующий тип магнитного упорядочения. В то же время, имеющиеся методы не всегда отвечают требованиям адекватного учета межэлектронных корреляций, температуры, анизотропии, гибридизации и т.д. Возможность получить более детальную информацию о структуре обменных взаимодействий в исследуемых веществах в ряде случаев является определяющей в понимании их физических свойств.

Диссертационная работа Мазуренко В. В. посвящена теоретическому исследованию новых методов вычисления обменных магнитных взаимодействий и их применению к ряду актуальных веществ: $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, La_2CuO_4 , LiCu_2O_2 , $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$, $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, а также к рассмотрению свойств атомов кобальта, адсорбированных на платиновой поверхности. Проведенное автором рассмотрение позволяет объяснить наблюдаемые особенности физических свойств каждой из систем, а также детально исследовать характер обменных взаимодействий в указанных веществах.

Основное внимание в диссертации Мазуренко В.В. уделяется разработке и применению новых методов расчета обменных взаимодействий. Так, автором работы совместно с соавторами была предложена схема расчета анизотропных обменных взаимодействий между магнитными моментами в соединениях переходных металлов. Указанная схема позволяет получить информацию о взаимодействиях Дзялошинского-Мории в различных веществах. Кроме того, автором предложен метод учета гибридизации металл-лиганд и динамических кулоновских корреляций при расчете изотропных обменных взаимодействий. При этом информация о динамических корреляциях извлекается из частотной зависимости собственной энергии, полученной в рамках динамической теории среднего поля.

В практической части работы автор рассматривает значительное количество актуальных соединений переходных металлов, исследование которых представляется важным для развития физики конденсированного состояния. В частности, автором рассмотрен механизм магнитного обмена в гематите железа. Проведенная оценка анизотропных взаимодействий Дзялошинского-Мории в этом соединении позволила объяснить наблюдаемые свойства магнитной структуры. Аналогичные вычисления для недопированного соединения La_2CuO_4 , являющегося основой высокотемпературных сверхпроводников, позволили также вычислить компоненты взаимодействия Дзялошинского-Мории в этом веществе, что является важным как для понимания его магнитных свойств, так и для общего развития представлений о низкоразмерном магнетизме коррелированных систем.

Для низкоразмерных соединений LiCu_2O_2 и $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ автором вычислены обменные магнитные взаимодействия в рамках разработанного им метода учета гибридизация металл-лиганд. Полученные автором результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными по указанным веществам. Для описания свойств соединения $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ автором были учтены динамические кулоновские корреляции, приводящие к существенной перенормировке квазичастичных свойств. Указанные корреляции также приводят к существенному подавлению момента насыщения, результаты вычисления которого находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными. Правильный учет динамических кулоновских корреляций позволил также автору работы описать магнитные свойства и проводимость, связанные с атомами кобальта, адсорбированными на поверхности платины.

Таким образом, автором с одной стороны разработан ряд важных теоретических методов, позволяющих исследовать магнитные взаимодействия с учетом ряда важных физических факторов, а с другой стороны исследован достаточно широкий круг магнитных систем, в которых применение разработанных методов позволило получить новые важные результаты относительно их магнитных и электронных свойств. В целом, диссертационная работа выполнена на высоком теоретическом уровне и характеризуется применением новейших численных методов и явной направленностью на решение задач, связанных с актуальными проблемами описания реальных сильнокоррелированных систем. В работе сделан важный шаг в направлении развития методов вычисления обменных взаимодействий и их применения к рассмотренным системам.

Автореферат дает достаточно полное представление о содержании диссертации. Диссертационная работа Мазуренко В. В. отвечает требованиям ВАК России,

предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор несомненно заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Катанин Андрей Александрович,

Kat

доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории теоретической физики Института физики металлов Уральского отделения Российской академии наук,

620990, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18, тел. (343) 378-35-70, E-mail: katanin@mail.ru



Подпись Катанин
заверяю
Руководитель общего отдела
Лямина Н.Ф.Лямина
"09" 09 2014 г.