

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.

Диссертация Мазуренко В.В. посвящена решению ряда исключительно актуальных задач современной физики конденсированного состояния, связанных с учетом спин-орбитальной связи, гибридизации атомных состояний и динамических электронных корреляций при моделировании магнитных свойств соединений переходных металлов. При этом автором внесен существенный вклад в разработку и совершенствование первопринципных численных подходов. Указанные подходы позволили выполнить исследование электронных и магнитных свойств многих важных классов сильнокоррелированных систем, включая антиферромагнетики со слабым ферромагнетизмом, низкоразмерные квантовые системы, коррелированные зонные изоляторы, коррелированные металлы и поверхностные наносистемы.

Среди основных достижений диссертационной работы Мазуренко В.В. можно отметить следующее:

- разработка первопринципного метода расчета анизотропных обменных взаимодействий в соединениях переходных металлов. Метод основан на теореме локальных сил, реализован в компьютерных кодах и позволяет вычислять такие параметры магнитного гамильтониана как магнитный вращающий момент на узле, компоненты вектора Дзялошинского-Мории, элементы тензора симметричного анизотропного обменного взаимодействия;
- разработка метода расчета обменных взаимодействий с учётом динамических кулоновских корреляций в металлических магнитных системах. Показано, что микроскопические механизмы, отвечающие за перенормировку электронного спектра, также приводят к изменению масштаба магнитных взаимодействий;

Вх. № 05 - 19/1 - 101
от 31.07.14 г.

- построение магнитных моделей для антиферромагнетиков Fe_2O_3 и La_2CuO_4 . Микроскопический анализ рассчитанных параметров анизотропных взаимодействий позволил сделать вывод о том, что в гематите направление отклонения магнитного момента атома железа от антиферромагнитного порядка определяется его взаимодействиями с магнитными моментами атомов, принадлежащими третьей и четвертой координационным сферам. Выполненное моделирование состояния слабого ферромагнетизма позволило корректно воспроизвести симметрию и величину отклонения магнитного момента;- моделирование электронной и магнитной структуры низкоразмерных оксидов меди, LiCu_2O_2 и $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$. Показано, что эффекты гибридизации между состояниями меди и кислорода не только определяют дальнедействующий характер обменных констант в системе, но и отвечают за подавление антиферромагнитного взаимодействия между ближайшими атомами меди.

В целом, диссертационная работа Мазуренко В.В. производит очень благоприятное впечатление. Автореферат написан простым и понятным языком. Автор активно взаимодействует с экспериментаторами, что позволяет ему находиться в русле наиболее актуальных направлений физики конденсированного состояния.

Васильев Александр Николаевич, профессор, заведующий кафедрой физики низких температур и сверхпроводимости, заведующий отделением физики твердого тела физического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, Ленинские горы 1, 119991 Москва. Тел. 8 495 932 92 17, e-mail: vasil@lt.phys.msu.ru

17/04/14

Отзыв профессора Васильева А.Н. заверяю.

Ученый Секретарь Ученого Совета физического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, профессор



Караваяев В.А.
23.07.2014г.