

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 актуальной задаче теоретического исследования магнитных взаимодействий в материалах с сильными кулоновскими корреляциями. В работе предложена и реализована в программных кодах оригинальная методика численного моделирования обменных интегралов с учетом спин-орбитального взаимодействия, гибридизации атомных состояний и кулоновских корреляций. Выполненное методическое исследование находится в русле классических работ А.И. Лихтенштейна и М.И. Кацнельсона, в которых были заложены основы первопринципного моделирования магнитных взаимодействий через отклик системы на бесконечно малые повороты магнитных моментов. При этом подходы, изложенные в диссертации Мазуренко В.В., представляют самостоятельную методическую ценность поскольку: позволяют учесть особенности электронной структуры и магнитного упорядочения при расчете взаимодействия Дзялошинского-Мории; устанавливают связь между составом магнитных функций Ванье и магнитными взаимодействиями в исследуемой системе; показывают перенормировку обменных взаимодействий в коррелированных металлах.


Разработанные численные методы применены к решению ряда фундаментальных задач магнитного строения различных классов материалов на основе переходных металлов: от антиферромагнетиков со слабым ферромагнетизмом до наносистем. Среди результатов, которые описаны в автореферате, особенный интерес представляют следующие. Полученные автором магнитные модели для оксидов меди с сильной ковалентной связью позволяют раскрыть механизмы образования сложных спектров спиновых возбуждений, наблюдаемые в экспериментах. Анализ зонной структуры соединения FeSi в рамках первопринципных подходов позволил построить адекватную электронную модель, решение которой при помощи многочастичного метода теории динамического среднего поля (DMFT) воспроизводит экспериментальные спектры проводимости и магнитной восприимчивости. При исследовании наносистемы Co/Pt(111) определена сильная орбитальная поляризация спектров электронных и магнитных возбуждений, и предсказана возможность измерения отклика отдельных $3d$ состояний атома кобальта в экспериментах по сканирующей туннельной микроскопии.

Результаты работы могут быть использованы в ведущих экспериментальных и теоретических лабораториях по изучению магнитных свойств соединений с сильными корреляциями.

По представленному автореферату имеется несколько замечаний. Автором разработан и реализован в компьютерных кодах первопринципный метод расчета анизотропных обменных взаимодействий между магнитными моментами в соединениях переходных металлов. Однако из автореферата не понятно, реализованы ли коды как независимый пакет компьютерных программ, или они интегрированы в какой-либо из известных компьютерных кодов. Кроме того, в пятой главе я не нашел детального объяснения, каким образом моделировались эффекты беспорядка при расчете системы (Fe-Co)Si в рамках теории динамического среднего поля. Однако данные замечания не меняют общей положительной оценки представленного автореферата.

Работа выполнена на современном высоком уровне, базируется на достаточном числе публикаций в престижных физических журналах и удовлетворяет требованиям ВАК РФ, предъявляемым к докторским диссертациям. Считаю, что автор работы, Мазуренко Владимир Владимирович, достоин присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.


Доктор физико-математических наук, профессор,
Руководитель лаборатории моделирования
и разработки новых материалов
ФГАОУ ВПО «Национальный исследовательский
технологический университет «МИСиС»,
119991, г. Москва, Ленинский проспект 4,
e-mail: iaabrikos@gmail.com, телефон +79164026266.


Абрикосов Игорь Анатольевич

Дата: 17 сентября 2014 г.

Подпись И. А. Абрикосова подтверждаю
Проректор НИТУ «МИСиС»




И. М. Исаев