

# ОТЗЫВ

На автореферат диссертации Николаева Сергея Алексеевича «Первопринципное моделирование динамики решетки, ферроэлектрической поляризации и орбитального магнетизма в сложных оксидах марганца», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа посвящена применению неэмпирических методов для исследования сложных оксидов марганца, которые обладают необычными электрическими и магнитными свойствами. Выбор объектов исследования и постановка задачи представляются чрезвычайно актуальными.

Автору удалось получить важные результаты.

В первой части работы на основе первопринципных расчетов исследовано влияние магнитного упорядочения в  $\text{YMnO}_3$  на фононный спектр. Выяснена важность учета электронных корреляций при расчете фононных спектров.

Во второй части работы на основе теории возмущений исследована связь магнитных конфигураций с электрической поляризацией кристалла, что открывает возможность понимания механизмов влияния магнитного поля на электрическую поляризацию в мультиферроиках.

В последней части исследовано распределение орбитальных моментов в  $\text{LaMnO}_3$ .

В качестве замечания отмечаю краткость изложения основных подходов в автореферате. Например, связь между спиновыми конфигурациями и фононами, на мой взгляд, должна включать либо спин-орбитальное взаимодействие, либо орбитально зависимое обменное взаимодействие. Уточнялось ли это в вычислительном пакете VASP, которым пользовался автор, из автореферата не понятно.

Работа в целом производит хорошее впечатление. Основные результаты опубликованы в ведущих научных изданиях.

Я считаю, что диссертация Николаева С.А. удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а автор заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Никифоров Анатолий Елеферьевич

д. ф.-м.н., профессор кафедры компьютерной физики ИБ

e-mail: anatoliy.nikiforov@urfu.ru, т. (343) 2616780

ФГАОУ ВПО Уральский федеральный университет им. первого президента России

Б.Н.Ельцина. 620002 г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

2 05.02.2015

подпись А.Е. Никифорова заверяю

