

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Николаева Сергея Алексеевича
**«ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ РЕШЕТКИ,
ФЕРРОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ И ОРБИТАЛЬНОГО
МАГНЕТИЗМА В СЛОЖНЫХ ОКСИДАХ МАРГАНЦА»**, представленной
к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Развитие многих высокотехнологичных отраслей промышленности, в частности, информационных технологий, основанных на применении спинтроники и магноники, стимулирует интерес к исследованиям многофункциональных материалов, для которых характерно наличие взаимосвязи на микроскопическом уровне спиновых, орбитальных и решеточных степеней свободы. Особое место среди перспективных многофункциональных материалов занимают редкоземельные манганиты, многие из которых демонстрируют гигантское магнитосопротивление, связь структурных и магнитных свойств, магнитоэлектрический эффект и наличие ферроэлектрической поляризации. Можно констатировать, что работа, направленная на теоретическое исследование особенностей динамики кристаллической решетки, ферроэлектрических свойств и орбитального магнетизма в сложных оксидах марганца, является вполне актуальной.

В работе проведены расчеты фононных спектров орторомбического YMnO_3 при различных вариантах реализации магнитного порядка. Установлена и теоретически исследована зависимость этих спектров от вида магнитного порядка. В рамках модели двойного обмена с использованием стандартных приближений, теоретически исследован эффект ферроэлектрической поляризации в сложных оксидах марганца. Для целого ряда орторомбических манганитов представлена физическая интерпретация процессов, приводящих к ферроэлектрической активности в этих соединениях. С использованием современной теории орбитального магнетизма, разработан и реализован метод расчета орбитальных магнитных моментов в сложных оксидах. Показано, что поправки к стандартному выражению для орбитального момента, могут принимать достаточно большие значения, в некоторых высокосимметричных точках зоны Бриллюэна. Полученный результат отражает важность учета нелокальных вкладов в орбитальный магнитный момент.

Вх. №05-19/1-564
от 10.02.15г.

Особенно хотелось бы выделить несколько важных результатов, полученных автором на основе расчетов атомной динамики в орторомбическом YMnO_3 . В частности, впервые для этой системы показано влияние магнитного упорядочения на спектр тепловых колебаний. Кроме того, для полярной низкотемпературной фазы с пространственной группой $R2_1nm$, установлена важность расчета неаналитических поправок к динамической матрице, учет которых объясняет расщепление продольных и поперечных оптических фононных ветвей в центре зоны Бриллюэна.

Достоверность результатов, полученных в ходе выполнения работы, не вызывает сомнений. Выводы работы вполне обоснованы и подтверждаются как собственными результатами автора, так и литературными данными. Основные результаты работы доложены на отечественных и международных конференциях и опубликованы в ведущих научных журналах, рекомендованных ВАК, что подтверждает научную ценность и значимость представленных результатов..

Работа не свободна от недостатков и по ней имеются замечания. Автореферат написан с большим количеством стилистических ошибок и смысловых погрешностей. Приведу только несколько примеров.

1. В первом абзаце на стр.3 написано: «Данное направление имеет большие перспективы в информационных технологиях, которые стремятся к усовершенствованию ... полупроводниковых устройств...». Технологии стремятся к усовершенствованию устройств?
2. На стр. 4, второй абзац, написано: «...механизмы возникновения макроскопической поляризации ... во многих рассматриваемых системах до конца не изучены и не имеют единой точки зрения.». Жаль, что механизмы не смогли выработать единую точку зрения!
3. Стр.10, второй абзац, написано: «Величина пика I также находится в хорошем согласии с экспериментальным значением 495 см^{-1} .». Приведенное экспериментальное значение энергии относится не к величине пика, а к его положению на оси энергий!
4. На рис.1 не указано, в каких единицах по вертикальной оси отложена плотность фононных состояний.

И таких перлов в автореферате много. Все это затрудняет понимание смысла изложенного материала и оставляет впечатление небрежной подготовки рукописи.

Указанные замечания относятся к способу изложения материалов работы в автореферате, не затрагивают основного содержания работы и не снижают общую

положительную оценку диссертации. Насколько можно судить по автореферату, представленная к защите диссертация является законченным научным исследованием, выполненным на высоком уровне в рамках актуального направления. Полученные в работе результаты служат целям создания научной базы новых технологий.

Автореферат диссертационной работы соответствует пункту 9 Положения о присуждении ученых степеней, а **Николаев Сергей Алексеевич** заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Паршин Петр Петрович

д-р физ.-мат. наук

Ведущий научный сотрудник Центра фундаментальных исследований

Национальный Исследовательский Центр «Курчатовский Институт»

123182 Россия, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1

8 499 1969190

Parshin_PP@nrcki.ru

23.01.2015г.

Подпись П.П. Паршина заверяю:

Заместитель директора по научной работе - главный ученый секретарь НИЦ «Курчатовский институт»

Виктор Игоревич Ильгисонис

