

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 Николаева С.А. посвящена теоретическому исследованию влияния магнитного порядка на динамику решетки, механизмов возникновения ферроэлектрических свойств и орбитального магнетизма в манганитах на основе первопринципных методов расчета электронной структуры, приближения Хартри-Фока для эффективной модели Хаббарда, а также современных теорий электрической поляризации и орбитальной намагниченности.

В представленной работе получен ряд важных результатов. Показано, что образование двух высокочастотных пиков в низкотемпературной фазе YMnO_3 связано с установлением антиферромагнитного порядка E-типа, что подтверждает экспериментальные данные. Полученные данные в рамках модели двойного обмена для электрической поляризации в сложных оксидах марганца дают простую физическую интерпретацию механизмов возникновения ферроэлектрических свойств. Показано, что ферроэлектрические свойства в семействе орторомбических манганитов являются результатом искажения пространственно однородной конфигурации спиновой спирали и образованием орбитального упорядочения антиферро-типа. Другой важный результат данного исследования следует из теории возмущений, на основе которой показано, что электрическая поляризация в модели двойного обмена определяется корреляционными функциями между направлениями магнитных моментов. Наконец, представлен метод расчета орбитальных магнитных моментов на основе современной теории орбитальной намагниченности и приближения Хартри-Фока и его апробация на примере LaMnO_3 .

Результаты диссертационной работы опубликованы в высокорейтинговых журналах, что в полной мере подтверждает актуальность и высокий научный уровень проведенных исследований.

По автореферату возникли следующие вопросы:

1. Из каких соображений выбирались значения параметра кулоновского взаимодействия при расчете колебательных спектров YMnO_3 ?
2. В главе, посвященной расчету орбитальных магнитных моментов, делается вывод о потенциальной значимости учета эффектов пространственной нелокальности. В

рамках каких схем это можно было бы сделать?

Диссертационная работа С.А. Николаева представляет собой законченное исследование. Автореферат диссертации отвечает требованиям пункта 9 Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Считаю, что Николаев Сергей Алексеевич достоин присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

26 января 2015 г.


Алексей Николаевич Рубцов

д-р физ.-мат. наук, проф.

Кафедра квантовой электроники физического факультета

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

119991, Москва, Ленинские горы д. 1, стр. 2

(495) 9393669

(916) :

ar@ct-qmc.org

Подпись А.Н. Рубцова заверяю:



