

## 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

Сложные оксиды марганца находятся в центре внимания многих исследований вследствие разнообразия физических свойств, наблюдаемых в данных материалах. Поэтому теоретическое описание и понимание возникновения тех или иных свойств в манганитах имеет важное значение, также как и объяснение и интерпретация экспериментально полученных данных. С этой точки зрения тема диссертации Николаева С.А. является актуальной.

Данная диссертационная работа отражает результаты теоретического исследования влияния магнитного порядка на динамику решетки, механизмов возникновения электрической поляризации и методики расчета орбитального магнетизма в манганитах. Автор проводит исследование с использованием современных методов физики конденсированного состояния, таких как теория функционала плотности, приближение Хартри-Фока для эффективной модели Хаббарда, современные варианты теории электрической поляризации и орбитальной намагниченности.

Следует отметить, что в данной работе выполнено первопринципное исследование колебательных спектров орторомбической фазы  $\text{YMnO}_3$  в зависимости от магнитного порядка, представлен анализ ферроэлектрических свойств в манганитах на основе модели двойного обмена, а также предложен метод расчета орбитальных магнитных моментов на основе современной теории орбитальной намагниченности.

Среди наиболее важных результатов работы стоит отметить описание механизмов возникновения электрической поляризации и ее управления посредством магнитного поля или изменения магнитной конфигурации в системе. Предложенный в работе метод расчета орбитальных магнитных моментов является первой апробацией современной теории орбитальной намагниченности в рамках эффективных моделей для реальных систем и может лечь в основу дальнейшей ее реализации в первопринципных расчетах. Следует также отметить научную значимость исследований, направленных на изучение связи магнитных и колебательных степеней свободы в сильнокоррелированных материалах.

Имеются следующие вопросы по автореферату и диссертации:

1. Почему в второй главе не представлены результаты структурной оптимизации для

Вх. № 05 - 19/1 - 540  
от 24.01.15г.

орторомбического УМпОЗ и их сравнение с экспериментальными данными?

2. При расчете орбитального магнитного момента используется метод ковариантной производной. Чем обусловлен данный выбор?

Результаты диссертации представлены публикациями в ведущих зарубежных изданиях, а сама работа является завершенным научно-квалификационным исследованием, выполненным на современном научном уровне.

Диссертационная работа Николаева С.А. удовлетворяет требованиям пункта 9 Положения о присуждении ученых степеней, и автор, безусловно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Гельчинский Борис Рафаилович

Доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией порошковых, композиционных и наноматериалов,  
Федеральное государственное учреждение науки Институт металлургии  
Уральского отделения Российской академии наук.  
620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101.  
Тел./факс: 343 267 8914.  
e-mail: brg47@list.ru  
<http://www.imet-uran.ru>

Подпись заведующего лабораторией, д.ф.н. Гельчинского Б.Р. удостоверяю,  
Ученый секретарь ИМЕТ УрО РАН

Пономарёв В.И.

2.01.2015

