

ОТЗЫВ

об автореферате 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 первопринципному исследованию колебательных спектров с учетом влияния магнитного порядка, ферроэлектрических свойств и орбитального магнетизма в семействе сложных оксидов марганца.

В рамках данной работы получены важные результаты, представляющие интерес в области физики конденсированного состояния. В первой части работы представлено исследование влияния магнитного порядка в орторомбическом $YMnO_3$ в рамках первопринципных методов. На основе полученных колебательных спектров проведена интерпретация экспериментальных результатов, в которых наблюдается образование высокотемпературных пиков в низкотемпературной фазе $YMnO_3$. Во второй части работы отражены результаты исследования ферроэлектрической поляризации в рамках модели двойного обмена и приближения Хартри-Фока для эффективной модели Хаббарда, на основе которого рассчитана зависимость поляризации от ориентации магнитных моментов и получены аналитические выражения для дипольного момента на примере орторомбической и гексагональной фаз $YMnO_3$, а также $BiMnO_3$. Показано, что возникновение электрической поляризации в орторомбических манганитах связано с неоднородностью магнитной конфигурации спиновой спирали и орбитальным упорядочением антиферромагнитного типа, что является существенным научным результатом. Наконец, в третьей части представлены результаты методологической реализации современной теории орбитальной намагниченности в приближении Хартри-Фока на примере $LaMnO_3$. На основе расчетов сделаны выводы о малости полученных поправок в стандартное определение орбитального магнитного момента.

Результаты данной работы в полной мере отражены в ведущих зарубежных журналах, что должным образом отражает актуальность, научную ценность и значимость представленного исследования.

Недостатки автореферата, как это часто бывает, являются продолжениями

Вх. №05-19/1-538
от 22.01.15г.

достоинств работы. Большой объем научных результатов диссертации, по-видимому, затруднили диссертанту обсуждение использованные им приближений, что сильно затрудняет оценку их достоверности. В тексте автореферата нет объяснений, почему использовалась модель двойного обмена и отброшен вклад суперобменных взаимодействий, как строились функции Ванье, от выбора которых существенно зависит точность полученных результатов, отсутствуют вычислительные детали проведенных расчетов (размер ячеек, параметры обрезания энергии, число k-точек).

Несмотря на высказанные замечания, на мой взгляд, диссертация Николаева С.А. является законченной работой, в которой получены существенные научные результаты, представляющие несомненный интерес. Автореферат диссертационной работы отвечает критериям пункта 9 Положения о присуждении ученых степеней, а Николаев С.А. заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Александр Аминулаевич Мирзоев

д-р физ.-мат. наук, проф.

Физический факультет

Южно-Уральский государственный университет

454080, г. Челябинск, пр. В.И. Ленина, д. 76

e-mail: mirzoev@physics.susu.ac.ru

тел. (351)2654713

подпись, дата

15.01.2015

Подпись А.А. Мирзоева заверяю:

ВЕРН
ВЕД. ДОК
0.1



ФИО полностью