

Отзыв научного руководителя  
на диссертационную работу **С.А. Николаева**  
**ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ РЕШЕТКИ,  
ФЕРРОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ И ОРБИТАЛЬНОГО  
МАГНЕТИЗМА В СЛОЖНЫХ ОКСИДАХ МАРГАНЦА,**  
представленную на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук  
по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Николаев Сергей Алексеевич обучался на Физико-технологическом факультете УрФУ с 2005 года, который с отличием закончил в 2011 году с квалификацией инженера-физика. В 2009 году он стал заниматься научной работой в Институте математики и механики УрО РАН, а с 2010 года начал работать на кафедре теоретической физики и прикладной математики Физико-технологического института. Основной областью исследований Николаева С.А. является первопринципное моделирование электронных, магнитных и колебательных свойств мультиферроиков и низкоразмерных квантовых систем. В 2013 году Николаев С.А. стал стипендиатом имени первого президента России Б.Н. Ельцина.

Диссертационная работа Николаева С.А. посвящена первопринципному исследованию динамики решетки, ферроэлектрической активности и орбитального магнетизма в сложных оксидах марганца, которые занимают важное место в классе многофункциональных материалов. В первой части работы были рассчитаны из первых принципов колебательные спектры орторомбической фазы  $\text{YMnO}_3$  с учетом возможных магнитных конфигураций и электронных корреляций в системе. В результате было показано, что возникновение экспериментально наблюдаемых высокочастотных пиков связано с переходом в низкотемпературную фазу с установлением антиферромагнитной конфигурации E-типа. Далее была исследована ферроэлектрическая активность в несобственных мультиферроиках из класса манганитов в рамках механизма двойного обмена и приближения Хартри-Фока для эффективной модели, построенной на основе первопринципных расчетов электронной структуры. Для рассматриваемых систем были рассчитаны зависимости электрической поляризации от ориентации магнитных моментов в системе, а также получены аналитические выражения в рамках теории возмущений. Так было показано, что ферроэлектрическая активность в орторомбических манганитах возникает вследствие искажения пространственно однородной магнитной конфигурации и установления орбитального упорядочения антиферро-типа. В заключительной части работы была разработана схема расчета орбитального магнитного момента на основе современной теории орбитальной намагниченности и приближения Хартри-

Фока для эффективной модели Хаббарда. Ее апробация на примере слабого ферромагнетика  $\text{LaMnO}_3$  показала, что основной вклад в орбитальный момент определяется стандартным выражением через матричные элементы оператора углового момента, в то время как поправками современной теории можно пренебречь. В данном исследовании современная теория орбитальной намагниченности впервые была реализована в рамках модельных гамильтонианов и апробирована на реальных системах.

Результаты, приведенные в диссертационной работе, получены автором лично или при его активном участии. Актуальность и научная новизна полученных данных подтверждаются публикациями в высокорейтинговых журналах, а также представлением на международных школах и конференциях.

За время научно-исследовательской работы Николаев С.А. продемонстрировал отличную подготовку в области физики конденсированного состояния и теоретической физики, высокую самостоятельность и прилежность, а также способность совершенствовать свои навыки при выполнении поставленных задач. Во время учебы в аспирантуре Николаев С.А. проходил стажировки в Национальном Институте Материаловедения (г. Цукуба, Япония) и Университете штата Алабама (г. Тускалуза, США), где зарекомендовал себя как сформировавшийся специалист в своей области.

Считаю, что диссертационная работа С.А. Николаева отвечает всем требованиям ВАК РФ к кандидатским диссертациям, и автор заслуживает присуждения ему степени кандидата физико-математических наук по специальности *физика конденсированного состояния*.

Мазуренко Владимир Гаврилович,  
д-р физ.-мат. наук, проф.  
заведующий кафедрой теоретической  
физики и прикладной математики  
Физико-технологического института  
ФГАОУ ВПО “Уральский федеральный университет  
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина”,  
ул. Мира 19, Екатеринбург 620002

12.10.2014

*Подпись Мазуренко В.Г. заверяю:*

**УЧЁНЫЙ СЕКРЕТАРЬ  
УРФУ  
МОРОЗОВА В. А.**

