



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

пр. Ленина, 76, г. Челябинск, Россия, 454080
Тел./факс (351) 267-99-00, <http://www.susu.ac.ru>, E-mail: admin@susu.ac.ru,
ОКПО 02066724, ОГРН 1027403857568, ИНН/КПП 7453019764/745301001

УТВЕРЖДАЮ

Ректор ФГБОУ ВПО «ЮУрГУ» (НИУ)

доктор технических наук, профессор



Александр Леонидович Шестаков

« » 20 14 г.

О Т З Ы В

ведущей организации ФГБОУ ВПО «Южно-Уральский государственный университет» (НИУ) на диссертацию **Мазуренко Владимира Владимировича**

на тему: «ВЛИЯНИЕ ГИБРИДИЗАЦИИ АТОМНЫХ СОСТОЯНИЙ, ЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ И СПИН-ОРБИТАЛЬНОЙ СВЯЗИ НА МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЙ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ»,
представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Актуальность темы исследования. Материалы с сильными электронными корреляциями, к числу которых относятся переходные и редкоземельные элементы с незаполненными 3d и 4f электронными оболочками, а также химические соединения на их основе, постепенно перемещаются в центр внимания современной физики конденсированного состояния. Это связано с открытиями высокотемпературной сверхпроводимости в оксидах переходных металлов и колоссального магнитоэлектрического эффекта в манганитах, показавшими, что сильное взаимодействие электрических и магнитных степеней свободы в таких системах могут приводить к удивительным и многообещающим эффектам. Долгое время свойства систем с сильными корреляциями описывали лишь в рамках упрощенных модельных гамильтонианов (модели Андерсона, Хаббарда, tJ-модель) ввиду трудности точного учета сильного электрон-электронного кулоновского взаимодействия. Только в последние годы возникли

два новых подхода, позволяющих получать количественно точные результаты: теория динамического среднего поля DMFT, и метод «реалистичного моделирования». Первый метод, будучи формально точным, проводит вычисления в пространстве бесконечномерной размерности, что требует мощных вычислительных ресурсов, и порой создает проблемы при интерпретации результатов. Метод «реалистичного моделирования» состоит в построении модельного гамильтониана многочастичной системы полностью на основе теории функционала плотности, а затем проведение прямых расчетов в рамках методов теории многих частиц. Такой подход обеспечивает прозрачную физическую интерпретацию результатов и позволяет с легкостью анализировать как будут влиять на результаты различные внешние параметры. В этом смысле, указанный подход имеет важные перспективы выступить в роли инструмента для анализа и интерпретации результатов численного моделирования материалов с сильными электронными корреляциями. В связи с вышесказанным, актуальность диссертационной работы Мазуренко В.В., выполненной в рамках направления «реалистичного моделирования» и посвященной решению ряда методических и практических задач, связанных с учетом спин-орбитальной связи при моделировании магнитных свойств материалов на основе переходных металлов, не вызывает сомнения.

Научная новизна. В научной литературе представлено небольшое число работ по тематике диссертации. На этом фоне диссертацию *В.В. Мазуренко* отличают несколько новых моментов. Во-первых, предложен оригинальный первопринципный метод описания анизотропных магнитных взаимодействий Дзялошинского-Мории для слабого ферромагнетизма в антиферромагнетиках. Метод, разработанный автором, отличается от ранее развитого (Соловьев И. В.) метода учета одноузельного вклада во вращающий магнитный момент, что, как показано в диссертации, является важным для корректного воспроизведения величины угла отклонения магнитного момента, наблюдаемого в экспериментах.

Во-вторых, в работе разработан новый микроскопический подход для расчета изотропных обменных взаимодействий в случае сильного перекрытия орбиталей Ванье, описывающих материалы с значительной гибридизацией между состояниями атома металла и ближайшими лигандами. Применение метода к изучению оксидов и силицидов ряда металлических систем позволило не только количественно точно воспроизвести картину магнитных возбуждений, наблюдаемую в экспериментах, но и дать микроскопическое объяснение процессам формирования наблюдаемых магнитных свойств нескольких перспективных материалов.

Научная и практическая ценность работы. Разработанные в диссертации методы описания анизотропных магнитных взаимодействий Дзялошинского-Мории для слабого ферромагнетизма в антиферромагнетиках и метод расчета изотропных обменных взаимодействий в случае сильного перекрытия орбиталей Ванье для материалов с значительной гибридизацией между состояниями атома металла и ближайшими

лигандами представляют большой интерес для стратегии и практики моделирования новых магнитных материалов. Полученные в диссертации данные о параметрах магнитных взаимодействий в системах Fe_2O_3 и La_2CuO_4 , $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ представляют огромный интерес как для экспериментаторов, так и теоретиков, занимающихся исследованием этих перспективных материалов. Данные о магнитных свойствах наносистемы Co/Pt(111) открывают потенциальную возможность контроля над отдельными 3d-состояниями атомов переходных металлов в рамках экспериментов по сканирующей туннельной микроскопии. Материалы диссертации могут использоваться в практической работе специалистами по компьютерному материаловедению, а также могут быть включены в лекционные курсы по методам компьютерного моделирования магнитных свойств в университетах.

Достоверность результатов исследования обеспечивается использованием современных теоретических моделей и хорошо изученных и протестированных пакетов компьютерных программ для проведения первопринципных расчетов, ясным физическим смыслом установленных закономерностей, сравнением полученных результатов с литературными данными.

Замечания к диссертационной работе:

1) Не вполне корректной представляется формулировка вывода о том, что «в случае близкой к 90 градусной связи металл-лиганд-металл магнитное взаимодействие в основном определяется ферромагнитным вкладом». Приведенные в диссертации математические выкладки, из которых следует данный результат, существенно используют предположение о том, что орбитали лиганда имеют характер p-орбиталей. Поэтому данный вывод не является универсальным, как это можно понять из приведенной формулировки, а справедлив только для лигандов p-типа;

2) Вызывают удивление приведенные в таблице 3.1. значения вычисленных методами LMTO-LSDA и LMTO-LSDA+U констант обменных взаимодействий, приведенные с точностью до тысячных миллиэлектронвольта, хотя известно, что даже более точный метод LAPW не позволяет за разумное время получать энергии с точностью более чем одна десятая мэВ;

3) Подписи на осях всех рисунков, даны на английском языке. Конечно, это облегчило работу автору, но является неуважительным по отношению к русскоязычному физическому сообществу.

Общие выводы по работе. Отмеченные недостатки не влияют на общую положительную оценку работы. В целом диссертационная работа *В.В. Мазуренко* является научно-квалификационной работой, содержащей новое решение актуальной научной и практической задачи по учету влияния спин-орбитальной связи и гибридизации на магнитные свойства материалов с сильными электронными корреляциями. Работа выполнена на высоком научном уровне, автором получена новая научная и практически

значимая информация по магнитным характеристикам и свойствам перспективных оксидных и силицидных узкозонных систем. Развитые автором теоретические методы сопровождались приложениями, позволившими провести проверку наиболее важных полученных результатов. При этом были использованы современные теоретические модели и методики. Все основные результаты диссертации опубликованы в международных журналах. Автореферат достаточно полно и правильно отражает содержание и результаты диссертации.

Результаты, полученные в диссертации, могут быть использованы в научных учреждениях, занимающихся исследованиями перспективных материалов, для которых существенны корреляционные эффекты. В частности, результаты исследования могут представлять интерес для Института физики металлов, Института электрофизики, Института металлургии УрО РАН (г. Екатеринбург), Московского, Уральского и Сибирского федеральных государственных университетов, Института физики твердого тела РАН, Московского института стали и сплавов, Южно-Уральского государственного университета и др.

Заключение. Диссертация Мазуренко Владимира Владимировича «ВЛИЯНИЕ ГИБРИДИЗАЦИИ АТОМНЫХ СОСТОЯНИЙ, ЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ И СПИНОРБИТАЛЬНОЙ СВЯЗИ НА МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЙ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ», соответствует требованиям пункта 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г., предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук, а сам автор достоин присуждения искомой ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Отзыв обсужден на совместном научном семинаре сотрудников кафедры общей и теоретической физики Южно-Уральского государственного университета (НИУ), протокол №_5_ от «30» июня 2014 года.

Заведующий кафедрой общей и теоретической физики
ФГБОУ ВПО «Южно-Уральский государственный
университет» (НИУ), д. ф.-м. н., профессор

Валерий Петрович Бескачко

Зам. декана физического факультета
ФГБОУ ВПО «Южно-Уральский государственный
университет» (НИУ), д. ф.-м. н., профессор

Александр Аминулаевич Мирзоев



БЕРНС
Начальник службы
делопроизводства ЮУрГУ
Н.Е. Цулукин