

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертацию Голубевой Линары Раушановны
«Флуктуации электронной плотности и магнитные свойства сильно
коррелированных актинидов и соединений с узкими зонами»,
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-
математических наук по специальности 01.04.07 – физика
конденсированного состояния

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы, изложена на 136 страницах, включая 52 рисунка. Библиографический список содержит 100 наименований.

Во введении обоснована актуальность темы диссертационного исследования, сформулированы задачи и цели работы, ее научная новизна, а также теоретическая и практическая значимость, приведены методы исследования и положения, выносимые на защиту, указаны личный вклад автора, степень достоверности, апробация результатов и структура работы.

Первая глава содержит литературный обзор свойств сильно коррелированных металлов и их соединений с неустойчивостью к сверхпроводимости и магнетизму. Обозначены существующие проблемы, возникающие при первопринципных методах расчета электронной структуры сильно коррелированных систем.

Вторая – четвертая главы посвящены развитию теории электронных флуктуаций в модели Хаббарда и ее обобщениях, включающих межузельное обменное взаимодействие и гибридизационные эффекты. Получены уравнения для определения температурных зависимостей магнитной восприимчивости, амплитуд спиновых и зарядовых флуктуаций и оценок температур синглетного спаривания. В рамках развитых моделей рассмотрены электронные и магнитные свойства δ -Pu, Am, соединений и сплавов актинидов, легированных купратов $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ и UGe_2 под давлением. Результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными по температурным зависимостям магнитной восприимчивости и температурам сверхпроводимости исследуемых систем.

В конце каждой главы приведены краткие выводы. Общие выводы сформулированы в *Заключении*.

Актуальность темы диссертации. Диссертационная работа Л.Р. Голубевой посвящена теоретическому изучению электронных и магнитных

свойств сильно коррелированных f-металлов и их соединений. Их основное состояние обсуждается уже долгое время. Однако до сих пор нет устоявшегося единого мнения о природе явлений в этих системах. Ситуация усугубляется тем, что их магнитные свойства не описываются в рамках существующих простых моделей: зонной модели Стонера и локализованной модели Гейзенберга. Более того, в ряде актинидов и их соединений на эксперименте наблюдается сверхпроводимость, природа которой до сих пор не установлена. При этом в ряде экспериментальных работ имеются указания на спин-флуктуационный механизм сверхпроводимости. Однако роль спиновых и зарядовых флуктуаций до сих пор не изучена даже в нормальном состоянии рассматриваемых сверхпроводников. При этом исследование природы магнитных и электронных свойств актинидов затруднено влиянием накапливающихся со временем радиационных дефектов.

Таким образом, теоретическое исследование, проведенное в диссертационной работе, безусловно, является **весьма актуальным**.

К достоинствам диссертационной работы следует отнести разнообразие методов исследования, использованных автором: первопринципные расчеты, модельные теории (модель Хаббарда, спин-флуктуационная теория) и т.д. Все они сведены в стройную физическую модель, что определяет научную и практическую значимость.

Научная новизна представленной Голубевой Л.Р. диссертационной работы не вызывает сомнений. В качестве наиболее важных новых результатов работы можно указать следующие:

1. Впервые в рамках модели Хаббарда и ее обобщений, учитывающих межузельные df -обменные взаимодействия и $pd(f)$ -гибридизацию развита теория, оценивающая совместный эффект спиновых и зарядовых флуктуаций электронной плотности.
2. Построены компьютерные модели, объединяющие результаты LDA+U+SO-расчетов электронной структуры основного состояния и расчеты магнитных свойств в рамках развитых представлений о флуктуациях спиновой и зарядовой плотности.
3. В рамках развитых моделей, на основе учета наблюдаемых на эксперименте температурных зависимостей магнитной восприимчивости уточнены значения ряда параметров межэлектронного взаимодействия (в частности, параметры

кулоновского взаимодействия, межузельного обменного взаимодействия).

4. Сформулированы причины образования синглетных пар за счет обмена парамагнонами. Показано, что значительное влияние на величину температуры синглетного спаривания оказывают зарядовые флуктуации, при условии возникновения отрицательных значений коэффициента междоузельной связи.
5. Показано, что причиной наблюдаемой температурной зависимости спиновой магнитной восприимчивости являются спиновые и зарядовые флуктуации. При этом особенности формирования температурной зависимости спиновой магнитной восприимчивости нормальной фазы обусловлены сменой знака коэффициента междоузельной связи при приближении к температуре сверхпроводимости.
6. Впервые достигнуто согласие с экспериментальными данными о температурной зависимости магнитной восприимчивости для ряда сплавов актинидов.
7. В случае легированных купратов в рамках развитой флуктуационной теории получена наблюдаемая на эксперименте универсальная кривая температурной зависимости магнитной восприимчивости для сплавов $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$.
8. Проведен анализ фазовой диаграммы температура-давление для UGe_2 . Впервые показано, что возникновению области ферромагнитных сверхпроводников предшествует куперовское синглетное спаривание за счет обмена парамагнонами. Полученные оценки температуры Кюри и температур синглетного спаривания согласуются с экспериментом.

Надежность и достоверность результатов работы обеспечена развитием апробированных теоретических методик, использованием стандартных современных программных пакетов и согласием с экспериментальными и теоретическими работами. Основные результаты диссертации опубликованы в реферируемых научных журналах, индексируемых в базах Web of Science и Scopus, а также докладами на крупных Международных конференциях.

Научная и практическая значимость результатов. Экспериментальные исследования актинидов указывают на несостоятельность базовых теоретических моделей при описании наблюдаемых необычных магнитных свойств этих веществ. Кроме того необходима оценка вклада радиационных дефектов, влияющих на магнитные свойства. При этом развитая в

диссертационной работе теория электронных спиновых и зарядовых флуктуаций в сильно коррелированных 5f-системах позволяет улучшить существующие подходы к оценкам роли радиационных дефектов.

Развитая теория с успехом использовалась как для стратегически важного для энергетики δ -плутония и его соединений группы PuCoGa₅, так и применялась для исследования природы магнитных свойств нормальной фазы ВТСП купратов. Особый интерес представляют результаты исследования электронной структуры и ферромагнетизма в сплаве UGe₂ под давлением, который широко обсуждается в мировой литературе в связи с возможностью сосуществования магнитного упорядочения и сверхпроводимости

Таким образом, теоретическое исследование и моделирование электронных и магнитных свойств сильно коррелированных актинидов и их соединений, имеет как научное, так и практическое значение.

По работе имеются следующие замечания и вопросы:

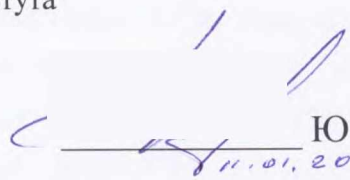
1. Имеется ряд замечаний по тексту диссертационной работы. В тексте диссертации встречаются опечатки и неточности. На некоторых рисунках приведены надписи на английском языке, а единицы измерения приводятся без необходимой расшифровки (например, обозначения для температур « T_{Neel} , T_{Curie} » на рис.(1.3), «Sample A, B» на рис. (1.8), « $\rho(\mu\Omega \text{ cm})$ » рис. (1.7), «experiment» на рис. (4.2) и т.д.).
2. Поскольку спиновая и орбитальная составляющие полного магнитного момента оказываются сильно связанными друг с другом, достаточно осторожно следует подходить к явному разделению магнитной восприимчивости на орбитальную и спиновую части в системах с сильным спин-орбитальным взаимодействием.
3. В работе не затронуты такие явления, как Кондо-состояния на примесях и дефектах, Кондо-решетка и т.д., которые играют важную роль в соединениях f -элементов. Можно ли применить использованные диссертантом методы для их исследования?
4. В двухзонной модели Хаббарда (3.1) записаны только члены, соответствующие внутриатомному хаббардовскому отталкиванию между электронами одной зоны и отсутствует соответствующее слагаемое между электронами из разных зон. Насколько это оправдано?

Приведенные выше замечания не влияют на общую положительную характеристику работы. Работа выполнена на высоком научном уровне.

Заключение. Содержание диссертации соответствует следующим пунктам Паспорта специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния: пункту 1 – «Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы свойств металлов и их сплавов, неорганических и органических соединений, диэлектриков и в том числе материалов световодов как в твердом, так и в аморфном состоянии в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления»; пункту 5 – «Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения».


Диссертация Голубевой Л.Р. на тему «Флуктуации электронной плотности и магнитные свойства сильно коррелированных актинидов и соединений с узкими зонами» полностью отвечает требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Правительством Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842, а ее автор, Голубева Линара Раушановна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Кудасов Юрий Бориславович,
доктор физико-математических наук, доцент,
главный научный сотрудник научно-технического
центра физики высоких плотностей энергии и
направленных потоков излучений (НТЦФ)
Российского федерального ядерного центра –
Всероссийского научно-исследовательского института
экспериментальной физики (РФЯЦ-ВНИИЭФ)
607188, г. Саров, пр. Мира, 37, Тел.: 8313045384
E-mail: kudasov@ntc.vniief.ru


Ю.Б.Кудасов
11.01.2016

Подпись Ю.Б.Кудасова удостоверяю
Директор НТЦФ РФЯЦ-ВНИИЭФ
Заместитель научного руководителя
РФЯЦ-ВНИИЭФ




В.Д.Селемир