

ОТЗЫВ

Официального оппонента на диссертационную работу
Мазуренко Владимира Владимировича

“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. Первопринципные подходы находят все более широкое применение в исследовании и разработке новых материалов. В последнее время, однако, все более очевидной становится потребность выхода за рамки традиционно используемого приближения локальной плотности, которая становится особенно актуальной при рассмотрении магнитных материалов. Поэтому диссертационная работа Мазуренко В.В., посвященная созданию методических основ и комплекса программ для исследования магнитных взаимодействий в сильнокоррелированных соединениях является особенно актуальной.

Существующие первопринципные подходы для расчета магнитных взаимодействий обладают рядом серьезных недостатков. К таким относятся необходимость перебора большого количества магнитных конфигураций системы, отсутствие учета слабых релятивистских взаимодействий, невозможность моделирования коррелированных магнитных взаимодействий, сверхбыстрых магнитных возбуждений и другие. Все это препятствует пониманию факторов, определяющих свойства магнитных материалов на основе переходных 3d металлов при экспериментальных температурах и магнитных полях. Таким образом выбранная Мазуренко В.В. тема диссертационного исследования очевидно соответствует приоритетным направлениям развития науки в Российской Федерации. Полученная информация имеет принципиальное значение для корректного описания существующих магнитных материалов, а также при проектировании новых систем, представляющих технологический интерес, например квантовых устройств чтения и записи информации.

Научная новизна. Методы, разработанные Мазуренко В.В., позволяют преодолеть существующие методические и вычислительные проблемы, возникающие при описании соединений переходных металлов. Так расчет взаимодействия Дзялошинского-Мории дает основу для понимания поведения сильнофрустрированных квантовых магнетиков, в которых вырождение основного

состояния может сниматься за счет анизотропного магнитного взаимодействия. А предложенный метод расчета изотропных обменных взаимодействий для систем с сильной ковалентной связью позволяет избежать прямого интегрирования по волновым функциям при определении ферромагнитного вклада.

Большинство расчетных результатов, представленных в диссертации, являются новыми и оригинальными. Особо хотелось бы выделить результаты исследования искусственной наносистемы Co/Pt(111), для которой была установлена сильная орбитальная поляризация спектров проводимости. Важным результатом является также аналитическое представление магнитных взаимодействий, в котором различные вклады имеют ясный физический смысл и могут быть определены путем первопринципных расчетов.

Кроме того, в работе впервые решен ряд фундаментальных вопросов: определены направление и величина отклонения магнитных моментов в антиферромагнетиках со слабым ферромагнетизмом, в рамках единой модели воспроизведены экспериментальные спектры для силицида железа, а также получено согласие с экспериментальными величинами магнитного момента и температуры Кюри для силицида железа допированного кобальтом.

Научно-практическая ценность. В работе Мазуренко В.В. развивается новое направление физики конденсированного состояния, связанное с первопринципным моделированием магнитных взаимодействий в сильнокоррелированных материалах. Для этого разработаны теоретические основы и реализованы численные методы, позволяющий определить полный набор изотропных и анизотропных обменных интегралов для исследуемой системы, а также выяснить роль различных механизмов в формировании магнитных свойств. Практическая часть диссертации охватывает актуальные классы соединений переходных металлов, что дает прекрасную возможность продемонстрировать работоспособность предложенных подходов. Полученные результаты не только интересны с фундаментальной точки зрения, но и обладают предсказательной силой - стимулируют постановку и проведение новых экспериментов.

Достоверность результатов. Полученные Мазуренко В.В. результаты достоверны и их можно классифицировать как новое научное знание. Автор использует различные численные методы для независимой проверки результатов и для того чтобы продемонстрировать их воспроизводимость. Также проводится детальное сравнение с экспериментальными данными и результатами предыдущих теоретических работ.

Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций.

Основные результаты работы сформулированы в виде 7 защищаемых положений и 7 выводов. Все защищаемые положения и выводы имеют как теоретическое, так и прикладное значение. Они основаны на результатах квантово-механических расчетов с использованием современных, хорошо апробированных методов компьютерного моделирования.

Рекомендации по дальнейшему развитию темы исследований основаны на многолетнем опыте научных исследований Мазуренко В.В. и его публикациях, которые хорошо известны научной общественности.

Обзор работы. В методической части диссертации представлены разработанные автором первопринципные методы построения реалистичных магнитных моделей, которые, в частности, включают (i) анизотропные взаимодействия Дзялошинского-Мории, возникающие вследствие спин-орбитальной связи, (ii) дополнительный ферромагнитный обменный интеграл, определяемый перекрытием магнитных орбиталей на лигандах. Кроме того, при рассмотрении сильнокоррелированных металлов модель позволяет учесть перенормировку магнитных взаимодействий вследствие динамических кулоновских корреляций.

В практической части диссертации при помощи разработанных методов автором решен ряд важных проблем физики конденсированного состояния.

Третья глава посвящена исследованию конкуренции анизотропных и изотропных обменных взаимодействий, которая приводит к формированию состояния слабого ферромагнетизма и определяет направление скручивания магнитных моментов в антиферромагнетиках без центра инверсии.

В четвертой главе на основе первопринципных расчетов раскрывается микроскопический механизм обменных взаимодействий в низкоразмерных купратах.

К важным результатам пятой главы следует отнести объединение теории динамического среднего поля и уравнений теории Стонера, что позволило дать объяснение подавлению магнетизма в твердых растворах $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$.

В шестой главе на основе результатов первопринципных и модельных расчетов предложен сценарий формирования электронных, магнитных и транспортных свойств поверхностной наносистемы $\text{Co}/\text{Pt}(111)$.

Автореферат точно отражает содержание диссертации.

После изучения диссертации и опубликованных работ возникли следующие вопросы и замечания:

- 1) Исследуя магнитные взаимодействия в гематите железа автор не дает ответа на вопрос: “Почему наибольшие взаимодействия возникают с атомами именно из третьей и четвертой координационных сфер?”
- 2) В пятой главе, где исследуется силицид железа $FeSi$, не приведена информация о структуре этого соединения, что затрудняет восприятие материала. В частности, не ясно влияет ли изменение электронного спектра с температурой на величину смещений атомов из высокосимметричных позиций?

Указанные вопросы и замечания не влияют на общую превосходную оценку рецензируемой диссертационной работы, которая является законченным научно-исследовательским трудом, выполненным автором самостоятельно на высоком научном уровне. Основные результаты диссертации опубликованы в 15 работах в престижных физических журналах *Physical Review B* и *European Physical Journal*.

Диссертация “Влияние гибридизации атомных состояний, электронных корреляций и спин-орбитальной связи на магнитные свойства соединений переходных металлов” удовлетворяет критериям “Положения о порядке присуждения ученых степеней”, утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук, а ее автор Мазуренко Владимир Владимирович заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент,
главный научный сотрудник лаборатории
теоретической физики ФГБУН
Институт физики металлов УрО РАН,
доктор физико-математических наук

Горностырев Юрий Николаевич

Дата: 25.08.2014

Адрес организации: 620990, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Трудового Красного Знамени Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук (ИФМ УрО РАН), www.imp.uran.ru, E-mail: physics@imp.uran.ru, Тел. +7 (343) 374-0230.

Подпись Горностырева Ю.Н. заверяю



Подпись *Горностырева*
заверяю
Руководитель общего отдела
Лямин Н.Ф. Лямина
"05" 09 20 14 г.