

О Т З Ы В

официального оппонента на диссертацию

Николаева Сергея Алексеевича

«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»

В современной физике конденсированного состояния активно идёт исследование многофункциональных материалов, в которых наблюдается взаимосвязь между электронными, магнитными и структурными свойствами. Среди наиболее перспективных и популярных в настоящий момент как у теоретиков, так и экспериментаторов можно отметить мультиферроики, в которых одновременно проявляется магнетизм и сегнетоэлектричество. Данное сосуществование позволяет использовать одно из свойств для влияния на другое, что делает такие материалы идеальной базой для использования в датчиках различного типа, и в таких областях как спинтроника. В тоже время не существует, да и не может существовать, единой теории, которая объясняла бы появления магнетизма и спонтанной электрической поляризации в твердых телах. Отчасти это связано с многокомпонентным составом соединений, и поэтому за магнетизм и ферроэлектричество зачастую отвечают различные ионы. Обратная ситуация тоже возможна, и одни и те же электроны дают вклад в магнитные и электрические свойства. Таким образом, диссертационная работа Николаева С.А., посвященная исследованию ферроэлектрической поляризации и орбитального магнетизма, несомненно *является актуальной*.

Научная и практическая ценность работы заключается в полученных результатах, которые представляют как самостоятельный научный интерес, так и могут служить основой для дальнейшего построения теоретических моделей и сравнения с экспериментальными данными.

Достоверность результатов подтверждена успешным использованием примененных в диссертации методов и подходов, а также хорошим согласием полученных результатов с работами других авторов. Представленные результаты апробированы на международных и российских конференциях и отражены в виде статей в ведущих реферируемых российских журналах.

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы из 138 наименований и двух приложений. Работа изложена на 119 страницах и оформлена согласно требованиям ВАК.

Во *введении* обосновывается актуальность работы, даётся краткий обзор современного состояния науки в области исследования мультиферроиков. Сформулированы цель и задачи работы, определены её научная новизна, практическая ценность, а также подробно изложен личный вклад автора.

В *первой главе*, имеющей методический характер, рассматриваются основные подходы и приближения, используемые в работе: теория функционала электронной плотно-

сти, приближение LDA+U, метод Хартри-Фока, а также современные теории электрической поляризации и орбитального магнетизма.

Во второй главе исследуется влияние различных типов магнитного упорядочения на динамику решетки в орторомбическом YMnO_3 . Показано, что антиферромагнетизм E-типа и учет одноузельного кулоновского взаимодействия d -электронов Mn позволяет наиболее правильно описать экспериментально наблюдаемый высокочастотный пик в колебательном спектре.

В третьей главе, которая является основной частью диссертации, исследуется ферроэлектрическая активность в модели двойного обмена. Вводится модель для e_g электронов в манганитах и делается аналитический вывод в теории возмущений по параметру расщепления. Данная модель используется для исследования спонтанной электрической поляризации в гексагональной фазе YMnO_3 и несобственного сегнетоэлектрика BiMnO_3 . Показано, что электрическая поляризация в YMnO_3 представляет собой нелокальный эффект, который возникает вследствие искажения спиновой спирали в результате спин-орбитального взаимодействия. В случае BiMnO_3 показано, что в рамках модели двойного обмена электрическая поляризация лежит в плоскости xz .

В четвертой главе в рамках современной теории орбитальной намагниченности предложен метод расчета орбитального магнитного момента в модели Хаббарда в приближении Хартри-Фока. Данная методика опробована на LaMnO_3 . Показано, что поправка в локальную компоненту ΔM^{LC} и коллективизированный вклад M^C малы по сравнению с основным локальным вкладом, который определяется периодической частью углового момента.

В заключении сформулированы основные выводы по работе.

В целом автор успешно решил ряд задач, относящихся к теории электронных и магнитных свойств сильно-коррелированных соединений.

Наиболее существенными, с моей точки зрения, результатами работы являются:

1. Простая аналитическая модель, позволяющая правильно описывать свойства несобственных мультиферроиков, в которых магнетизм обусловлен двойным обменом.
2. Ферроэлектрические свойства манганитов успешно описаны в рамках простой аналитической модели, использующей механизм двойного обмена.

Вместе с тем при прочтении диссертации возник ряд вопросов и замечаний:

1. Известно, что современная теория электрической поляризации и орбитальной намагниченности легко и изящно формулируется в базисе локализованных орбиталей или Ванье-функций. Каким образом в диссертационной работе контролировалась степень локализации используемых Ванье-функций?
2. В п. 1.5.1. «Методы расчета градиента волновой функции» представлены три метода расчета. Автор диссертационной работы использует второй метод, основанный на ковариантных производных волновой функции, без объяснения почему данный метод является наиболее предпочтительным. Хотелось бы узнать комментарии по этому поводу.
3. В п. 2.1. «Методика вычислений» используются различные разбиения обратного пространства для антиферромагнетизма E-типа и остальных магнитных конфигураций в YMnO_3 . Из диссертационной работы неясно с чем это связано?
4. Уравнение (1.21) содержит ошибку, которая переписывается из текста в текст, начиная с оригинальной работы. Перед вторым слагаемым должен стоять знак плюс.

5. При описании гексагональной структуры YMnO_3 кислородное окружение марганца неоднократно называется октаэдром. В то время как оно является треугольной бипирамидой.

Тем не менее, высказанные замечания не изменяют общего положительного впечатления от данной работы. Представленная диссертация является завершённым научным исследованием. Полученные в работе результаты были опубликованы в ведущих международных физических журналах и доложены на российских и международных конференциях. Выводы диссертации обоснованы и подтверждены сравнением с опубликованными теоретическими и экспериментальными данными. Работа выполнена на высоком мировом уровне и посвящена актуальным проблемам современной физики конденсированного состояния, удовлетворяет всем критериям новизны, достоверности и практической значимости.

Автореферат полностью отражает основное содержание диссертации.

В целом полагаю, что диссертационная работа «Первопринципное моделирование динамики решетки, ферроэлектрической поляризации и орбитального магнетизма в сложных оксидах марганца» полностью удовлетворяет требованиям, сформулированным в разделе II Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24.09.2013 г., предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор, Николаев Сергей Алексеевич, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Официальный оппонент –

кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник
лаборатории оптики металлов
отдела электронных свойств
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института физики металлов имени М.Н. Михеева
Уральского отделения Российской академии наук

21
51
Потеряев Александр Иванович

620137, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, д. 18,
ИФМ УрО РАН
тел.: +7 (343) 378 38 14
факс: +7 (343) 374 5244
эл. почта: poteryaev@imp.uran.ru



потеряев
заведующего отдела
Н.Ф.Лямина
20 15 г.