

ОТЗЫВ

официального оппонента Прудникова Владимира Васильевича
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. Интерпретация результатов магнитных экспериментов, связанных с измерениями магнитной восприимчивости, намагниченности, удельной теплоемкости, рассеяния нейтронов и др., требует от теоретика решения целого ряда связанных между собой задач. В первую очередь, на основе данных о кристаллической структуре и химическом составе необходимо построить магнитную модель, которая с одной стороны была бы максимально простой и в тоже время учитывала основные физические особенности конкретной системы. Для соединений переходных металлов с частично заполненной $3d$ - оболочкой существует большой выбор моделей, среди которых модели Гейзенберга, Стонера, Хаббарда, t - J модель и др. Подобные модели могут быть эффективно решены с помощью целого арсенала численных методов, таких как методы Монте Карло, диагонализации, ренорм-группы. Однако при таком подходе к исследованию магнитных свойств материалов возникает проблема определения параметров спиновых гамильтонианов для соответствующих моделей. Обычной практикой в данных исследованиях является подбор такого набора параметров модели, которые позволяют получать наилучшее согласие экспериментальных и теоретических спектров.

В последнее время активно развивается альтернативное направление исследований - первопринципный расчет параметров модельных магнитных гамильтонианов. Использование численных методов теории функционала электронной плотности позволяет однозначно определить набор параметров магнитной модели, который будет точно учитывать особенности атомного и электронного строения кристаллов. Такой первопринципный подход очень востребован в настоящее время, о чем свидетельствует значительное число публикаций в ведущих журналах по физике конденсированного состояния.

Диссертация Мазуренко В.В. посвящена разработке первопринципных методов для расчета магнитных взаимодействий в сильнокоррелированных соединениях. В работе предлагаются новые пути построения более совершенных магнитных моделей для современных материалов и наносистем. Выбранная тема исследований, безусловно, является актуальной и представляет значительный интерес для широкого круга исследователей.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 6 глав, заключения и списка литературы, содержащего 214 наименований. Работа изложена на 213 страницах и оформлена в соответствии с требованиями ВАК РФ.

В первой главе проведен обзор существующих методов расчета электронной и магнитной структуры, которые используются автором для моделирования свойств соединений переходных металлов. Описаны методики расчета магнитных взаимодействий, определены их достоинства и недостатки.

Следующие главы посвящены оригинальным методическим и расчетным результатам, полученными автором диссертации.

Во второй главе представлены три новых численных метода для определения параметров магнитных моделей для сильнокоррелированных систем. На основе теоремы локальных сил и с учетом спин-орбитального взаимодействия получено выражение для взаимодействия Дзялошинского-Мория, отвечающего за формирование неколлинеарных магнитных структур в соединениях переходных металлов без центра инверсии. Разработана методика учета сильной ковалентной связи при определении магнитных взаимодействий в низкоразмерных купратах. При помощи метода функций Грина показано - какое влияние на магнитное взаимодействие оказывает учет динамических кулоновских корреляций, что является принципиально важным для коррелированных металлов.

Третья глава посвящена результатам моделирования слабого ферромагнетизма в антиферромагнетиках Fe_2O_3 и La_2CuO_4 . С использованием разработанных методов и приближения LDA+U+SO автор однозначно определяет плоскость, в которой происходит отклонение магнитных моментов, а также получает хорошее согласие с экспериментом по величине нескомпенсированного магнитного момента в системе.

В четвертой главе приведены результаты, свидетельствующие о важности учета состояний атомов кислорода для описания магнитных свойств оксидов меди. Не смотря на сложность задачи определения магнитных взаимодействий, автор предлагает элегантный метод ее решения, а именно использование базиса функций Ванье.

Пятая глава содержит решение сложной задачи по описанию физических свойств силицида железа и твердых растворов на его основе. Используя физически обоснованные аргументы, автор показал справедливость предлагаемой им модели коррелированного зонного изолятора. Решение модели при помощи теории динамического среднего поля позволило корректно воспроизвести экспериментальные зависимости для FeSi .

В шестой главе выявлено значительное влияние, которое оказывает гибридизация состояний атома примеси и металлической подложки на магнитный спектр и спектр проводимости наносистемы $\text{Co/Pt}(111)$. Также принципиально важным является учет кулоновского взаимодействия для локализованных состояний примеси.

Заключение посвящено анализу дальнейших путей развития темы исследования – расчету магнитных взаимодействий в сильнокоррелированных системах.

Методическая новизна диссертационного исследования Мазуренко В.В. заключается:

- 1) в разработке и реализации в компьютерных кодах совокупности методов для первопринципного расчета параметров изотропных и анизотропных обменных взаимодействий в сложных оксидах переходных металлов;
- 2) в определении перенормировки магнитных взаимодействий в сильнокоррелированных металлических соединениях;
- 3) в создании подхода, объединяющего теорию динамического среднего поля и уравнения теории магнетизма Стонера, для объяснения магнитных свойств коррелированных металлов;
- 4) в учете квантовых флуктуаций между щупом, примесью и подложкой при моделировании экспериментов по сканирующей туннельной микроскопии.

Новизна физических результатов, полученных для конкретных соединений переходных металлов, заключается:

- 1) в анализе слабого ферромагнетизма в антиферромагнетиках Fe_2O_3 и La_2CuO_4 ;
- 2) в определении полного набора магнитных взаимодействий для низкоразмерных квантовых магнетиков LiCu_2O_2 и $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$;
- 3) в объяснении редукции магнитного момента для твердых растворов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$;
- 4) в определении орбитального состава спектров проводимости атома кобальта на металлической поверхности.

Научно-практическая значимость. С методической точки зрения диссертация обеспечивает связь между чисто модельными подходами, предназначенными для описания возбужденных состояний материалов, и первопринципными методами, описывающими основное состояние при нуле температур и в отсутствие магнитного поля. Это позволяет построить свободную от подгоночных параметров схему определения реалистичных магнитных моделей современных материалов.

К методическим достоинствам работы относится также то, что автор не только вычисляет параметры межатомных обменных взаимодействий, но и детально анализирует происхождение магнитного момента в исследуемых системах. На конкретных примерах продемонстрировано как аппарат функций Ванье может быть использован для определения степени локализации магнитного момента. Такой анализ на примере низкоразмерных магнетиков позволил обнаружить значительные ферромагнитные вклады в изотропные магнитные взаимодействия и исключить из рассмотрения модель изолятора Кондо в случае силицида железа.

Разработанные методики моделирования магнитных взаимодействий могут использоваться при подготовке и чтении спецкурсов по проблемам физики конденсированного состояния для магистров и аспирантов.

Достоверность результатов диссертации подтверждается использованием современных зонных методов, согласием с известными экспериментальными и теоретическими данными. Результаты работы неоднократно докладывались на международных и российских конференциях и семинарах. Важно отметить, что по результатам диссертации опубликовано 15 статей в международных высокорейтинговых рецензируемых журналах по физике конденсированного состояния, входящих в перечень ВАК.

Степень обоснованности научных положений и выводов. Из текста диссертации видно, что в положениях и выводах, выносимых на защиту, автор опирается на результаты исследований, выполненных им самостоятельно на высоком методическом и расчетном уровнях. Положения и выводы не только обоснованы, но и дают наглядное представление обо всей работе в целом.

Степень обоснованности рекомендаций. Предложенные Мазуренко В.В. рекомендации по дальнейшему развитию темы расчета магнитных взаимодействий представляют собой обзор актуальных проблем для теоретического описания последних магнитных экспериментов. Рекомендации также содержат полезные ссылки на работы ведущих специалистов в области физики конденсированного состояния.

Автореферат соответствует требованиям ВАК РФ и полностью отражает содержание диссертации.

Замечания и вопросы по диссертации:

- 1) При определении перенормировки магнитных взаимодействий в сильнокоррелированных металлах (уравнение (2.76)) автор не учитывает спиновую и орбитальную зависимости собственно-энергетической части. В каких случаях справедливо такое приближение?
- 2) Из текста диссертации неясно, для моделей с каким спином автор проводит расчет магнитных взаимодействий для соединений Fe_2O_3 и La_2CuO_4 .

- 3) На странице 155 обсуждается объединение теории динамического среднего поля и теории магнетизма Стонера для описания твердых растворов FeCoSi. В чем заключается роль уравнений Стонера? Почему учет динамических корреляций и описание магнетизма не могут быть выполнены только при помощи схемы DMFT?
- 4) Еще один недостаток работы заключается в отсутствии оценки температуры Кюри-Вейсса для низкоразмерных квантовых магнетиков с использованием рассчитанных изотропных обменных констант. Это бы значительно усилило обсуждение результатов и сравнение их с экспериментальными данными.

Указанные замечания не влияют на положительную оценку рецензируемой работы, в которой автор разработал новые методы расчета магнитных взаимодействий, получил оригинальные результаты по магнитному и электронному строению перспективных сильнокоррелированных соединений, предсказал возможность определения отдельных орбитальных состояний в экспериментах туннельной микроскопии.

Считаю, что работа на тему «Влияние гибридизации атомных состояний, электронных корреляций и спин-орбитальной связи на магнитные свойства соединений переходных металлов» отвечает требованиям «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 присвоения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент,
заведующий кафедрой теоретической физики
ФГБОУ ВПО «Омский государственный
университет им. Ф.М. Достоевского»,
доктор физико-математических наук,
профессор



Прудников Владимир Васильевич

Адрес организации: 644077, Россия, г. Омск, ФГБОУ ВПО «Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского», кафедра теоретической физики, пр.Мира 55а, www.omsk.ru, E-mail: prudnikov@univer.omsk.su, Тел. +7 (3812) 63-04-45, факс: 8 3812 642 700.

Подпись д.ф.-м.н., проф., заведующего кафедрой теор. физики Омского государственного университета им. Ф.М. Достоевского Прудникова В.В. удостоверяю.

Ученый секретарь Ученого совета
Омского государственного университета
им. Ф.М. Достоевского



Ковалевская Л.И.

Дата

21.09.14