

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.285.02 НА БАЗЕ  
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО АВТОНОМНОГО  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО  
ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ «УРАЛЬСКИЙ  
ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ ПЕРВОГО ПРЕЗИДЕНТА  
РОССИИ Б.Н. ЕЛЬЦИНА», МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ  
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 26.09.2014 г. № 22

О присуждении Мазуренко Владимиру Владимировичу, гражданство Российской Федерации, ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Влияние гибридизации атомных состояний, электронных корреляций и спин-орбитальной связи на магнитные свойства соединений переходных металлов» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния принята к защите 06 июня 2014 г., протокол № 14 диссертационным советом Д.212.285.02 на базе ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Минобрнауки России, 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19, созданным приказом Минобрнауки России № 105/нк от 11.04.2012 г.

Соискатель, Мазуренко Владимир Владимирович, 1979 года рождения, кандидат физико-математических наук с 09.07.2004 г., диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук на тему «Исследование магнитных и электронных свойств твердых растворов и сложных оксидов переходных металлов» защитил в 2004 г. в диссертационном совете, созданном на базе Уральского государственного технического университета; в 2010 г. окончил докторантуру ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России

Б.Н. Ельцина» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния; работает в должности доцента кафедры теоретической физики и прикладной математики ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Минобрнауки России.

Диссертация выполнена на кафедре теоретической физики и прикладной математики ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Минобрнауки России.

**Официальные оппоненты:**

**Медведева Надежда Ивановна**, доктор физико-математических наук, ФГБУН Институт химии твердого тела УрО РАН, лаборатория квантовой химии и спектроскопии, главный научный сотрудник;

**Горностырев Юрий Николаевич**, доктор физико-математических наук, ФГБУН Институт физики металлов УрО РАН, лаборатория теоретической физики, главный научный сотрудник;

**Прудников Владимир Васильевич**, доктор физико-математических наук, профессор, ФГБОУ ВПО «Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского», кафедра теоретической физики, заведующий, дали положительные отзывы на диссертацию.

**Ведущая организация** – ФГБОУ ВПО «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», г. Челябинск, в своем положительном заключении, подписанном Бескачко Валерием Петровичем, доктором физико-математических наук, профессором, заведующим кафедрой общей и теоретической физики и Мирзоевым Александром Аминулаевичем, доктором физико-математических наук, профессором, заместителем декана физического факультета, указала, что диссертация Мазуренко В.В. 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 ему искомой ученой степени

доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Соискатель имеет 43 опубликованные работы, в том числе по теме диссертации 22 работы, опубликованных в рецензируемых научных изданиях – 15. Другие публикации по теме диссертации представлены в виде 1 статьи в научном журнале, в виде материалов международных (1) и российских (5) научных конференций. Общий объем опубликованных работ – 7,1 п.л., авторский вклад – 3,9 п.л..

Наиболее значительные научные работы по теме диссертации:

1) **Mazurenko V. V.** Weak ferromagnetism in antiferromagnets:  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and La<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub> / **V. V. Mazurenko**, V. I. Anisimov // Physical Review B 2005. V. 71. № 184434. P. 1–8.

2) **Mazurenko V. V.** Renormalized spectral function for Co adatom on the Pt(111) surface / **V. V. Mazurenko**, S. N. Iskakov, A. N. Rudenko et al. // Physical Review B 2010. V. 82. № 193403. P. 1–4.

3) **Mazurenko V. V.** Wannier functions and exchange integrals: The example of LiCu<sub>2</sub>O<sub>2</sub> / **V. V. Mazurenko**, S. L. Skornyakov, A. V. Kozhevnikov, F. Mila and V.I. Anisimov // Physical Review B 2007. V. 75. № 224408. P. 1–7.

4) **Mazurenko V.V.** Orbital-selective conductance of Co adatom on the Pt(111) surface / **V. V. Mazurenko**, S. N. Iskakov, M. V. Valentyuk, A. N. Rudenko, and A. I. Lichtenstein // Physical Review B. 2011. V. 84. № 193407. P. 1–5.

5) **Mazurenko V.V.** Correlation effects in insulating surface nanostructures / **V. V. Mazurenko**, S. N. Iskakov, A. N. Rudenko, I. V. Kashin, O. M. Sotnikov, M. V. Valentyuk, and A. I. Lichtenstein // Physical Review B. 2013. V. 88. № 085112. P. 1–9.

6) **Mazurenko V.V.** Metal-insulator transitions and magnetism in correlated band insulators: FeSi and Fe<sub>1-x</sub>Co<sub>x</sub>Si / **V. V. Mazurenko**, A. O. Shorikov, A. V. Lukoyanov, K. Kharlov, E. Gorelov, A. I. Lichtenstein, and V. I. Anisimov // Physical Review B. 2010. V. 81. № 125131. P. 1–10.

На автореферат поступили положительные отзывы:

1. От заведующего отделом теоретических исследований ФГБУН Институт кристаллографии РАН, д-ра физ.-мат. наук, проф. Пикина Сергея Алексеевича. В отзыве отмечен недостаток: созданные компьютерные программы недоступны сторонним пользователям, и это не позволяет досконально проверить конкретные результаты работы, и не способствует прогрессу в данной области.

2. От заведующего кафедрой физики низких температур и сверхпроводимости, заведующего отделением физики твердого тела физического факультета ФГБОУ ВПО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», д-ра физ.-мат. наук, проф. Васильева Александра Николаевича. Без замечаний.

3. От руководителя лаборатории моделирования и разработки новых материалов ФГАОУ ВПО «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», д-ра физ.-мат. наук, проф. Абрикосова Игоря Анатольевича. В отзыве имеются замечания: автором разработан и реализован в компьютерных кодах метод расчета анизотропных обменных взаимодействий, однако из автореферата не понятно, реализованы ли коды как независимый набор компьютерных программ, или они интегрированы в какой-либо из известных компьютерных кодов; в пятой главе отсутствует объяснение, каким образом моделировались эффекты беспорядка при расчете системы  $(\text{Fe-Co})\text{Si}$  в рамках теории динамического среднего поля.

4. От ведущего научного сотрудника лаборатории теоретической физики ФГБУН Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук, д-ра физ.-мат. наук Катанина Андрея Александровича. Без замечаний.

5. От заведующего лабораторией порошковых, композиционных и нано-материалов ФГБУН Институт металлургии УрО РАН, д-ра физ.-мат. наук Гельчинского Бориса Рафаиловича. В отзыве имеется замечание: константы обменных взаимодействий, представленные в таблице 1, приведены с точностью до тысячных мЭВ, хотя даже более точные методы не

позволяют получать значения энергии с точностью более чем одна десятая мэВ.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их широкой известностью своими достижениями в данной отрасли науки, их высокой научной компетентностью в области исследования электронных и магнитных свойств соединений переходных металлов, а также их компетентностью в области физики конденсированного состояния магнито-упорядоченных и магнито-неупорядоченных систем.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– **разработан** комплекс методов для определения параметров магнитных моделей соединений переходных металлов с учетом спин-орбитальной связи, гибридизации металл-лиганд и динамических кулоновских корреляций;

– **впервые установлены** микроскопические механизмы формирования магнитных структур антиферромагнетиков со слабым ферромагнетизмом  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  и  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , а также низкоразмерных квантовых магнетиков  $\text{LiCu}_2\text{O}_2$  и  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ ;

– **предложена и решена** модель коррелированного зонного изолятора для соединения  $\text{FeSi}$ , с единых позиций **воспроизведены** экспериментальные спектры оптической проводимости и магнитной восприимчивости для силицида железа;

– **показано**, что учет динамических кулоновских корреляции позволяет корректно воспроизвести намагниченность как функцию концентрации в серии твердых растворов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ ;

– **впервые** построена и решена реалистичная модель Андерсона для описания электронных, магнитных и транспортных свойств наносистемы  $\text{Co}/\text{Pt}(111)$ , определена возможность контроля над отдельными  $3d$  состояниями атома кобальта в экспериментах по сканирующей туннельной микроскопии.

**Теоретическая значимость исследования** обоснована тем, что:

1) **разработан** численный метод для описания слабого ферромагнетизма в антиферромагнетиках;

2) **предложена** численная схема, объединяющая теорию динамического среднего поля и модельный подход Стонера, для моделирования магнитных свойств сильнокоррелированных систем с коллективизированными электронами;

3) **предложено** выражение для дифференциальной проводимости, позволяющее изучать взаимосвязь между транспортными и магнитными свойствами поверхностных наносистем.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики** заключается:

1) в определении на основе первопринципных расчетов электронных и магнитных моделей, которые позволяют с микроскопической точки зрения проанализировать процесс формирования магнитных свойств актуальных соединений переходных металлов;

2) в предсказании возможности контроля над отдельными  $3d$  состояниями атома кобальта на платиновой поверхности, что стимулирует постановку и проведение новых экспериментов по сканирующей туннельной микроскопии.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила:**

1) все представленные результаты могут быть классифицированы как новое научное знание;

2) полученные данные об электронной и магнитной структуре исследуемых систем согласуются с результатами экспериментов и предыдущих теоретических работ.

**Личный вклад соискателя** состоит в разработке представленных численных методов; выполнении большей части расчетов; анализе полученных результатов, формулировании выводов и положений, выносимых на защиту; подготовке основных публикаций по выполненной работе.

На заседании 26 сентября 2014 г. диссертационный совет принял решение присудить Мазуренко В.В. ученую степень доктора физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 19 человек, из них 7 докторов наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 22 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за 19, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель диссертационного  
совета



Кортов Всеволод Семенович

Ученый секретарь  
диссертационного совета

Ищенко Алексей Владимирович

26.09.2014 г.