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 НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ,
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело №_____

решение диссертационного совета от 13.02.2015 г. № 4

О присуждении Николаеву Сергею Алексеевичу, гражданство Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Первопринципное моделирование динамики решетки, ферроэлектрической поляризации и орбитального магнетизма в сложных оксидах марганца» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния принята к защите 05 декабря 2014 года, протокол №36, 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, Николаев Сергей Алексеевич, 1988 года рождения.

В 2011 году окончил ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по специальности «Физика атомного ядра и частиц», в 2014 году окончил очную аспирантуру ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния; работает в должности младшего

научного сотрудника кафедры теоретической физики и прикладной математики Физико-технологического института ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Минобрнауки России.

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

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор, **Мазуренко Владимир Гаврилович**, ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Физико-технологический институт, кафедра теоретической физики и прикладной математики, заведующий кафедрой.

Научный консультант – доктор физико-математических наук, **Соловьев Игорь Владимирович**, ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Физико-технологический институт, кафедра теоретической физики и прикладной математики, главный научный сотрудник.

Официальные оппоненты:

Кучинский Эдуард Зямович, доктор физико-математических наук, ФГБУН Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук (г. Екатеринбург), лаборатория теоретической физики, ведущий научный сотрудник;

Потеряев Александр Иванович, кандидат физико-математических наук, ФГБУН «Институт физики металлов имени М.Н. Михеева» Уральского отделения Российской академии наук (г. Екатеринбург), лаборатория оптики металлов, старший научный сотрудник,

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – ФГБУН Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук (г. Екатеринбург) – в своем

положительном заключении, подписанном Кузнецовым Михаилом Владимировичем, доктором химических наук, профессором, заведующим лабораторией квантовий химии и спектроскопии, и Медведевой Надеждой Ивановной, доктором физико-математических наук, главным научным сотрудником лаборатории квантовой химии и спектроскопии, указала, что диссертационная работа отвечает критериям Положения о присуждении ученых степеней (пункт 9), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Николаев Сергей Алексеевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Соискатель имеет 6 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 6 работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях – 4. Другие публикации представлены в виде 2 материалов всероссийских конференций. Общий объем опубликованных работ – 2,93 п.л., авторский вклад – 1,62 п.л.

Наиболее значительные научные работы по теме диссертации:

1. **Nikolaev S.A.** Influence of magnetic order on phonon spectra in multiferroic orthorhombic $YMnO_3$ / **S.A. Nikolaev**, A.N. Rudenko, V.G. Mazurenko // Solid State Commun. – 2013. – V. 164. – P. 16-21 (0.375 п.л. / 0.3 п.л.).

2. **Nikolaev S.A.** Double-exchange theory of ferroelectric polarization of orthorhombic manganites with twofold periodic magnetic texture / I.V. Solovyev, **S.A. Nikolaev** // Phys. Rev. B – 2013. – V. 87, № 14. – P 144424 1-15 (0.9375 п.л. / 0.45 п.л.).

3. **Nikolaev S.A.** Orbital magnetization of insulating perovskite transition-metal oxides with a net ferromagnetic moment in the ground state / **S.A. Nikolaev**, I.V. Solovyev // Phys. Rev. B. – 2014. – V. 89, № 6. – P. 064428 1-11 (0.6875 п.л. / 0.35 п.л.).

4. **Nikolaev S.A.** Spin dependence of ferroelectric polarization in the double exchange model for manganites / I.V. Solovyev, **S.A. Nikolaev** // Phys.

Rev. B. – 2014. – V. 90, № 18. – P. 184425 1-13 (0.8 п.л./0.4п.л).

На автореферат поступило 7 положительных отзывов:

1. От **Гельчинского Бориса Рафаиловича**, д-ра физ.-мат. наук, заведующего лабораторией порошковых, композиционных и наноматериалов, ФГУН Институт металлургии УрО РАН (г. Екатеринбург). Содержит вопросы: 1) почему во второй главе не представлены результаты структурной оптимизации для орторомбического YMnO3 и их сравнение с экспериментальными данными? 2) при расчете орбитального магнитного момента используется метод ковариантной производной. Чем обусловлен данный выбор?

2. От **Мирзоева Александра Аминулаевича**, д-ра физ.-мат. наук, профессора Физического факультета ФГБОУ ВПО «Южно-Уральский государственный университет НИУ» (г. Челябинск). Замечания: недостатки автореферата, как это часто бывает, являются продолжением достоинств работы. Большой объем научных результатов диссертации, по-видимому, затруднили диссертанту обсуждение используемых им приближений, что сильно затрудняет оценку их достоверности. В тексте автореферата нет объяснений, почему использовалась модель двойного обмена и отброшен вклад суперобменных взаимодействий, как строились функции Ванье, от выбора которых существенно зависит точность полученных результатов, отсутствуют вычислительные детали проведенных расчетов (размер ячеек, параметры обрезания энергии, число к-точек).

3. От **Прудникова Владимира Васильевича**, д-ра физ.-мат. наук, профессора, заведующего кафедрой теоретической физики ФГБОУ ВПО «Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского» (г. Омск). Без замечаний.

4. От **Рубцова Алексея Николаевича**, д-ра физ.-мат. наук, профессора кафедры квантовой электроники физического факультета ФГБОУ ВО «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова» (г. Москва). Вопросы: 1) из каких соображений выбирались значения параметра

кулоновского взаимодействия при расчете колебательных спектров YMnO3? 2) в главе, посвященной расчету орбитальных магнитных моментов, делается вывод о потенциальной значимости учета эффектов пространственной нелокальности. В рамках каких схем это можно было сделать?

5. От **Никифорова Анатолия Елеферьевича,** д-ра физ.-мат. наук, профессора кафедры компьютерной физики Института Естественных наук ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» (г. Екатеринбург). В качестве замечания отмечена краткость изложения основных подходов в автореферате. Например, связь между спин-спиновыми конфигурациями и фононами должна включать либо спин-орбитальное взаимодействие, либо орбитально зависимое обменное взаимодействие. Уточнялось ли это в вычислительном пакете VASP, которым пользовался автор из автореферата не понятно.

6. От **Паршина Петра Петровича**, д-ра физ.-мат. наук, ведущего научного сотрудника Центра фундаментальных исследований Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» (г. Москва). Замечания: автореферат написан с большим количеством стилистических ошибок и смысловых погрешностей. 1. В первом абзаце на стр. 3. написано: «Данное направление имеет большие перспективы в информационных технологиях, которые стремятся к усовершенствованию... полупроводниковых устройств...». Технологии стремятся к усовершенствованию устройств? 2. На стр. 4, второй абзац, написано: «механизмы возникновения макроскопической поляризации... во многих рассматриваемых системах до конца не изучены и не имеют единой точки зрения». Жаль, что механизмы не смогли выработать единую точку зрения! 3. Стр. 10, второй абзац, написано: «Величина пика I находится в хорошем согласии с экспериментальным значением 495 см$^{-1}$». Приведенное экспериментальное значение энергии относится не к величине пика, а к его положению на оси энергии. 4. На рис.1 не указано, в каких единицах по вертикальной оси отложена плотность фононных состояний.

7. От **Соболева Валентина Викторовича**, д-ра физ.-мат. наук, член-корреспондента Академии наук Республики Молдова, заведующего отделом спектроскопии Института экспериментального естествознания ФГБОУ ВПО «Удмуртский государственный университет» (г. Ижевск). Без замечаний.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их большим научным вкладом и авторитетом, а также научной компетентностью в области первопринципного моделирования в физике конденсированного состояния.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

представлены анализ и подтверждение экспериментально полученных колебательных спектров в низкотемпературной фазе орторомбического YMnO3;

выявлены основные особенности колебательных спектров YMnO3 в зависимости от магнитной конфигурации в системе;

предложена схема анализа ферроэлектрической поляризации в сложных оксидах марганца на основе модели двойного обмена для эффективной модели Хаббарда в приближении Хартри-Фока;

получены аналитические выражения для ферроэлектрической поляризации в сложных оксидах марганца на основе теории возмущений по параметру внутриатомного обменного расщепления в модели двойного обмена;

показано, что возникновение ферроэлектрической поляризации в орторомбических манганитах связано с деформацией пространственно однородной магнитной конфигурации и установлением орбитального упорядочения антиферро-типа;

проведен анализ в рамках модели двойного обмена ферроэлектрических свойств в гексагональном YMnO3 и моноклинном BiMnO3;

разработан метод расчета орбитальных магнитных моментов в

рамках современной теории орбитальной намагниченности и приближения Хартри-Фока для эффективной модели Хаббарда;

показано, что поправки современной теории в рамках приближения Хартри-Фока вносят малый вклад в результирующий орбитальный магнитный момент в результате взаимного сокращения компонент при интегрировании в обратном пространстве, а орбитальный магнитный момент может быть рассчитан через стандартное определение матричных элементов оператора углового момента в базисе функций Ванье.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

представлен анализ из первых принципов колебательных спектров орторомбической фазы YMnO3;

в рамках механизма двойного обмена **дана физическая интерпретация** основных механизмов возникновения ферроэлектрических свойств в характерных представителях класса сложных оксидах марганца, проведены расчеты в рамках эффективных моделей и получены аналитические выражения для электрической поляризации;

показано, что модель двойного обмена может быть рассмотрена как ключевое приближение при описании основных электронных свойств манганитов;

предложен метод расчета орбитальных магнитных моментов, объединяющий современную теорию орбитальной намагниченности и первопринципные методы в рамках приближения Хартри-Фока для эффективной модели Хаббарда.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что: **определены** перспективы и **поставлены** задачи о важности более детального исследования связи электронных, магнитных и колебательных степеней свободы в мультиферроиках; **достигнуто** более глубокое понимание механизмов возникновения ферроэлектрической поляризации в манганитах, что может найти отражение в задачах управления и контроля поляризацией в несобственных

мультиферроиках; представленный метод расчета орбитальных магнитных моментов в рамках современной теории орбитальной намагниченности может послужить в дальнейшем стартовой точкой для описания орбитального магнетизма из первых принципов.

Оценка достоверности результатов исследования выявила: что результаты, представленные в работе, получены при помощи современных теоретических методов, таких как теория функционала плотности, современные теории электрической поляризации и орбитальной намагниченности; представленные результаты находятся в хорошем согласии с опубликованными экспериментальными и ранее проведенными теоретическими исследованиями по теме диссертации или смежных областей.

Личный вклад соискателя состоит в непосредственном участии в постановке задач, разработке методов и программ моделирования, получении, обработке и интерпретации результатов, подготовке основных публикаций по теме исследования. Соискателем проведены все расчеты электронных и колебательных спектров орторомбической фазы YMnO3, выполнены расчеты электрической поляризации в модели двойного обмена и приближении Хартри-Фока для всех представленных систем и получены аналитические выражения для поляризации по теории возмущений для гексагонального YMnO3 и моноклинного BiMnO3, разработан и реализован в коде метод расчета орбитальных магнитных моментов в рамках современной теории орбитальной намагниченности и приближения Хартри-Фока для эффективной модели Хаббарда.

На заседании 13 февраля 2015 г. диссертационный совет принял решение присудить Николаеву С.А. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 6 докторов наук по специальности,

рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 22 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 16 , против – 1, недействительных бюллетеней – нет.

И.о. председателя диссертационного совета, член совета (приказ ректора УрФУ от 12.02.2015 г., № 692/04) д-р физ.-мат. наук, проф. Огородников Игорь Николаевич

Ученый секретарь диссертационного совета, канд. физ.-мат. наук, доц. Ищенко Алексей Владимирович

13 февраля 2015 г.