

Отзыв научного консультанта  
на диссертационную работу **С.А. Николаева**  
**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

Диссертационная работа Николаева Сергея Алексеевича посвящена теоретическому исследованию особенностей колебательных спектров, ферроэлектрической поляризации и орбитального магнетизма в сложных оксидах марганца. В первой части данной работы представлено первопринципное исследование динамики решетки орторомбического манганита  $\text{YMnO}_3$ , в котором показано, что образование того или иного магнитного порядка в системе приводит к изменениям в колебательном спектре. Вторая часть диссертационной работы посвящена исследованию электрической поляризации в рамках механизма двойного обмена для эффективной модели Хаббарда. В ходе данной работы были получены важные результаты, объясняющие ферроэлектрическую активность в орторомбических и гексагональных манганитах, а также моноклинном  $\text{BiMnO}_3$ . Третья часть диссертационной работы направлена на разработку и реализацию формализма современной теории орбитальной намагниченности в рамках метода Хартри-Фока для эффективной модели Хаббарда, а также ее апробации на примере  $\text{LaMnO}_3$ . Основным результатом данного исследования состоит в том, что орбитальный магнитный момент можно рассчитать стандартным подходом через матричные элементы оператора углового момента, в то время как поправками современной теории можно пренебречь в виду их малости. Представленное исследование это первая серьезная попытка реализовать современную теорию орбитальной намагниченности в первопринципных методах.

Данные, представленные в диссертационной работе, получены автором лично или при непосредственном участии научного руководителя и консультанта. Диссертация Николаева С.А. написана на хорошем научном языке, а ее результаты опубликованы в высокорейтинговых зарубежных журналах, что отражает актуальность и научную новизну исследований.

В период обучения в аспирантуре и во время работы Николаев С.А. проявил себя самостоятельным специалистом в области теоретической физики конденсированного состояния, способным ставить и решать нетривиальные задачи.

