

## Отзыв

на автореферат диссертации Алексея Вячеславовича Ушакова

**«Магнитные структуры сульфидов и оксидов  
3d металлов со сложной кристаллической решеткой,  
исследованные в рамках теорий DFT и DFT + DMFT»**

представленной на соискание учёной степени

кандидата физико-математических наук

по специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния

Диссертационная работа А. В. Ушакова посвящена изучению магнитных свойств сложных многокомпонентных соединений 3d металлов, в частности, влияния на них искажений кристаллической решётки и орбитального упорядочения. В основе исследования лежат два подхода: расчёты электронных свойств в рамках теории функционала плотности и теории динамического среднего поля, а также модельные методы оценки обменных интегралов в модели Гейзенберга. Их применение позволяет оценить величины параметров обменного взаимодействия и изучить связь магнитных свойств системы с орбитальными степенями свободы и искажениями кристаллической решетки.

Объектами исследований являются делафоссито-подобные системы на основе Cr и Mn, сложные слоистые материалы с треугольными подрешетками Co и Ni и сульфид железа FeS.

Отмечу наиболее интересные конкретные результаты автора. В делафоссито-подобных системах установлена сильная зависимость параметров обменного взаимодействия от малых искажений решетки и слабого отклонения от стехиометрического состава. В слоистых материалах с треугольными подрешетками Co и Ni устанавливается сильное обменное взаимодействие вдоль выделенного направления в кристалле. При переходе в парамагнитное состояние оно исчезает, что приводит к появлению пошаговых магнитных переходов с ростом температуры. В сульфиде FeS под давлением также происходит переход в немагнитное состояние. В работе показывалось, что при этом одновременно с изменением спинового состояния Fe происходит коллективизация 3d электронов Fe. Все полученные результаты в рамках используемых методов объясняют формирование необычных магнитных свойств рассматриваемых соединений и могут быть полезными для будущего изучения подобных систем.

В то же время, хочу высказать несколько замечаний. Так, в автореферате не сказано, какой именно метод расчётов использовался для определения электронной структуры соединения  $\text{Cu}_{1+x}\text{Mn}_{1-x}\text{O}_2$  при слабом легировании Cu, а также предполагалось ли какое-либо упорядочение атомов замещения по отношению к кристаллической решётке базового

соединения. Кроме того, в тексте автореферата используются обозначения ионов разных элементов с указанием и без указания формального заряда, так, например, ион хрома может обозначаться как Cr, так и  $Cr^{3+}$ , хотя заряд иона одинаков в обоих случаях. Суммирование в выражении для Гамильтониана модели Гейзенберга, приведенного в выражении (1) на стр. 8 автореферата, проводится по каждой паре индексов  $i$  и  $j$  дважды, однако, поскольку в (1) отсутствует множитель «1/2», такое суммирование может привести к изменению нормировки обменных интегралов  $J_{ij}$ . Также в тексте автореферата не выдержано единое обозначение для методов расчётов, учитывающих корреляции (используются как LDA + U, так и LSDA + U или L(S)DA + U), а в приведенном списке публикаций автора в первой ссылке (PRB 87 014418) указанные в автореферате инициалы авторов отличаются от инициалов в оригинальной публикации. Однако, эти замечания являются техническими и никоим образом не искажают основной сути полученных результатов.

Сформулированные в диссертационной работе научные положения являются новыми, обоснованными и актуальными. Диссертация представляет собой оригинальное исследование и выполнена на высоком теоретическом уровне, а результаты опубликованы в ведущих международных журналах. Считаю, что диссертационная работа «Магнитные свойства сульфидов и оксидов 3d металлов со сложной кристаллической решеткой, исследованные в рамках теорий DFT и DFT + DMFT» обладает научной новизной и практической значимостью, а **А. В. Ушаков заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния.**

Член-корр. НАН Украины, д. ф.-м. н.,  
проф., зав. отделом вычислительной  
физики Института металлофизики  
им. Г. В. Курдюмова НАН Украины  
20.02.2018

В. Н. Антонов

Подпись В. Н. Антонова удостоверяю  
В. и. о. Ученого секретаря Института  
металлофизики им. Г. В. Курдюмова  
НАН Украины, д. ф.-м. н.  
22 февраля 2018 г.

В. В. Лизунов

с отзывом ознакомлен 15.03.2018

Ушаков А.В./