

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Скорнякова Сергея Львовича
**«Кулоновские корреляции и аномалии спектральных, магнитных и
решеточных свойств пниктидов и халькогенидов железа»**,
представленной на соискание ученой степени доктора физико-
математических наук по специальности
1.3.8. Физика конденсированного состояния

Интерес научного сообщества к слоистым пниктидам и халькогенидам железа не ослабевает на протяжении достаточно долгого времени благодаря ряду уникальных свойств, прежде всего таких как высокотемпературная сверхпроводимость и крайне необычная взаимосвязь между электронными, магнитными и решеточными степенями свободы в несверхпроводящем состоянии данных соединений. Ежегодно по тематике пниктидов и халькогенидов публикуется до нескольких сотен научных статей, что указывает на актуальность темы диссертации С.Л. Скорнякова.

Цель диссертационной работы С.Л. Скорнякова заключалась в исследовании аномального поведения спектральных, магнитных и решеточных свойств изучаемого класса систем. Для достижения поставленной цели автором были применены современные методы численного моделирования электронной структуры и показано, что необычное поведение физических свойств пниктидов и халькогенидов обусловлено кулоновскими корреляционными эффектами между электронами частично заполненных оболочек. Полученные результаты являются новыми и, более того, во многом уникальными, что не в последнюю очередь явилось следствием использования передового подхода, сочетающего метод функционала электронной плотности и теорию динамического среднего поля (DFT+DMFT).

В представленной диссертации содержится решение задач, имеющих принципиально важное значение для составления ясной физической картины

формирования спектральных, магнитных и решеточных свойств пниктидов и халькогенидов, а также взаимодействия соответствующих степеней свободы при внешних воздействиях. Например, автором работы было показано, что несмотря на металлический характер электронной структуры, кулоновское взаимодействие между валентными электронами не является пренебрежимо слабым и оказывается определяющим для понимания механизмов фазовых переходов под давлением. Была обоснована необходимость выделения пниктидов и халькогенидов в новый класс коррелированных систем. Также было впервые установлено, что особенности электронного спектра, сформированные корреляционными эффектами, объясняют аномалию температурного роста магнитной восприимчивости в парамагнитной фазе исследуемых соединений. Вся совокупность полученных результатов позволяет составить представление о важной роли корреляционных эффектов в формировании аномальных свойств пниктидов и халькогенидов и находится в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Диссертационная работа представляет собой глубокое всестороннее исследование, выполненное на уровне, соответствующего самым высоким стандартам современной физики конденсированного состояния. Полученные результаты всецело соответствуют поставленным целям и задачам, а выводы полностью обоснованы. Отдельно следует выделить высокий уровень публикаций по теме диссертации и представление результатов исследований научному сообществу на большом числе российских и международных конференций.

Ознакомление с авторефератом и публикациями С.Л. Скорнякова позволяет утверждать, что диссертация **«Кулоновские корреляции и аномалии спектральных, магнитных и решеточных свойств пниктидов и халькогенидов железа»** представляет собой научно-квалификационную работу, полностью отвечающую критериям, сформулированным в «Положении о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 № 842

(ред. от 11.09.2021). Считаю, что автор работы — Скорняков Сергей Львович — является высококлассным специалистом и заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Ведущий научный сотрудник
Лаборатории квантовой химии
и спектроскопии им. А.Л. Ивановского
ИХТТ УрО РАН, к.ф.-м.н.

 И.Р. Шеин

*Подпись Ивана И. Р. удостоверяю
главного специалиста по персоналу*

Директор ИХТТ УрО РАН,
заведующий Лабораторией квантовой
химии и спектроскопии
им. А.Л. Ивановского, д.х.н.


М.В. Кузнецов

Почтовый адрес: 620990, г. Екатеринбург
ул. Первомайская 91, ИХТТ УрО РАН
e-mail: shein@ihim.uran.ru

30 июня 2022 г.

С отзывом ознакомлен

07.07.2022 г.

С.Л. Скорняков