



Федеральное государственное
бюджетное учреждение науки
ИНСТИТУТ ЭЛЕКТРОФИЗИКИ
Уральского отделения
Российской академии наук
(ИЭФ УрО РАН)

620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 106
Тел. (343) 267-87-96 Факс (343) 267-87-94

ОКПО 04839716 ОГРН 1026604936929
ИНН/КПП 6660007557/667101001

18.07.2022 № 16346 -1256-177

на № _____ от _____

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор
ФГБУН ИЭФ УрО РАН
член-корреспондент РАН
С.А. Чайковский

18 июля 2022г.

ОТЗЫВ

ведущей организации Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института электрофизики Уральского отделения Российской академии наук (ИЭФ УрО РАН) на диссертационную работу Скорнякова Сергея Львовича **«Кулоновские корреляции и аномалии спектральных, магнитных и решеточных свойств пниктидов и халькогенидов железа»**, представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Актуальность темы диссертации.

Диссертационная работа С.Л. Скорнякова посвящена теоретическому исследованию влияния локальных динамических кулоновских корреляционных эффектов на формирование аномалий спектральных, магнитных и решеточных свойств представителей основных классов слоистых пниктидов и халькогенидов железа — новых высокотемпературных сверхпроводников, отличных от ВТСП купратов. Актуальность темы диссертационной работы С.Л. Скорнякова не вызывает сомнений и обусловлена, во-первых, тем, что пниктиды и халькогениды железа находятся в фокусе внимания современной физики конденсированного состояния, а во-вторых невозможностью объяснения аномального поведения ряда физических свойств данных систем в рамках стандартных зонных подходов, не учитывающих кулоновские корреляционные эффекты между электронами частично заполненных оболочек.

Структура и основное содержание работы.

Диссертационная работа состоит из введения, восьми глав и заключения. Общий объем диссертации составляет 331 страницу, включая 11 таблиц и 81 рисунок. Список литературы содержит 263 наименования.

Во **введении** сформулированы основные цели работы, обоснована актуальность темы диссертации, обсуждена теоретическая и практическая значимость результатов, приведены основные положения, выносимые на защиту, указан личный вклад автора.

В **первой главе** изложены основы современных теоретических методик исследования электронной структуры реальных физических систем, примененных для получения основных результатов диссертационной работы. Особое внимание уделено вопросу учета кулоновских корреляционных эффектов в реальных соединениях при конечных температурах в рамках теории динамического среднего поля (DMFT) и связке DMFT с зонными методами, основанными на теории функционала электронной плотности (DFT).

Во **второй главе** приведены результаты исследования спектральных и магнитных свойств системы LaFeAsO в парамагнитной фазе. Продемонстрировано, что динамические кулоновские корреляции между электронами частично заполненных оболочек оказывают существенное влияние на формирование спектра низкоэнергетических возбуждений, при этом система LaFeAsO не находится на границе перехода металл-диэлектрик и проявляет свойства коррелированного металла. Представлены результаты расчета температурной зависимости магнитной восприимчивости, которая, в полном согласии с экспериментом, является линейной в низкотемпературной области. Для интерпретации особенностей температурного поведения восприимчивости предложена микроскопическая модель, объясняющая аномалии магнитного отклика возбуждением состояний, формирующих узкие пики спектральной функции под уровнем Ферми. В заключительной части главы анализируется влияние замещения лантана неодимом на спектральные свойства LaFeAsO .

В **третьей главе** изложены результаты исследования спектральных и магнитных свойств соединений BaFe_2As_2 и KFe_2As_2 в парамагнитной фазе. Установлено, что кулоновские корреляции в $3d$ оболочке железа данных систем не вызывают формирования хаббардовских зон, а рассчитанные интегральные и разрешенные по волновому вектору спектральные функции находятся в хорошем согласии с фотоэмиссионными спектрами. Представлены результаты расчета температурной зависимости магнитной восприимчивости BaFe_2As_2 и KFe_2As_2 , которые хорошо согласуются с экспериментом. Путем комплексного анализа данных первопринципных многозонных и модельных однозонных расчетов устанавливается однозначная связь между видом кривой температурной зависимости магнитного отклика и формой спектральной функции в окрестности энергии Ферми, что подтверждает справедливость микроскопической модели поведения восприимчивости и указывает на общность механизма формирования аномалий в температурной зависимости магнитного отклика систем BaFe_2As_2 , KFe_2As_2 и LaFeAsO .

В **четвертой главе** анализируется влияние кулоновских корреляций на электронную структуру систем LaFePO и LaNiPO . Для соединения LaFePO продемонстрировано, что учет локальных динамических корреляционных эффектов приводит к перенормировкам спектральных функций, рассчитываемых в рамках приближения локальной электронной плотности, при этом не происходит формирование хаббардовских зон, а результаты расчета хорошо согласуются с экспериментом. Путем сравнения спектральных свойств изоструктурных систем LaFePO и LaNiPO показано, что, в согласии с данными рентгеновской эмиссионной спектроскопии, замещение железа никелем приводит к усилению корреляционных эффектов и формированию нижней хаббардовской зоны.

В **пятой главе** обсуждаются особенности электронной структуры, присущие соединению LiFeAs и не характерные для родительских систем других представителей ВТСП пниктидов и халькогенидов железа. Приводятся результаты расчетов спектральных свойств, получаемые при учете локальных динамических кулоновских корреляций,

находящихся в количественном согласии с фотоэмиссионными спектрами с угловым разрешением. Показано, что слабый нестинг поверхности Ферми, регистрируемый экспериментально и являющийся отличительной особенностью LiFeAs , может быть объяснен выраженной орбитальной селективностью корреляционных эффектов в $3d$ оболочке железа.

В **шестой главе** исследуются спектральные и магнитные свойства серии соединений $\text{NaFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$. Показано, что на качественном уровне переход металл-диэлектрик при замещении железа медью может быть объяснен при учете кулоновских корреляционных эффектов в рамках модели сдвига уровня Ферми, а описание особенностей распределения спектрального веса в зоне Бриллюэна в случае $x=0.5$ требует явного включения атомов меди в элементарную ячейку.

В **седьмой главе** изучена взаимосвязь кулоновских корреляций со спектральными, магнитными и решеточными свойствами базовой системы ВТСП соединений на основе железа FeSe . Приводятся данные структурной оптимизации и показано, что согласие рассчитываемого объема элементарной ячейки с экспериментом возможно только при учете корреляционного вклада во внутреннюю энергию. Продемонстрировано, что расширение элементарной ячейки приводит к переходу Лифшица, который сопровождается изменением симметрии спиновых флуктуаций, и связан с пересечением уровня Ферми особенностью Ван Хофа в окрестности точки M зоны Бриллюэна. Показано, что при уменьшении объема ячейки также происходит переход Лифшица, сопровождающийся ослаблением двумерного характера поверхности Ферми, а также уменьшение амплитуды спиновых флуктуаций.

В **восьмой главе** приводятся результаты исследования спектральных, магнитных и структурных свойств соединения FeS и обсуждается их изменение при расширении элементарной ячейки. Показано, что экспериментально определенное значение объема ячейки не может быть получено без учета энергии кулоновских корреляций. Продемонстрировано, что при увеличении объема элементарной ячейки происходит изоструктурное превращение, сопровождаемое переходом Лифшица. Сделаны выводы об определяющей роли положения особенности Ван Хофа относительно уровня Ферми для понимания механизмов фазовых переходов в квазидвумерных ВТСП соединениях на основе железа.

В **заключении** перечислены основные результаты исследований, представленных в диссертационной работе.

Научная новизна результатов диссертационной работы.

Можно выделить следующие новые и наиболее важные результаты диссертационной работы:

1. Разработан и реализован программный комплекс обработки данных расчета методом DFT+DMFT. Созданный пакет программ позволяет анализировать влияние корреляционных эффектов на спектральные характеристики (поверхность Ферми, интегральные и разрешенные по волновому вектору спектральные функции), а также симметрию спиновых флуктуаций.
2. Впервые показано, что учет корреляционных эффектов в рамках подхода DFT+DMFT позволяет получить количественное описание фотоэмиссионных экспериментов с угловым разрешением основных классов родительских соединений ВТСП систем на основе железа.

3. Для объяснения особенностей спектральных свойств ВТСП пниктидов железа показана возможность реализации ситуации состояния с 'промежуточной' силой корреляционных эффектов, когда большие величины перенормировки эффективной массы квазичастиц сосуществуют с отсутствием переноса спектрального веса в хаббардовские зоны.
4. Объяснена слабая выраженность нестинга поверхности Ферми в соединении LiFeAs . Показано, что формирование данной особенности электронной структуры обусловлено сильной орбитальной селективностью корреляционных эффектов в $3d$ оболочке железа.
5. Дано теоретическое описание эволюции спектральных и магнитных свойств серии $\text{NaFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$. Показано, что учет кулоновских корреляционных эффектов позволяет объяснить переход Мотта металл-диэлектрик при $x=0.5$.
6. Впервые показано, что температурный рост магнитной восприимчивости в системах LaFeAsO и BaFe_2As_2 может быть описан в рамках одноузельного подхода DFT+DMFT. Продемонстрировано, что данное явление является следствием термического возбуждения состояний, формирующих узкие пики спектральной функции под уровнем Ферми, и не требует для своего объяснения учета межузельных флуктуаций.
7. Установлено, что в соединении KFe_2As_2 , в отличие от BaFe_2As_2 и LaFeAsO , корреляционные эффекты являются более выраженными, демонстрируют большую орбитальную селективность и оказывают большее влияние на спектральные свойства. Показано, что это объясняет отличия температурной зависимости магнитного отклика KFe_2As_2 от других представителей пниктидов железа.
8. Предложена микроскопическая модель, объясняющая условия реализации режимов температурного роста и убывания магнитной восприимчивости в системах с узкими пиками плотности состояний в окрестности уровня Ферми.
9. Показано, что корректное описание структурных параметров халькогенидов FeSe и FeS для нормального и повышенного давления возможно только при учете корреляционной поправки к внутренней энергии.
10. Предсказано, что увеличение объема ячейки в системах FeSe и FeS приводит к аномальному поведению решеточных, спектральных и магнитных свойств, связанному с переходом Лифшица, перестройке симметрии спиновых флуктуаций и орбитально-селективным изменениям перенормировок эффективной массы квазичастиц.

Достоверность результатов и обоснованность выводов диссертационной работы обеспечивается применением широко апробированных методов расчета спектральных, магнитных и решеточных свойств систем на основе переходных металлов, обоснованным выбором моделей и приближений, а также согласием рассчитанных физических характеристик с экспериментальными данными.

Теоретическая и практическая значимость полученных результатов.

Значимость результатов диссертационной работы заключается в том, что выполненные исследования позволили выявить микроскопические механизмы формирования необычных физических свойств основных классов пниктидов и халькогенидов железа. Полученная информация может использоваться для обоснованного выбора параметров моделей, описывающих свойства пниктидов и халькогенидов, а также поиска путей направленного изменения характеристик данных систем.

Замечания по диссертационной работе.

1. Представленные автором результаты расчетов распределения спектрального веса на уровне Ферми, полученные в подходе динамического среднего поля для системы FeSe (правая часть Рисунка 7.7), указывают на наличие зависимости размытия различных участков поверхности Ферми от направления в обратном пространстве. В то же время, использованный метод учета кулоновских корреляций по построению является локальным, в связи с чем необходимо уточнить причину возникновения упомянутой зависимости спектральной функции от волнового вектора.

2. Рассчитанная температурная зависимость магнитной восприимчивости соединений LaFeAsO и BaFe₂As₂ (Рисунок 2.4 и Рисунок 3.4) в согласии с экспериментом имеет возрастающий участок. Хотелось бы услышать комментарии относительно причин недооценки наклона данного участка для обеих исследованных систем.

3. Для интерпретации результатов расчета вкладов в температурную зависимость магнитной восприимчивости системы BaFe₂As₂ от наименее коррелированных состояний железа было использовано приближение случайных фаз. По какой причине результатом применения приближения случайных фаз является только масштабирование кривых, полученных в приближении петлевой диаграммы, а не качественное изменение их формы (Рисунок 3.5 и Рисунок 3.9)?

4. Результаты расчетов зонной структуры соединения FeSe указывают, что при увеличении объема элементарной ячейки происходит локализация спектрального веса на энергиях порядка -0.1 эВ относительно уровня Ферми, что, в свою очередь, должно сопровождаться появлением пика в спектральной функции в соответствующем энергетическом окне. Наблюдается ли такое поведение, и если да, то орбитали какой симметрии дают вклад в данный пик?

Отмеченные замечания не затрагивают основных выводов и результатов диссертации, не снижают их ценности и не ставят под сомнение значимость работы в целом.

Заключение (выводы о работе).

Диссертация С.Л. Скорнякова является научно-квалификационной работой, в которой был впервые решен ряд важных и интересных физических проблем, объединенных темой учета кулоновских корреляционных эффектов в новом классе сверхпроводящих материалов — пниктидов и халькогенидов железа. Для этого применялись самые передовые теоретические и вычислительные методики моделирования спектральных, магнитных и решеточных свойств реальных систем. Автором было убедительно продемонстрировано, что корреляционные эффекты являются определяющим фактором для понимания причин аномального поведения свойств пниктидов и халькогенидов железа.


Диссертационная работа С.Л. Скорнякова представляет собой завершённое исследование и обладает внутренним единством. Основные результаты работы полно и правильно отражены в автореферате.

Диссертация «Кулоновские корреляции и аномалии спектральных, магнитных и решеточных свойств пниктидов и халькогенидов железа» полностью соответствует всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор — Скорняков Сергей Львович — заслуживает

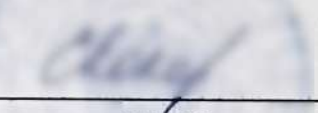
присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.


Доклад С.Л. Скорнякова по материалам его диссертационной работы был заслушан на расширенном научном семинаре лаборатории теоретической физики ИЭФ УрО РАН (протокол №2 от 08.06.2022 г.). На семинаре присутствовало 12 человек, из них 4 доктора наук и 4 кандидата наук. Отзыв обсужден и одобрен участниками научного семинара. Отзыв подготовлен доктором физико-математических наук, член-корреспондентом РАН, главным научным сотрудником лаборатории теоретической физики ИЭФ УрО РАН Некрасовым Игорем Александровичем.

Член-корреспондент РАН,
доктор физ.-мат. наук по специальности
1.3.8. Физика конденсированного состояния, главный
научный сотрудник лаборатории теоретической физики
ИЭФ УрО РАН


И.А. Некрасов

Подпись И.А. Некрасова заверяю
Ученый секретарь ИЭФ УрО РАН
кандидат физ.-мат. наук


Е.Е. Кокорина

Отзывом ознакомлен
Скорняков С.Л.  23.07.2022

Сведения о ведущей организации

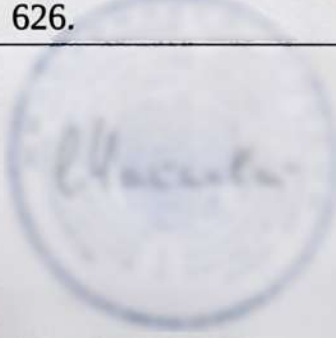
по докторской диссертации Скорнякова С.Л. «Кулоновские корреляции и аномалии спектральных, магнитных и решеточных свойств пниктидов и халькогенидов железа», по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Полное наименование организации	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт электрофизики Уральское отделение Российской академии наук
Сокращенное наименование	ИЭФ УрО РАН
Почтовый индекс, адрес организации	620016, Екатеринбург, ул. Амундсена, 106
Адрес официального сайта в сети «Интернет»	http://www.iep.uran.ru/
Телефон	(343) 267-87-96
Адрес электронной почты	admin@iep.uran.ru
Ф.И.О. руководителя организации	Чайковский Станислав Анатольевич
Ученая степень, ученое звание	Член-корреспондент РАН, д.ф.-м.н.

Список основных публикаций
работников ведущей организации по
теме диссертации в рецензируемых
научных изданиях за последние 5 лет

1. Nekrasov I. A. et al. Quantitative Comparison of LDA + DMFT and ARPES Spectral Functions // JETP Letters. – 2021. – V. 113. – P. 115-119.
2. Korshunov M. M. et al. Band Structure of Tungsten Oxide $W_{20}O_{58}$ with Ideal Octahedra // JETP Letters. – 2021. – V. 113. – P. 57-60.
3. Slobodchikov A. A. et al. Simplicity Out of Complexity: Band Structure for $W_{20}O_{58}$ Superconductor // Nanomaterials. – 2021. – V. 11. – P. 97.
4. Bezotosnyi P. I. et al. Electronic band structure and superconducting properties of SnAs // Physical Review B. – 2019. – V. 100. – P. 184514
5. Nekrasov I. A. et al. Electronic structure of FeSe monolayer superconductors: shallow bands and correlations // Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 2018. – V. 126. – P. 485-496.
6. Nekrasov I. A. et al. Hidden Fermi Surface in $K_xFe_{2-y}Se_2$: LDA+ DMFT Study // JETP Letters. – 2018. – V. 108. – P. 623-626.

Директор ИЭФ УрО РАН
член-корреспондент РАН, д.ф.м.н.


С.А. Чайковский