

Отзыв

официального оппонента 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. Исследование свойств коррелированных многоэлектронных систем является важнейшим направлением современной теоретической физики конденсированного состояния. Учет взаимодействий, обусловленных локализованными электронами, позволяет объяснить ряд необычных явлений, например природу диэлектрического состояния веществ с частично заполненными зонами, относительную стабильность структурных фаз, переход металл-диэлектрик, а также описать структурные и магнитные превращения при изменении внешних условий и легировании.

Корреляционные эффекты между валентными электронами принципиально важны для понимания фазовых диаграмм многих соединений железа. Не составляют исключение и исследуемые в диссертационной работе С.Л. Скорнякова пниктиды и халькогениды. Данные системы образуют новый класс высокотемпературных сверхпроводников, структурно родственных ВТСП-купратам, и реализующих отличный от электрон-фононного механизм образования куперовских пар, что на протяжении более чем десяти лет обеспечивает неугасающий интерес научного сообщества. Кроме этого, внимание исследователей привлекают разнообразные неустойчивости, ассоциируемые с крайне необычным поведением спектральных, магнитных и структурных свойств нормального состояния пниктидов и халькогенидов, не находящего объяснения в рамках картины коллективизированных электронов и стандартных зонных методик. В этой связи, тема диссертационной работы С.Л. Скорнякова, посвященной объяснению аномального поведения пниктидов и халькогенидов железа в рамках передовых подходов, учитывающих кулоновские корреляции, несомненно является актуальной.

В рамках работы над заявленной тематикой, автором поставлена **цель**, заключающаяся в поиске взаимосвязи между кулоновскими корреляционными эффектами в 3d оболочке и аномалиями спектральных, магнитных и решеточных свойств представителей основных классов пниктидов и халькогенидов железа.

Для достижения поставленной цели сформулированы следующие физические **задачи**:

1. Объяснить сосуществование больших перенормировок зонной структуры, получаемых из сравнения фотоэмиссионных спектров с результатами расчетов методом функционала электронной плотности, и отсутствие признаков формирования хаббардовских зон.

2. Установить необходимость учета кулоновских корреляционных эффектов для объяснения спектральных свойств пниктидов и халькогенидов железа.
3. Объяснить причины аномального температурного роста магнитной восприимчивости пниктидов и халькогенидов железа в парамагнитной фазе.
4. Определить роль кулоновских корреляционных эффектов для корректного описания структурных параметров, спектральных и магнитных свойств пниктидов и халькогенидов железа для нормального и повышенного давления.
5. Исследовать природу фазовых переходов в пниктидах и халькогенидах железа при легировании.

Структура диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, восьми глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений, списка работ автора по теме диссертации и списка цитируемой литературы. Общий объем диссертации составляет 331 страницу, включая 11 таблиц и 81 рисунок. Список цитируемой литературы содержит ссылки на 263 источника.

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертации и ее научная новизна, сформулированы цель и задачи работы, описаны объекты исследования, приведены основные положения, выносимые на защиту, отмечен личный вклад автора.

В **первой главе** приведено подробное описание современных подходов моделирования электронной структуры реальных физических систем. Изложены основы теории функционала электронной плотности (DFT), а также основных приближений, позволяющих использовать данный подход на практике. Особое внимание уделено применению теории динамического среднего поля (DMFT) для учета локальных динамических кулоновских корреляционных эффектов в реальных веществах (метод DFT+DMFT). Детально разобраны две схемы метода квантового Монте-Карло для решения примесной задачи DMFT.

Вторая глава посвящена исследованию спектральных и магнитных свойств системы LaFeAsO. Представлены результаты расчетов спектральных свойств методом DFT+DMFT, на основании которых сделан вывод о существенной роли орбитально-селективных корреляционных эффектов. Показано, что соединение LaFeAsO является коррелированным металлом, не находящимся на границе перехода металл-диэлектрик. Автором диссертации впервые продемонстрировано, что температурная зависимость магнитной восприимчивости LaFeAsO, рассчитанная с учетом корреляционных эффектов, имеет линейный участок, что согласуется с экспериментом. Для интерпретации данной аномалии восприимчивости предложена микроскопическая модель, объясняющая аномалии магнитного отклика возбуждением состояний, формирующих узкие пики спектральной функции под уровнем Ферми. В заключительной части главы проанализировано влияние замещения лантана неодимом на спектральные свойства LaFeAsO.

В **третьей главе** изложены результаты исследования влияния кулоновских корреляционных эффектов на спектральные и магнитные свойства соединений BaFe₂As₂ и KFe₂As₂. Показано, что корреляционные эффекты в 3d оболочке данных систем не являются слабыми, и их учет важен для

описания фотоэмиссионных спектров. Установлено, что перенормировки спектральных функций в окрестности энергии Ферми, вызванные локальным кулоновским взаимодействием, не приводят к формированию хаббардовских зон. Сделанные выводы обобщены на других представителей ВТСП систем на основе железа и обоснована необходимость выделения данных веществ в класс промежуточно-коррелированных соединений.

Представленные результаты расчета температурной зависимости магнитной восприимчивости BaFe_2As_2 и KFe_2As_2 хорошо описывают экспериментальные данные. Устанавливается связь между видом кривой температурной зависимости магнитного отклика и формой спектральной функции в окрестности энергии Ферми. Делается вывод о справедливости микроскопической модели поведения восприимчивости, предложенной в Главе 2, и общности 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 явным образом продемонстрирована возможность сосуществования больших перенормировок квазичастичной массы и отсутствия участков спектральной функции, соответствующих хаббардовским зонам. В противоположность этому, в случае оксипниктида никеля LaNiPO показано, что учет корреляционных эффектов в 3d оболочке приводит не только к перенормировке спектральных функций, рассчитываемых методом DFT, но также позволяет описать вытеснение спектрального веса из окрестности энергии Ферми в нижнюю хаббардовскую зону. Для каждого исследованного соединения рассчитанные спектральные функции находятся в хорошем согласии с данными фотоэмиссионной спектроскопии.

В **пятой главе** исследуются особенности электронной структуры, присущие соединению LiFeAs и не регистрируемые в других представителях родительских систем пниктидов железа. Показано, что спектральные функции, рассчитываемые в рамках DFT+DMFT, хорошо описывают фотоэмиссионные спектры с угловым разрешением, в частности, в согласии с экспериментом, указывают на характерную особенность электронной структуры LiFeAs - слабый нестинг между электронными и дырочными карманами поверхности Ферми. Установлено, что причина ослабления нестинга заключается в сильной орбитальной селективности кулоновских корреляций, приводящих к неравномерностям сдвигов и перенормировок зонной структуры, рассчитываемой методом DFT.

В **шестой главе** приведены результаты исследований влияния замещения железа медью на спектральные и магнитные свойства серии $\text{NaFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$. Показано, что учет легирования в модели сдвига уровня Ферми, при условии использования подхода DFT+DMFT, позволяет описать тенденцию к орбитально-селективной локализации электронов, а также дает качественно правильное диэлектрическое решение для $x=0.5$. Установлено, что количественное согласие рассчитываемых спектральных функций с экспериментом при $x=0.5$ достигается только путем построения соответствующей сверхъядчейки и учета корреляционных эффектов в 3d оболочке

железа. Продемонстрировано, что обменные параметры модели Гайзенберга, рассчитываемые в рамках DFT+DMFT для магнитно-упорядоченного состояния NaFeAs и $\text{NaFe}_{0.5}\text{Cu}_{0.5}\text{As}$, хорошо согласуются с данными экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов.

В **седьмой главе** изучена взаимосвязь кулоновских корреляций со спектральными, магнитными и решеточными свойствами простейшего ВТСП соединения на основе железа FeSe . Автором показано, что оптимизация объема элементарной ячейки FeSe дает корректный результат только при учете корреляционной поправки к внутренней энергии. Центральным результатом главы является демонстрация существования изоструктурного перехода первого рода при расширении элементарной ячейки. Установлено, что данный переход сопровождается усилением орбитальной селективности корреляционных эффектов и переходом Лифшица, связанным с пересечением уровня Ферми особенностью Ван Хова. Показано, что данное поведение реализуется только при учете кулоновских корреляционных эффектов. Дополнительно установлено, учет кулоновских корреляций принципиально важен для объяснения экспериментально регистрируемого изменения поверхности Ферми при сжатии ячейки, а также описания зависимости структурных параметров от давления.

В **восьмой главе** описаны результаты исследования спектральных, магнитных и структурных свойств соединения FeS . Путем расчета зависимости внутренней энергии от объема ячейки и координаты атома серы методом DFT+DMFT показано, что в FeS , аналогично FeSe , при расширении ячейки происходит изоструктурное фазовое превращение, сопровождаемое переходом Лифшица, изменением симметрии спиновых флуктуаций, усилением локальных магнитных моментов и орбитальной селективности корреляционных эффектов. Ввиду общности изменения спектральных, магнитных и решеточных свойств систем FeS и FeSe при расширении ячейки и корреляции положения особенности Ван Хова относительно уровня Ферми с величиной критического давления, необходимого для достижения границы фазового перехода, сделан вывод об определяющей роли положения особенности Ван Хова для понимания механизмов фазовых переходов в квазидвумерных ВТСП соединениях на основе железа.

Наиболее важные результаты и выводы диссертационного исследования сформулированы в **заключении**.

Достоверность результатов и обоснованность выводов диссертации следует из хорошего согласия с экспериментальными данными, и дополнительно подкрепляется применением передовых теоретических подходов учета кулоновских корреляционных эффектов в реальных физических системах.

Основное содержание диссертации отражено в 20 работах, опубликованных в ведущих рецензируемых изданиях по проблематике теоретической и вычислительной физики конденсированного состояния, входящих в Перечень ВАК. Ознакомление с текстом диссертации и публикациями автора позволяет сделать вывод о том, что **поставленная цель достигнута, а задачи - решены**.

В качестве основных достоинств диссертации хотелось бы особенно отметить важность и актуальность решаемых задач, а также качественное физическое объяснение многим полученным численным результатам. Еще порадовал удобный для чтения стиль диссертации, в частности, подробное описание методов расчета и литературный обзор к каждой главе про особенности изучаемых соединений.

Вопросы и замечания по диссертационной работе Скорнякова С.Л.:

Хотя метод DMFT успешно зарекомендовал себя в ряде задач, где никакие другие известные методы не работают, иногда он дает не правильные результаты, что связано либо с ошибочностью выбранных параметров расчета, либо с погрешностями самой схемы вычислений, поскольку DMFT содержит ряд существенных приближений. Поэтому любое использование DMFT является также проверкой метода. С этим связаны первые 2 вопроса.

1. В качестве пожелания к диссертации, хотелось бы видеть более подробное обсуждение влияния основных приближений DMFT на результаты работы. Например, на что влияет приближение о локальности СЭЧ Σ , и как это может отразиться на полученных качественных и количественных результатах? Не заложено ли дополнительных приближений в условии бесконечного координационного числа, кроме локальности Σ ? Насколько важны другие приближения?

2. Чтобы результаты, полученные в рамках DMFT, выглядели более убедительными, хотелось бы лучше понимать выбор «произвольных» параметров в схеме расчета, таких как вычитаемой энергии кулоновского взаимодействия N_{dc} , ширины энергетического интервала $[E_1, E_2]$ в процедуре проектирования, выбранных хаббардовского и хундовского параметров U и J , и др. Иначе может возникнуть впечатление, что полученное согласие с экспериментом является случайным результатом удачно выбранных параметров расчета. Например, почему для LaNiPO выбрано $U=8$ эВ, в то время для других железосодержащих сверхпроводников, включая изоструктурный LaFeAsO , параметр U находится далеко от этого значения, в достаточно узком интервале 3.5-4 эВ.

3. На рис. 2.5 показано, что методы расчета магнитной восприимчивости как прямой отклик на магнитное поле (верхняя панель) и через свертку функций Грина с теми же СЭЧ (нижняя панель) очень сильно отличаются (более чем в 5 раз). В диссертации автор предположил, что это различие связано с пренебрежением вершинных поправок. Такое объяснение возможно, но требует дополнительного обоснования. Например, можно было бы оценить вклад лестничных диаграмм и показать, что он действительно так велик.

4. В начале раздела 2.5 написано: «Описанные выше отличия электронной структуры LaFeAsO и NdFeAsO находятся вне слоя $k_B T$ для температур, порядка T_c , и, следовательно, не могут быть причиной различного поведения систем в области низких температур.» Но даже для

самой T_c важна область порядка температуры Дебая (a не T_c) вблизи уровня Ферми. Поэтому различия в положении пиков плотности состояний могут оказать заметное влияние.

5. Имеется небольшое количество опечаток. Например, в формуле (1.2.5) перед знаком суммы пропущен второй знак равенства. На стр. 169-170 написано «электронные карманы оказываются повернутыми относительно дырочных на угол $\pi/2$ », хотя из рис. 5.3 видно, что это угол $\pi/4$. На рис. 4.2 не указаны единицы величины $\text{Re}\Sigma$.

Указанные замечания не снижают общую высокую оценку диссертации.

На основании изложенного выше считаю, что диссертационная работа «Кулоновские корреляции и аномалии спектральных, магнитных и решеточных свойств пниктидов и халькогенидов железа» представляет собой завершённое исследование, вносящее существенный вклад в понимание роли кулоновских корреляционных эффектов в формирование аномальных свойств пниктидов и халькогенидов железа. Диссертация удовлетворяет всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней» утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 № 842 (ред. от 11.09.2021), предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор, Сергей Львович Скорняков, заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Автор отзыва согласен на обработку персональных данных

Официальный оппонент,
доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник,
Федерального государственного бюджетного
учреждения науки «Институт теоретической
физики им. Л.Д. Ландау Российской
академии наук»


Григорьев Павел Дмитриевич

142432, МО., г. Черноголовка, просп. Академика Семенова, д. 1А

e-mail: grigorev@itp.ac.ru


тел. +7 495 702-93-17

дата составления отзыва «19» сентября 2022 г.

Подпись Григорьева П.Д. заверяю:

Ученый секретарь ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, к.х.н.

 С.А. Крашаков

С ОТЗЫВОМ ОЗНАКОМЛЕН
Скорняков С.А.  27.09.2022

Сведения об официальном оппоненте

ФИО: Григорьев Павел Дмитриевич

Ученая степень: доктор физико-математических наук, специальность 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Полное наименование организации: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН»

Должность: старший научный сотрудник

Почтовый адрес: 142432, МО., г. Черноголовка, просп. Академика Семенова, д. 1А, ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН

Телефон: +7 495 702-93-17

e-mail: grigorev@itp.ac.ru

Публикации в сфере исследований, которым посвящена диссертация:

1. Interplay between band crossing and charge density wave instabilities [Text] / P.D. Grigoriev, A.A. Sinchenko, P.A. Vorobyev, A. Hadj-Azzem, P. Lejay, A. Bosak, P. Monceau // Phys. Rev. B. — 2019. — Vol. 100. — P. 081109(5).
2. Григорьев, П.Д. О природе магнитных осцилляций в высокотемпературных сверхпроводниках YBCO [Текст] / П.Д. Григорьев, Т.И. Могилюк, А. Хамзаулы // Физика твердого тела. — 2019. — Т. 61. — С. 1579-1584.
3. Self-consistent and Maxwell approximations to describe the excess conductivity anisotropy in FeSe above superconducting transition temperature [Text] / К.К. Kesharpu, P.D. Grigoriev, D.I. Lazeva, T.I. Mogilyuk // J. Phys.: Conf. Ser. — 2019. — Vol. 1238. — P. 012010(6).
4. Mogilyuk, T.I. Magnetic oscillations of in-plane conductivity in quasi-two-dimensional metals [Text] / T.I. Mogilyuk, P.D. Grigoriev // Phys. Rev. B. — 2018. — Vol. 98. — P. 045118(12).
5. Gossamer high-temperature bulk superconductivity in FeSe [Text] / A.A. Sinchenko, P.D. Grigoriev, A.P. Orlov, A.V. Frolov, A. Shakin, D.A. Chareev, O.S. Volkova, A.N. Vasiliev // Phys. Rev. B. — 2017. — Vol. 95. — P. 165120(6).
6. Grigoriev, P.D. Magnetic oscillations measure interlayer coupling in cuprate superconductors [Text] / P.D. Grigoriev, T. Ziman // Phys. Rev. B — 2017. — Vol. 96. — P. 165110(11).
7. Grigoriev, P.D. Slow quantum oscillations without fine-grained Fermi surface reconstruction in cuprate superconductors [Text] / P.D. Grigoriev, T. Ziman // Письма в ЖЭТФ. — 2017. — Т. 106. — С. 349-350.
8. Grigoriev, P.D. Slow in-plane magnetoresistance oscillations in multiband quasi-two-dimensional metals [Text] / P.D. Grigoriev, M.M. Korshunov, T.I. Mogilyuk // J. Supercond. Nov. Magn. — 2016. — Vol. 29. — P. 1127-1132.
9. Grigoriev, P.D. Conductivity anisotropy helps to reveal the microscopic structure of a density wave at imperfect nesting [Text] / P.D. Grigoriev, S.S. Kostenko // Physica B. — 2015. — Vol. 460. — P. 26-29.

10. Grigoriev, P.D. Longitudinal interlayer magnetoresistance in strongly anisotropic quasi-two-dimensional metals [Text] / P.D. Grigoriev // Phys. Rev. B. — 2013. — Vol. 88. — P. 054415(6).

Ученый секретарь ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, к.х.н. _____

С.А. Крашаков

«19» сентября 2022 г.

