

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.133.01,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ИНСТИТУТА ФИЗИКИ
МЕТАЛЛОВ ИМЕНИ М.Н. МИХЕЕВА УРАЛЬСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК (ИФМ УрО РАН)
МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ
НАУК**

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 14.10.2022, № 15

О присуждении Скорнякову Сергею Львовичу, гражданину России, ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Кулоновские корреляции и аномалии спектральных, магнитных и решеточных свойств пниктидов и халькогенидов железа» по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния принята к защите 24.05.2022, протокол №6, диссертационным советом 24.1.133.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук (ИФМ УрО РАН), Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, 620108, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18, приказы Минобрнауки РФ № 714/нк от 02.11.2012 и № 188/нк от 26.02.2015.

Соискатель Скорняков Сергей Львович, 1983 года рождения, в 2006 году с отличием окончил «Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования Уральский государственный технический университет — УПИ», присуждена степень магистра прикладных математики и физики по направлению «Прикладные математика и физика». Решением

диссертационного совета Института физики металлов УрО РАН от 27 марта 2009 года № 5 Скорнякову Сергею Львовичу присуждена ученая степень кандидата физико-математических наук. Скорняков С.Л. работает в должности ведущего научного сотрудника в лаборатории оптики металлов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук (ИФМ УрО РАН).

Диссертация выполнена в лаборатории оптики металлов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук (ИФМ УрО РАН), г. Екатеринбург.

Научный консультант — доктор физико-математических наук Анисимов Владимир Ильич является главным научным сотрудником лаборатории оптики металлов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук (ИФМ УрО РАН), г. Екатеринбург.

Официальные оппоненты:

1) Рубцов Алексей Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор кафедры квантовой электроники Физического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, г. Москва;

2) Медведева Надежда Ивановна, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник лаборатории квантовой химии и спектроскопии им. профессора А.Л. Ивановского Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук», г. Екатеринбург;

3) Григорьев Павел Дмитриевич, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН», г. Черногловка

- дали положительные отзывы на диссертацию С.Л. Скорнякова.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, в своем положительном заключении, подписанном Некрасовым Игорем Александровичем, член-корреспондентом РАН, доктором физико-математических наук, главным научным сотрудником лаборатории теоретической физики указала, что диссертационная работа на тему «Кулоновские корреляции и аномалии спектральных, магнитных и решеточных свойств пниктидов и халькогенидов железа», представленная на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния, представляет собой завершенное исследование, обладающее внутренним единством, и 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.

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».

Соискатель имеет 63 опубликованные работы (35.57 печатных листа), в том числе по теме диссертации 30 работ, из них статей, опубликованных в рецензируемых российских и зарубежных научных изданиях и входящих в перечень ВАК — 20.

В результате проведенных исследований автором решена существенная для физики конденсированного состояния проблема влияния кулоновских

корреляций на аномальные свойства характерных представителей основных классов пниктидов и халькогенидов железа.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Skornyakov, S. L. Orbital-selective coherence-incoherence crossover and metal-insulator transition in Cu-doped NaFeAs [Text] / S. L. Skornyakov, V. I. Anisimov, I. Leonov // Phys. Rev. B. — 2021. — Vol. 103. — P. 155115(8).

2. Skornyakov, S. L. Correlated electronic structure, orbital-dependent correlations, and Lifshitz transition in tetragonal FeS [Text] / S. L. Skornyakov, I. V. Leonov // Phys. Rev. B. — 2019. — Vol. 100. — P. 235123(13).

3. Correlation strength, Lifshitz transition, and the emergence of a two-dimensional to three-dimensional crossover in FeSe under pressure [Text] / S. L. Skornyakov, V. I. Anisimov, D. Vollhardt, I. Leonov // Phys. Rev. B. — 2018. — Vol. 97. — P. 115165(9).

4. Effect of electron correlations on the electronic structure and phase stability of FeSe upon lattice expansion [Text] / S. L. Skornyakov, V. I. Anisimov, D. Vollhardt, I. Leonov // Phys. Rev. B. — 2017. — Vol. 96. — P. 035137(10).

5. Correlation-Driven Topological Fermi Surface Transition in FeSe [Text] / I. Leonov, S. L. Skornyakov, V. I. Anisimov, D. Vollhardt // Phys. Rev. Lett. — 2015. — Vol. 115. — P. 106402(6).

6. Skornyakov, S. L. Effect of correlations and doping on the spin susceptibility of iron pnictides: the case of KFe_2As_2 [Text] / S. L. Skornyakov, V. I. Anisimov, D. Vollhardt // Письма в ЖЭТФ. — 2014. — Т. 100. — С. 128–133.

7. Skornyakov, S. L. Microscopic origin of the linear temperature increase of the magnetic susceptibility of BaFe_2As_2 [Text] / S. L. Skornyakov, V. I. Anisimov, D. Vollhardt // Phys. Rev. B. — 2012. — Vol. 86. — P. 125124(7).

8. Skornyakov, S. L. Linear-Temperature Dependence of Static Magnetic Susceptibility in LaFeAsO from Dynamical Mean-Field Theory [Text] / S. L. Skornyakov, A. A. Katanin, V. I. Anisimov // Phys. Rev. Lett. — 2011. — Vol. 106. — P. 047007(4).

9. Classification of the electronic correlation strength in the iron pnictides: The case of the parent compound BaFe_2As_2 [Text] / S. L. Skornyakov, A. V. Efremov, N. A. Skorikov, M. A. Korotin, Yu. A. Izyumov, V. I. Anisimov, A. V. Kozhevnikov, and D. Vollhardt // Phys. Rev. B. — 2009. — Vol. 80. — P. 092501(4).

10. Coulomb correlation effects in LaFeAsO: An LDA+DMFT(QMC) study [Text] / A. O. Shorikov, M. A. Korotin, S. V. Streltsov, S. L. Skornyakov, Dm. M. Korotin, V. I. Anisimov // ЖЭТФ. — 2009. — Т. 135. — С. 134–138.

На диссертацию и автореферат поступило 7 отзывов:

1. От Кучинского Эдуарда Зямовича, д.ф.-м.н., заведующего лабораторией теоретической физики, Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург.

Замечание: «В качестве замечания можно отметить отсутствие анализа динамической смеси различных спиновых конфигураций в парамагнитном состоянии исследованных систем.»

2. От Кузнецова Михаила Владимировича, д.х.н., профессора, заведующего лабораторией, директора ИХТТ УрО РАН и Шеина Игоря Роленовича, к.ф.-м.н., ведущего научного сотрудника, лаборатория квантовой химии и спектроскопии им. А.Л. Ивановского, Институт химии твердого тела УрО РАН, г. Екатеринбург.

Без замечаний.

3. От к.ф.-м.н. Максимова Павла Александровича, старшего научного сотрудника, лаборатория теоретической физики, Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна.

Без замечаний.

4. От Лихтенштейна Александра Иосифовича, доктора философии (к.ф.-м.н.), профессора физики, Университет Гамбурга, г. Гамбург (Германия).

Без замечаний.

5. От Синицына Евгения Валентиновича, д.ф.-м.н., профессора кафедры анализа систем и принятия решений, Институт экономики и управления, Уральский Федеральный Университет, г. Екатеринбург.

Без замечаний.

6. От Соловьева Игоря Владимировича, д.ф.-м.н., ведущего исследователя, Национальный институт материаловедения, г. Цукуба (Япония).

Замечания:

1. «Характерной особенностью пниктидов и халькогенидов железа является сильная гибридизация между 3d состояниями железа и p состояниями лигандов,

которая в ряде работ даже рассматривается как аргумент в пользу итинерантного характера электронов в данных соединениях. В связи с этим, насколько оправданным является селективный учет кулоновских корреляций только в 3d оболочке Fe?»

2. «В разделах «Научная новизна», «Основные положения, выносимые на защиту» и «Выводы» утверждается, что соединения характеризуются «существованием значительных перенормировок эффективной массы квазичастиц и отсутствием переноса спектрального веса в хаббардовские зоны». Утверждение выглядит неполным, поскольку должен выполняться закон сохранения полного спектрального веса. В связи с чем, изменение спектральной плотности около Ферми должно быть непременно связано с перераспределением веса в других областях спектра.»

3. «При обсуждении седьмой главы на стр.25 утверждается, что DFT существенно недооценивает параметры решетки FeSe. Однако DFT- это общая (и формально точная) теория основного состояния, в то время как результаты зависят от конкретных приближений, используемых в рамках DFT. Поэтому, здесь принципиально уточнить, какое все-таки приближение использовалось автором в расчетах: LDA или GGA?»

7. От Гордиенко Алексея Болеславовича, д.ф.-м.н., профессора, заведующего кафедрой теоретической физики Института Фундаментальных наук, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Кемеровский государственный университет» (КемГУ), г. Кемерово.

Замечания:

1. «В тексте автореферата очень кратко представлены результаты решения первой из задач исследования — разработки программного комплекса, позволяющего учитывать кулоновские корреляции.»

2. «В тексте автореферата сказано «Показано, что учет зарядового согласования не оказывает качественного влияния на конечные результаты и не изменяет основные физические выводы», хотя nsc -кривая имеет более выраженный характер и даже имеет второй локальный минимум, чего практически не заметно для sc -кривой.»

Выбор официальных оппонентов доктора физико-математических наук, профессора А.Н. Рубцова, доктора физико-математических наук, главного научного сотрудника Н.И. Медведевой, доктора физико-математических наук,

старшего научного сотрудника П.Д. Григорьева, а также ведущей организации Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук, обосновывается публикациями оппонентов, тематикой структурного подразделения ведущей организации, относящимися к сфере исследований, которым посвящена диссертация.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований решена существенная для физики конденсированного состояния проблема корректного учета кулоновских корреляций для объяснения аномальных свойств пниктидов и халькогенидов железа:

1. Введено представление о режиме “промежуточной” силы кулоновских корреляционных эффектов, характеризуемом сосуществованием значительных перенормировок эффективной массы квазичастиц и отсутствием переноса спектрального веса в хаббардовские зоны. Показано, что данная ситуация реализуется в исследованных пниктидах и халькогенидах железа.

2. Для систем с узкими пиками плотности состояний в окрестности уровня Ферми предложена микроскопическая модель, объясняющая условия реализации режимов температурного роста и убывания магнитной восприимчивости.

3. Впервые показано, что фотоэмиссионные спектры с угловым разрешением основных классов родительских систем ВТСП пниктидов и халькогенидов железа количественно верно описываются при учете кулоновских корреляционных эффектов в рамках подхода DFT+DMFT.

4. Продемонстрировано, что экспериментально наблюдаемый слабый нестинг поверхности Ферми в LiFeAs формируется благодаря сильному кулоновскому взаимодействию в 3d оболочке железа и объясняется выраженной орбитальной селективностью корреляционных эффектов.

5. На основе комплексного исследования влияния легирования на спектральные и магнитные свойства систем $\text{NaFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$ показано, что переход

металл-диэлектрик при $x=0.5$ объясняется сильным локальным кулоновским взаимодействием в 3d оболочке Fe.

6. Впервые показано, что температурный рост магнитной восприимчивости в соединениях LaFeAsO и BaFe₂As₂, описанный в рамках подхода DFT+DMFT, является следствием термического возбуждения состояний, формирующих узкие пики спектральной функции под уровнем Ферми.

7. Установлено, что корреляционные эффекты в KFe₂As₂ демонстрируют бóльшую орбитальную селективность по сравнению с таковыми в соединениях BaFe₂As₂ и LaFeAsO, что позволило впервые объяснить отличия температурной зависимости магнитной восприимчивости для этих пниктидов железа.

8. Показано, что учет локальных кулоновских корреляционных эффектов в халькогенидах FeSe и FeS позволяет получить корректные значения структурных параметров при нормальном и повышенном давлении, а также предсказать аномальное поведение решеточных, спектральных и магнитных свойств этих систем, включая переход Лифшица, при расширении элементарной ячейки.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что полученные в работе результаты позволили выявить микроскопические механизмы аномального поведения спектральных, магнитных и решеточных свойств основных классов пниктидов и халькогенидов железа.

Значение полученных соискателем результатов для практики подтверждается тем, что данные выполненных расчетов могут быть использованы для обоснованного выбора параметров моделей, описывающих свойства пниктидов и халькогенидов, а также поиска путей направленного изменения характеристик представителей исследованного класса веществ.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что – результаты получены с помощью широко апробированных методов расчета спектральных, магнитных и решеточных свойств систем на основе переходных металлов;

– выбор моделей и приближений, описывающих свойства пниктидов и халькогенидов, обоснован;

– имеется надежное согласие рассчитанных физических характеристик с экспериментальными данными.

Личный вклад соискателя состоит в том, что им осуществлялись: выбор темы исследования, постановка цели и задач диссертационной работы, формулировка физической проблемы и определение методов ее решения. Автор диссертации лично выполнил большую часть расчетов спектральных, магнитных и решеточных свойств с учетом кулоновских корреляций, произвел интерпретацию и обобщение полученных результатов, сформулировал основные выводы работы. Результаты исследований опубликованы автором в соавторстве с коллегами в ряде ведущих журналов по тематике физики конденсированного состояния, а также доложены на российских и зарубежных международных конференциях.

Основные результаты, изложенные в диссертации, получены автором в сотрудничестве с коллегами ряда лабораторий ИФМ УрО РАН: оптики металлов (Анисимов В.И., Леонов И.В., Лукоянов А.В., Новоселов Д.Ю., Шориков А.О.), теоретической физики (Катанин А.А.), рентгеновской спектроскопии (Ефремов А.В., Скориков Н.А.). Также часть результатов получена в рамках сотрудничества с Центром электронных корреляций и магнетизма, г. Аугсбург, Германия.

Диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, посвященную решению существенной для физики конденсированного состояния проблемы определения влияния кулоновских корреляций на аномальные свойства характерных представителей основных классов пниктидов и халькогенидов железа и соответствует критериям «Положения о присуждении ученых степеней» в редакции, утвержденной Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 с изменениями от 20.03.2021 № 426.

В ходе защиты диссертации критических замечаний высказано не было.


На заседании 14.10.2022, проведенном в очном режиме, диссертационный совет принял решение присудить Скорнякову Сергею Львовичу ученую степень доктора физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 7 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации 1.3.8. Физика конденсированного состояния, 6 докторов наук по специальности 1.3.12. Физика магнитных явлений, 5 докторов наук по специальности 2.6.1. Металловедение и термическая обработка металлов, участвовавших в заседании, из 21 человека, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту — нет, проголосовали: «за» - 18, «против» — нет, «недейств.» - нет.

Председатель заседания,
заместитель председателя диссертационного совета,
доктор физ.-мат. наук


А.П. Носов

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физ.-мат. наук


Т.Б. Чарикова

17 октября 2022 г.