



International Center for Materials Nanoarchitectonics (MANA)
National Institute for Materials Science (NIMS)
1-1 Namiki, Tsukuba 305-0044, Japan Telephone +81 29 860 4709 Facsimile +81 29 860 4706



Проф. Чариковой Т. Б.
Институт физики металлов
им. М.Н. Михеева УрО РАН
ул. С. Ковалевской, 18
620108, г. Екатеринбург
Российская Федерация

Dr. Igor Solovyev
Principal Investigator
Emergent Materials Property Theory Group,
International Center for Materials Nanoarchitectonics
National Institute for Materials Science,
1-1 Namiki, Tsukuba, Ibaraki 305-0044, Japan.
Tel.: +81-29-860-4968, Fax.: +81-29-860-4974,
e-mail: SOLOVYEV.Igor@nims.go.jp
http://samurai.nims.go.jp/SOLOVYEV_Igor-e.html

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

Быстрое развитие вычислительной техники значительно расширяет возможности математического моделирования сложных процессов и явлений во многих областях науки, в том числе и в физике конденсированного состояния. Это позволяет заменять дорогостоящие реальные эксперименты более дешевыми численными расчетами, результаты которых, с одной стороны, могут объяснить и даже предсказать наличие интересных свойств у исследуемой системы, а с другой - являются хорошей базой при интерпретации экспериментальных данных.

Целью диссертационной работы Скорнякова С.Л. являлось решение проблемы учета кулоновских корреляционных эффектов для описания необычных спектральных, магнитных и решеточных свойств слоистых пниктидов и халькогенидов железа. Поставленная задача была успешно решена, о чем убедительно говорит ряд полученных и опубликованных результатов для типичных представителей исследуемого класса систем: рассчитаны и интерпретированы фотоэмиссионные спектры, объяснено аномальное температурное поведение магнитной восприимчивости, предсказаны структурные и магнитные переходы под давлением.

Среди результатов диссертации необходимо отдельно упомянуть предложенную автором наглядную модель, позволяющую объяснить крайне необычное явление линейного температурного роста магнитной восприимчивости в парамагнитной фазе пниктидов и халькогенидов, а также обоснование существования режима промежуточной силы корреляционных эффектов в металлических системах.

Вместе с тем, хотелось бы отметить ряд замечаний, носящие скорее уточнительный характер на текст автореферата и отнюдь не умаляющих целостность и важность работы проделанной соискателем: (1) Характерное 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, изменения 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?

В целом же считаю, что представленная диссертационная работа **«Кулоновские корреляции и аномалии спектральных, магнитных и решеточных свойств пниктидов и халькогенидов железа»** полностью соответствует 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 ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 Физика конденсированного состояния.

Цукуба,
8 августа 2022 г.


Dr. Igor Solovyev

С отзывом ознакомлен

15 сентября 2022 г.

С.А. Скорняков