

## 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

Численные методы расчета спектральных, магнитных и структурных свойств сильно коррелированных систем являются важным инструментом современной физики конденсированного состояния, равноправно используемым наряду с аналитическими подходами. Достаточно часто при исследовании реальных соединений первопринципные расчетные схемы имеют преимущество перед чисто аналитическими методами, ввиду отсутствия подгоночных и эмпирически определяемых параметров, а результаты расчета могут напрямую сравниваться с экспериментальными данными. С этой точки зрения теоретические исследования, составившие основу докторской диссертации С. Л. Скорнякова, представляются, несомненно, актуальными, а результаты – интересными и полезными.

В данной диссертационной работе представлены результаты теоретического исследования аномалий спектральных, магнитных и решеточных свойств, проявляемых соединениями, относящихся к пниктидам и халькогенидам — новому классу высокотемпературных сверхпроводников, интенсивно изучаемому в настоящее время и демонстрирующего крайне необычное поведение даже в нормальном состоянии. Автором диссертации было показано, что объяснение аномального поведения пниктидов и халькогенидов железа может быть осуществлено путем учета кулоновских корреляций между электронами частично заполненных оболочек. Для этого был применен один из самых совершенных инструментов численного

моделирования — подход DFT+DMFT, позволяющий принимать во внимание корреляционные эффекты в реальных физических системах.

Наиболее значимые результаты были получены касательно особенностей формирования спектральных и магнитных свойств исследованных систем. Например, было продемонстрировано, что в пниктидах и халькогенидах реализуется необычная ситуация промежуточных по силе кулоновских корреляций, что позволило расширить и дополнить классификацию коррелированных металлов. Далее, впервые были установлены причины возникновения аномалии линейного температурного роста парамагнитной восприимчивости и предложена простая микроскопическая модель, объясняющая это явление. Данная модель применима не только к изученным пниктидам и халькогенидам, но также может использоваться для понимания особенностей температурной зависимости магнитного отклика других систем с пиками спектральной функции в окрестности уровня Ферми. Наконец, автором было произведено детальное исследование взаимосвязи корреляционных эффектов со спектральными и структурными свойствами выбранного класса соединений. В данной части работы было впервые установлено, что корреляционные эффекты сдвигают такие особенности одноэлектронного спектра, как сингулярности Ван Хова, достаточно близко к уровню Ферми, что позволяет объяснить фазовые переходы происходящие при вариациях параметров кристаллической структуры под давлением. Дополнительно, было показано, что энергия кулоновских корреляций оказывает важное стабилизирующее влияние на упругие свойства пниктидов и халькогенидов.

Основные результаты диссертации представлены в наглядной форме, изложены грамотным научным языком и апробированы на большом числе конференций и семинаров. Сделанные выводы хорошо обоснованы и логично вытекают из поставленной цели. Кроме того, достоверность, новизна и значимость полученных результатов подтверждается сравнением с экспериментальными данными и публикациями в ведущих рецензируемых



научных журналах. Автореферат дает полное представление о большой и сложной работе, выполненной автором.

Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, вносящую существенный вклад в понимание роли кулоновских корреляционных эффектов в формировании аномальных физических свойств нормальной фазы пниктидов и халькогенидов железа. Защищаемые положения и выводы хорошо обоснованы и с достаточной полнотой освещены в публикациях автора по теме диссертации. Работа удовлетворяет требованиям пп. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемым к докторским диссертациям, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 № 842 (ред. от 11.09.2021), а ее автор, Скорняков Сергей Львович, заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Подпись П.А. Максимова заверяю.

Зам. директора по научной работе  
Н.В. Антоненко

старший научный сотрудник  
Лаборатории теоретической физики  
Объединенного института ядерных  
исследований,  
кандидат физико-математических  
наук  
П.А. Максимов

30.06.2022

Почтовый адрес:  
Объединенный институт ядерных  
исследований  
141980 г. Дубна, Московская обл.  
тел. (7-49621) 63-695  
e-mail: [maksimov@theor.jinr.ru](mailto:maksimov@theor.jinr.ru)

*С отзывом ознакомлен*  
*Скорняков С.Л. 15 июля 2022 г.*