

Отзыв официального оппонента
на диссертационную работу Сергея Львовича Скорнякова
КУЛОНОВСКИЕ КОРРЕЛЯЦИИ И АНОМАЛИИ СПЕКТРАЛЬНЫХ,
МАГНИТНЫХ И РЕШЕТОЧНЫХ СВОЙСТВ ПНИКТИДОВ И
ХАЛЬКОГЕНИДОВ ЖЕЛЕЗА

представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук

1.3.8. Физика конденсированного состояния

Работа С.Л. Скорнякова посвящена исследованию роли корреляций в электронных свойствах синтезированных в последние 10-20 лет материалах на основе железа – пниктидах и халкогенидах, многие из которых показывают аномалии в температурных зависимостях магнитных, структурных и сверхпроводящих характеристиках. Следует сразу отметить высокий уровень работы. Он проявляется во всем – работу характеризуют использование современных численных методов (динамическая теория среднего поля – DMFT, примененная к многоорбитальным моделям реальных материалов, остается одной из самых передовых и одновременно технически сложных расчетных схем), подробный и всесторонний анализ полученных данных, и, наконец, выверенные, взвешенные выводы, не оставляющие сомнений в своей достоверности.

Одним из главных результатов работы, важных в общефизическом контексте, являются выводы об эффектах «умеренных» корреляций. Автор убедительно показывает, что (в отличие от хорошо изученного случая сильных корреляций, помещающих систему в окрестность фазового перехода и приводящих к формированию хаббардовских подзон), умеренные корреляции не приводят к существенному изменению электронной структуры в целом. Однако, имеет место существенная перенормировка плотности состояний вблизи уровня Ферми, выражающаяся в изменении эффективной массы и появлению, либо изменению характеристик имеющихся, пиков в плотности состояний вблизи уровня Ферми. Эти эффекты наиболее выражены в многоорбитальных моделях, в случае, когда корреляционные эффекты на разных орбиталях существенно отличаются. Автор убедительно показывает, что именно эти эффекты ответственны за аномальное температурное поведение магнитного отклика исследованных им пниктидов железа (температурная шкала, полученная в расчетах, отличается от фактических экспериментальных наблюдений, но это нельзя поставить в упрек автору, поскольку такая ситуация является общей для DMFT расчетов). Также, важным с общефизической точки

зрения представляется заключение о подавлении нестинга в LiFeAs за счет орбитально-селективных корреляций в этом материале.

Однако, хотелось бы получить ответ на следующий вопрос. Автор неоднократно подчеркивает, что, по его мнению, одноузельное приближение динамического метода среднего поля является достаточным для описания интересующих его материалов и эффектов. В то же время известно, что именно для описания резонансов плотности состояний, близких к уровню Ферми, в системах с сильными корреляциями принципиально важно учитывать нелокальную физику. Именно, нелокальные эффекты усиливают резонансы, связанные с особенностями ван Хова – седловые точки «притягиваются» к уровню Ферми и «уплощаются», так что их вклад оказывается значительно усилен. Ожидает ли автор подобных эффектов в случае исследованных им «умеренно-коррелированных» систем?

Безусловно важны результаты по зависимости электронных свойств $\text{NaFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$ от величины допирования медью. Автор очень физично проводит границу между базовым описанием, фактически учитывающим только сдвиг уровня Ферми из-за допирования, и полной микроскопической моделью. Последняя потребовала достаточно ресурсоемких расчетов, связанных с введением сверхячейки, включающей атомы как железа, так и меди. В связи со сложностью этих расчетов хотелось бы получить ответ на вопрос – нельзя ли было выполнить аналогичное исследование с использованием какой-либо модели, промежуточной по сложности между базовой и микроскопической, в духе CPA+DMFT?

Наконец, отмечу интересные выводы по эволюции особенности ван Хова и возможной реализации перехода Лифшица в FeS. Эти выводы заслуживают пристального внимания экспериментаторов.

Разумеется, работа не свободна от стилистических погрешностей. Например, на стр. 71 употребляется термин «раздвижка» проекций спина (вместо общепринятого «расщепление»). Тем не менее, в целом текст написан весьма ясно, хорошим научным языком, с необходимой степенью подробности изложения. Выводы полностью следуют из изложенного материала. 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. Автореферат отражает содержание диссертации.

Таким образом, диссертация С.Л. Скорнякова представляет собой законченное научное исследование, важное как с практической точки зрения – в контексте выводов о свойствах конкретных материалов, изученных автором, так и для широкого сообщества

специалистов по теории коррелированных систем – в контексте выводов о свойствах «умеренно-коррелированных» многоорбитальных систем. Отмеченные в отзыве неясности и замечания не носят принципиального характера. Я убежден, что работа С.Л. Скорнякова удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, а ее автор заслуживает присуждения искомой степени.

доктор физико-математических наук
профессор кафедры квантовой электроники
физического факультета
Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова
Алексей Николаевич Рубцов

16 сентября 2022 г.

Москва 119991, Ленинские горы 1 стр. 2,
физический факультет МГУ
ar@ct-qmc.org
8 495 939 3669, 8 916 547 6484

Подпись Рубцова А.Н. заверяю
декан физического факультета МГУ
профессор


И.И. Сысоев

С отзывом ознакомлен
С.А. Скорняков 30.09.2022

Сведения об официальном оппоненте

ФИО: Рубцов Алексей Николаевич

Ученая степень: доктор физико-математических наук (специальность 1.3.10. Физика низких температур)

Полное наименование организации: Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Должность: профессор кафедры квантовой электроники Физического факультета

Почтовый адрес: 119991, ГСП-1, Москва, Ленинские горы, МГУ имени М.В. Ломоносова Дом 1, строение 2,

Телефон: +7 495 9393669

e-mail: rubtsov@ct-qmc.org

Является специалистом в области физики конденсированного состояния и имеет публикации в сфере исследований, которым посвящена диссертация С.Л. Скорнякова:

1. Rubtsov, A. N. Collective magnetic fluctuations in Hubbard plaquettes captured by fluctuating local field method [Text] / A. N. Rubtsov, E. A. Stepanov, A. I. Lichtenstein // Phys. Rev. B. — 2020 — Vol. 102 — P. 224423(12).
2. Astretsov, G. V. Dual parquet scheme for the two-dimensional Hubbard model: Modeling low-energy physics of high- T_c cuprates with high momentum resolution [Text] / G. V. Astretsov, G. Rohringer, A. N. Rubtsov // Phys. Rev. B. — 2020 — Vol. 101 — P. 075109(17).
3. Dual fermion method as a prototype of generic reference-system approach for correlated fermions [Text] / S. Brener, E. A. Stepanov, A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein // Annals of Physics. — 2020. — Vol. 422. — P. 168310(13).
4. Markov, A. A. Fate of a topological invariant for correlated lattice electrons at finite temperature [Text] / A. A. Markov, G. Rohringer, A. N. Rubtsov // Phys. Rev. B. — 2019 — Vol. 100, — P. 115102(12).
5. Quantum spin fluctuations and evolution of electronic structure in cuprates [Text] / E. A. Stepanov, L. Peters, I. S. Krivenko, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, A. N. Rubtsov // npj Quantum Materials. — 2018. — Vol. 3. — P. 54(7).
6. Role of rotational symmetry in the magnetism of a multiorbital model [Text] / A. E. Antipov, I. S. Krivenko, V. I. Anisimov, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov // Phys. Rev. B. — 2012. — Vol. 86. — P. 155107(10).
7. Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models [Text] / E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer, P. Werner // Rev. Mod. Phys. — 2011. — Vol. 83. — P. 349–404.
8. Rubtsov, A. N. Dual fermion approach to nonlocal correlations in the Hubbard model [Text] / A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, and A. I. Lichtenstein // Phys. Rev. B. — 2008. — Vol. 77. — P. 033101(4).
9. Enhanced Crystal Field Splitting and Orbital Selective Coherence by Strong Correlations in V_2O_3 [Text] / A. I. Poteryaev, J. M. Tomczak, S. Biermann, A. Georges, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, T. Saha-Dasgupta, O. K. Andersen // Phys. Rev. B. — 2007. — Vol. 76. — P. 085127(17).
10. Rubtsov, A. N. Continuous-time quantum Monte-Carlo method for fermions [Text] / A. N. Rubtsov, V. V. Savkin, A. I. Lichtenstein // Phys. Rev. B. — 2005. — Vol. 72. — P. 035122(9).

*Ученый секретарь
диссертационного совета 24.1.133.01
Чашикова Т.Б.*

Подпись заверяю	<i>Чашикова Т.Б.</i>
Руководитель общего отдела	<i>Григорьев С.С.</i>
№	80 09
Дата	2022