

О Т З Ы В

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.

Диссертационная работа Скорнякова С. Л. посвящена исследованию эффектов кулоновских корреляций в 3d-оболочках с целью установить их связь с аномалиями спектральных, магнитных и решеточных свойств характерных для пниктидов и халькогенидов железа на основе применения первопринципного метода DFT+DMFT. Актуальность выполненной работы не вызывает сомнений и обусловлена, прежде всего, фундаментальным характером задачи описания коллективных свойств многоэлектронных систем, в рамках которой и в настоящее время идет активная разработка как теоретических методов, так и способов эффективной реализации соответствующих вычислений. Очень важное значение, в этом же смысле, имеет и прикладной аспект работы, связанный с объяснением особенностей механизма высокотемпературной сверхпроводимости в пниктидах и халькогенидах железа.

В разделе автореферата "Основное содержание работы" последовательно и детально представлены разделы работы, включая формулировку целей, актуальность, положения выносимые на защиту (Введение), изложение и обсуждение методов исследования электронной структуры систем с сильными электронными корреляциями (Глава 1), результаты расчетов спектральных и магнитных свойства LiFeAsO с обсуждением предложенной автором модели, объясняющей немонотонную температурную зависимость магнитной восприимчивости (Глава 2), результаты исследования спектральных свойств и магнитной восприимчивости соединений BaFe_2As_2 и KFe_2As_2 (Глава 3), анализ особенностей электронной структуры оксипниктидных кристаллов LaFePO и LaNiPO , на основе которого сделан вывод, что LaNiPO является сильно коррелированным соединением (Глава 4), обсуждение влияния корреляционных эффектов на спектральные свойства LiFeAs , которые, как показано, имеют выраженную орбитальную селективность и проявляются в больших значениях эффективных масс и изменении формы поверхности Ферми в соответствии с экспериментальными данными (Глава 5), анализ результатов исследования перехода металл-диэлектрик в $\text{NaFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$, включая расчеты локальной спиновой восприимчивости и статической восприимчивости в зависимости от волнового вектора, которые указывают на ключевую роль кулоновских корреляций (Глава 6), результаты исследования влияния кулоновских корреляций на электронные и структурные свойства соединения FeS , которое является базовым для ВТСП-систем на основе железа (Главы 7, 8). Основные результаты и выводы приведены в заключительной

части автореферата, соответствуют общей цели работы и поставленным задачам исследования.

Стиль изложения ясный и понятный, что позволяет однозначно оценить научную значимость выполненной работы и возможные пути практического применения полученных результатов, которые прошли апробацию на международных и российских конференциях и представлены в 20 публикациях в журналах списка ВАК, а также а также индексируемых Web of Science и Scopus.

В качестве замечаний можно отметить следующие:

- в тексте автореферата очень кратко представлены результаты решения первой из задач исследования - разработки программного комплекса, позволяющего учитывать кулоновские корреляции;

- в тексте автореферат 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;

Приведенные замечания имеют очень частный характер и никак не меняют общего положительного впечатления от работы, которая является завершенным научным исследованием, имеющим фундаментальный характер и потенциал для практического применения.

Работа соответствует требованиям "Положения о присуждении ученых степеней", утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 г (ред. от 01.10.2018 г.), а ее автор, Скорняков Сергей Львович, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 - физика конденсированного состояния.

Гордиенко Алексей Болеславович,

доктор физико-математических наук, профессор,
заведующий кафедрой теоретической физики
Института Фундаментальных Наук
Федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего образования
"Кемеровский государственный университет" (КемГУ)

Адрес организации: 650043, г. Кемерово, ул.Красная, 6.

Сайт организации <http://www.kemsu.ru>

e-mail: gordi@kemsu.ru

тел.раб. 8(3842) 58-31-95

Я, Гордиенко А. Б. даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Зав. канцелярией _____ Е.В. Кузнецова

Отзывом озвучен

С.А. Скорняков

05.10.2022

30.09.2022

А.Б. Гордиенко