

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Леонова Ивана Васильевича  
**«Исследование электронной структуры, магнитных и решёточных свойств  
сильно коррелированных электронных соединений комбинированным методом  
на основе теории функционала плотности и динамического среднего поля»,**  
представленной на соискание учёной степени доктора физико-математических наук  
по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа Леонова И.В. посвящена решению актуальной проблемы описания из первых принципов различных физических свойств сильно коррелированных электронных соединений на основе 3d металлов. Автор приводит подробное описание эволюции свойств подобных систем под давлением, при изменении температуры, параметров легирования и других внешних возмущений. Вычисления в рамках разработанного диссертантом DFT+DMFT метода позволяют объяснить на микроскопическом уровне взаимосвязи между электронными, спиновыми и решёточными степенями свободы в различных режимах перехода Мотта диэлектрик – металл для разного соотношения величины кулоновского взаимодействия и ширины зоны,  $U/W$ , вблизи перехода Мотта. Полученные результаты, несомненно, представляют большой практический и фундаментальный интерес в области физики конденсированных сред.

В работе получен целый ряд новых фундаментально важных результатов:

описание антиферро-орбитального упорядочения и кооперативного ян-теллеровского искажения кристаллической решётки в парамагнитных фазах мотт-хаббардовских диэлектриков  $KCuF_3$  и  $LaMnO_3$  и вывод о доминировании электрон-решёточного взаимодействия над чисто электронным (обменным) механизмом Кугеля-Хомского в  $KCuF_3$  (Глава 3);

результаты расчётов динамических свойств кристаллической решётки и упругих свойств для парамагнитных ОЦК и ГЦК фаз Fe как функции температуры (Глава 4);

систематическое исследование явления коллапса магнитных моментов под давлением в оксидах MnO, FeO, CoO и NiO (Глава 5) и  $Fe_{1-x}Mg_xO$  (Глава 6);

результаты для FeSe (Глава 9) – полученная сильная орбитально-селективная перенормировка Fe 3d состояний, кроссовер когерентный – некогерентный металл и связанный с ним режим формирования локальных магнитных моментов вблизи перехода Лифшица.

Главным, бесспорно фундаментальным, достижением является предложенная автором модифицированная модель перехода Мотта – концепция пространственно-селективного перехода Мотта под давлением в  $Fe_2O_3$ , позволяющая объяснить эволюцию электронной структуры, магнитного состояния и решёточных свойств моттовского изолятора  $Fe_2O_3$  под давлением (Глава 8).



Также заслуживает внимания предложенный диссертантом новый механизм перехода Мотта в  $V_2O_3$ , связанный с орбитально-селективной перенормировкой  $V t_{2g}$  состояний (Глава 7).

Результаты диссертации являются важными и актуальными как для понимания механизмов взаимодействия между различными свойствами сильно коррелированных соединений, так и в рамках методологического развития вычислительных методов и подходов расчёта электронной структуры. Ярким достижением диссертационной работы является практическая реализация самосогласования по зарядовой плотности метода DFT+DMFT – процедуры, в течение десятилетия с момента формулировки метода «заметаемой под ковёр», и, наконец, впервые осуществлённой И.В. Леоновым.

Результаты диссертации опубликованы в ведущих научных физических журналах с высоким импакт-фактором (Phys. Rev. Lett., Phys. Rev. B, Eur. Phys. J., Scientific Reports, J. Phys.: Condens. Matter и т.д.), неоднократно докладывались на представительных научных симпозиумах и конференциях, что подчёркивает научную новизну и значимость представленных результатов.

Основные результаты диссертации, включая положения, выносимые на защиту, хорошо аргументированы, их достоверность, научная новизна и практическая ценность не вызывают сомнения. Диссертационная работа представляет собой завершённое научное исследование, посвящённое актуальной и важной современной проблеме физики конденсированных сред.

По моему мнению, диссертационное исследование Леонова И. В. заслуживает высокой оценки и полностью удовлетворяет требованиям ВАК для докторских диссертаций. Автор работы, Леонов И.В., безусловно, достоин присуждения учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния».

Главный научный сотрудник лаборатории  
рентгеновской спектроскопии ИФМ УрО РАН

доктор физ.-мат. наук



М.А. Коротин

« 22 » 10 2018 г.

Почтовый адрес: 620108, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, д.18, ИФМ УрО РАН

Тел.: +7 (343) 374 43 31

E-mail: michael.korotin@imp.uran.ru

