

ОТЗЫВ

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

Диссертационная работа Леонова И.В. связана с изучением влияния эффекта кулоновских одноузельных корреляций на электронную структуру, спиновое состояние и свойства кристаллической решетки соединений на основе 3d переходных металлов. Систематическое исследование свойств подобных систем является одним из наиболее актуальных направлений современной физики конденсированного состояния. Большой интерес представляет изучение взаимосвязи между электронными, спиновыми и решеточными степенями свободы, как в виду возможных технологических применений в рамках разработки новой элементарной базы для микро- и опто-электроники, так и в рамках объяснения ряда фундаментальных проблем и явлений (к примеру, объяснения перехода изолятор-металл Мотта, явление колоссального магнетосопротивления, высокотемпературной сверхпроводимости, тяжело-фермионного поведения и т.д.).

Работа Леонова И.В. представляет собой пример успешной комбинации как разработки, так и применения новых вычислительных методов, к решению актуальной и важной проблемы описания взаимодействия между электронной структурой, магнитным состоянием и кристаллической решеткой в сильнокоррелированных материалах. Весьма важной особенностью является способность в рамках разработанного диссертантом DFT+DMFT подхода проследить переход от локализованного к коллективному состоянию носителей, описать перенормировку их массы, связать эффекты локализации с изменением решетки вблизи перехода Мотта, как в парамагнитном, так и в состоянии с дальним магнитным порядком.

Для выявления общих закономерностей поведения свойств подробно исследовался широкий класс соединений с сильно коррелированными электронами, с существенно отличными физическими свойствами (металлы, диэлектрики Мотта, системы в которых реализуется переход Мотта металл-диэлектрик). В рамках применения DFT+DMFT было представлено систематическое объяснение поведения физических свойств данных систем с микроскопической точки зрения, описана эволюция их характеристик с изменением давления и температуры, объяснена взаимосвязь между электронными, спиновыми и решеточными степенями свободы. Данные результаты, несомненно, являются актуальными и важными для

понимания природы взаимодействия различных характеристик коррелированных соединений, в том числе с изменением температуры и давления. Результаты диссертации опубликованы в ведущих физических журналах (Phys. Rev. Lett., Phys. Rev. B, Eur. Phys. J., Scientific Reports, J. Phys. Condens. Matter и т.д.), что обуславливает как научную новизну, так и значимость представленных в данной диссертационной работе результатов.

В диссертационной работе представлен целый ряд новых фундаментальных результатов. Заслуживающим особого внимания, фундаментальным результатом, по моему мнению является концепция пространственно-селективного перехода Мотта под давлением в Fe_2O_3 , в рамках которой объясняется сложное поведение магнитных и решеточных свойств наблюдаемое в Fe_2O_3 под давлением. Описание нового типа перехода Мотта, несомненно, имеет фундаментальную важность для понимания как электронные степени свободы взаимодействуют с решеткой в моттовских системах. Поэтому без сомнения можно сказать, что диссертационная работа Леонова И.В. вносит весомый вклад в развитие основных идей физики конденсированного состояния.

В качестве пожелания, было бы интересно проследить влияние расщепления кристаллическим полем 3d состояний на эффект локализации носителей и, как следствие, на свойства коррелированных соединений. Важно, что данное замечание не снижает общей высокой оценки диссертационной работы, и выполненной на высоком научно-техническом уровне.

Считаю, что диссертационная работа представляет собой законченное комплексное теоретическое исследование, посвященное актуальной и важной проблеме современной физики конденсированного состояния. По объему и актуальности полученных результатов, достоверности, научной и практической ценности диссертационная работа Леонова И.В. полностью отвечает всем требованиям ВАК к докторским диссертациям, а её автор Леонов И.В. заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Сергей Юрьевич Саврасов

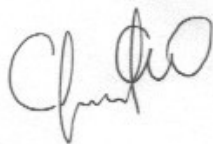
Профессор Физического Факультета

Калифорнийский Университет Дависа

Авеню Шильда, д. 1,

г. Давис, штат Калифорния, почтовый индекс 95616, США

адрес электронной почты: savrasov@physics.ucdavis.edu



22 Октября 2018 г.