

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. посвящена одному из наиболее актуальных направлений современной физики конденсированного состояния вещества, а именно исследованию свойств сильнокоррелированных электронных систем на примере соединений 3d переходных металлов. Автор развивает новые микроскопические подходы на основе DFT+DMFT метода, позволяющие описать взаимосвязь между электронной структурой, спиновым состоянием и решеточными свойствами подобных соединений в различных режимах перехода металл-изолятор Мотта, с существенно разным отношением величины кулоновского взаимодействия U к ширине зоны W . Модификация DFT+DMFT метода, разработанная автором, применима как к описанию свойств простых металлов с $U/W \ll 1$, сильнокоррелированных металлов с ярко выраженными хаббардовскими подзонами и квазичастичным пиком на уровне Ферми (резонанс Абрикосова-Сула) для $U/W \sim 1$, а также для объяснения свойств моттовского диэлектрического состояния для $U/W > 1$. Одной из принципиально важных особенностей данного подхода является способность объяснения как парамагнитного состояния с флуктуирующими локальными магнитными моментами (с квантовой динамикой), так и возможность описания свойств магнитно-упорядоченного состояния вещества.

Весьма важным и актуальным является предпринятое в диссертационной работе Леонова И.В. многостороннее теоретическое исследование различных групп материалов, с существенно отличными свойствами: от металлических магнетиков до сложных мотт-хаббардовских диэлектриков, включая описание поведения свойств подобных систем под высоким давлением. Автору удалось не только представить микроскопическое объяснение необычных физических свойств данных соединений и их эволюции под давлением и с изменением температуры, но и выделить общее, -- описать аномальную взаимосвязь между электронной структурой, магнитными свойствами и поведением решетки в сильнокоррелированных системах.

В диссертации получен целый ряд новых фундаментальных результатов, приведены оценки различных наблюдаемых (критических давлений перехода Мотта, величины скачка объема

решетки, величины структурных искажений и т.д.). Особенно приятно, что большинство полученных автором результатов можно непосредственно сравнить с экспериментом. На основе полученных диссертантом результатов предложены две новые концепции перехода Мотта диэлектрик-металл: переход Мотта с орбитально-селективной перенормировкой в V_2O_3 и пространственно-селективный переход Мотта под давлением в Fe_2O_3 . Все это, несомненно, имеет фундаментальную важность для описания взаимодействия решетки и электронных степеней свободы в моттовских системах, а сама диссертационная работа Леонова И.В. вносит весомый вклад в развитие основных идей физики конденсированного состояния.

В качестве незначительных замечаний я бы отметил недостаточно четкое описание в автореферате перехода в железе. Сначала указывается, что используется модель Бэйна с постоянным объемом ячейки, а затем сообщается что переход сопровождается скачком объема 2%. Также хотелось бы видеть более наглядное описание в автореферате перехода при сжатии в низкоспиновое состояние, Связан ли этот переход с нарушением 1го правила Хунда? Имеются описки («ангарманизм»), правда в незначительных количествах.

Указанные выше замечания не снижают общей высокой оценки диссертационной работы, описывающей новые подходы и содержащей новые данные о механизмах электронных, магнитных и решёточных превращений широкого круга соединений с сильными кулоновскими корреляциями.

В заключение хотелось бы отметить, что диссертация написана ясным научным языком. Основные результаты опубликованы в ведущих научных журналах, степень обоснованности научных положений и выводов, научная новизна и практическая ценность не вызывает сомнения. Содержание автореферата полностью соответствует материалам диссертации, а сама диссертация – специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния. Считаю, что диссертационная работа Леонова И. В. «Исследование электронной структуры, магнитных и решеточных свойств сильно коррелированных электронных систем комбинированным методом на основе теории функционала плотности и динамического среднего поля» полностью отвечает требованиям ВАК, предъявляемым к докторским диссертациям, а её автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук.

Академик РАН, доктор физ.-мат. наук

Директор Института физики высоких давлений РАН

В.В. Бражкин

Подпись Вадима Вениаминовича Бражкина заверяю

Ученый секретарь ИФВД РАН

Т.В. Валянская

108840 Москва, г. Троицк Калужское шоссе 14 ИФВД РАН
+7-495-851-00-11 brazhkin@hppi.troitsk.ru

