

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ ЭКСПЕРТНОЙ КОМИССИИ

по защите диссертации **Леонова Ивана Васильевича** на тему «Исследование электронной структуры, магнитных и решеточных свойств сильно коррелированных электронных соединений 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» и состоявшейся в НИТУ «МИСиС» 13 ноября 2018 года.

Диссертация принята к защите Диссертационным советом НИТУ «МИСиС» 28.06.2018, протокол №01.

Диссертация выполнена в лаборатории моделирования и разработки новых материалов НИТУ «МИСиС» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный консультант - доктор физико-математических наук, профессор, научный руководитель лаборатории моделирования и разработки новых материалов НИТУ «МИСиС», заведующий отделом теории и моделирования Института физики, химии и биологии Линчепингского университета (Швеция) Абрикосов Игорь Анатольевич.

Экспертная комиссия утверждена Диссертационным советом НИТУ «МИСиС» (протокол № 01 от 28.06.2018) в составе:

1. д.ф.-м.н. Мухин Сергей Иванович (заведующий кафедрой теоретической физики и квантовых технологий НИТУ «МИСиС») – председатель комиссии;
2. д.ф.-м.н. Штремель Мстислав Андреевич (ведущий эксперт кафедры металловедения и физики прочности НИТУ «МИСиС»);
3. д.ф.-м.н. Векилов Юрий Хоренович (профессор кафедры теоретической физики и квантовых технологий НИТУ «МИСиС»);
4. д.ф.-м.н. Григорьев Павел Дмитриевич (старший научный сотрудник ИТФ им. Ландау РАН);
5. д.ф.-м.н. Блантер Михаил Соломонович (профессор кафедры «Нанoeлектроника» МИРЭА - Российский технологический университет (РТУ МИРЭА));
6. д.ф.-м.н. Катанин Андрей Александрович (главный научный сотрудник лаборатории теоретической физики Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН (ИФМ УрО РАН));
7. д.ф.-м.н. Рубцов Алексей Николаевич (профессор кафедры квантовой электроники физического факультета ФГБОУ ВПО «Московский государственный университет им. Ломоносова»).

Экспертная комиссия отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- разработана новая расчетная методика (метод теории функционала плотности с динамическим средним полем, метод DFT+DMFT, с полным зарядовым самосогласованием в рамках метода псевдопотенциала), позволяющая учитывать влияние кулоновских корреляций на электронную структуру, магнитные свойства и структурное фазовое равновесие коррелированных соединений.
- представлен формализм линейного отклика для атомных смещений в рамках метода DFT+DMFT, позволяющий вычисление межатомных сил и атомных позиций кристаллической решетки сильнокоррелированных соединений в рамках теоремы Гельмана-Фейнмана.
- предложено оригинальное научное объяснение электронных, магнитных и решеточных свойств, а также эволюции данных свойств под давлением, ряда актуальных соединений 3d переходных металлов. В том числе, представлена микроскопическая теория антиферро-орбитального упорядочения и кооперативного эффекта Яна-Теллера в парамагнитных фазах  $\text{KCuF}_3$  и  $\text{LaMnO}_3$ ; дано теоретическое описание ОЦК-ГЦК структурного фазового равновесия в парамагнитном железе; приведены вычисления фононных спектров ОЦК и ГЦК железа в парамагнитном состоянии, как функции температуры; дано микроскопическое объяснение структурного фазового равновесия высокотемпературной ОЦК (дельта) фазы железа; объяснена эволюция свойств серии коррелированных оксидов под давлением вблизи перехода Мотта диэлектрик-металл (в монооксидах:  $\text{MnO}$ ,  $\text{FeO}$ ,  $\text{CoO}$  и  $\text{NiO}$ ,  $\text{Fe}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$  и оксидах:  $\text{V}_2\text{O}_3$  и  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ); приведено микроскопическое объяснение электронной структуры, магнитных и решеточных свойств халькогенида  $\text{FeSe}$  – соединения являющегося родительским для ВТСП систем на основе железа.
- в рамках описания свойств оксида  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  под давлением представлена концепция нового типа (электронного) перехода Мотта диэлектрик-металл--пространственно-селективный переход Мотта, характеризующегося коллапсом локальных моментов и металлизацией (делокализацией) 3d электронов только части (половины)  $\text{Fe}^{3+}$  ионов.
- описан новый микроскопический механизм перехода Мотта, связанный с сильной орбитально-селективной перенормировкой  $V t_{2g}$  состояний в  $\text{V}_2\text{O}_3$ . Предсказано возможное расслоения структурного превращения и электронного перехода Мотта в  $\text{V}_2\text{O}_3$ .

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- предложен новый вычислительный метод, обладающий предсказательной силой, позволяющий исследовать свойства веществ в области фазовой диаграммы, ранее недоступной в рамках использования стандартных зонных подходов.
- дано микроскопическое объяснение изменения физических свойств ряда коррелированных соединений вблизи перехода Мотта/ перехода, связанного с формированием/ коллапсом локальных моментов.
- описан новый микроскопический механизм перехода Мотта в реальных системах, характеризующийся сложным взаимодействием электронных, магнитных и решеточных степеней свободы -- пространственно-селективный переход Мотта в  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  и переход Мотта, связанный с сильной орбитально-селективной перенормировкой в  $\text{V}_2\text{O}_3$ .

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

- разработаны и апробированы новые вычислительные подходы, обладающие предсказательной силой, позволяющие вычислять различные характеристики коррелированных соединений, в том числе вблизи перехода Мотта диэлектрик-металл. В рамках диссертации представлено детальное исследование свойств диэлектриков Мотта с ян-теллеровским искажением решетки  $\text{KCuF}_3$  и  $\text{LaMnO}_3$ , металлических магнетиков с локальными магнитными моментами Fe и FeSe, коррелированных оксидов MnO, FeO, CoO, NiO,  $\text{Fe}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ , мотт-хаббардовских диэлектриков  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  и  $\text{V}_2\text{O}_3$ . Данные соединения благодаря аномальной чувствительности к малым изменениям внешних параметров (давления, температуры, магнитного/ электрического поля и параметров легирования) обладают большим потенциалом в рамках технологических применений в современной микро- и оптоэлектронике, для создания высокочувствительных и сверхбыстрых датчиков, катализаторов и т.д.
- приведены оценки различных характеристик представленных выше коррелированных систем под давлением.
- предложены новые микроскопические модели, позволяющие описать поведение физических свойств коррелированных соединений в широком диапазоне давлений.



Оценка достоверности результатов исследования выявила:

- результаты, представленные в диссертационной работе, получены с использованием обоснованного выбора физических приближений, в рамках применения широко апробированных методов вычисления электронной структуры сильнокоррелированных соединений, полученные результаты согласуются с опубликованными результатами других авторов и экспериментальными данными по теме диссертации, для анализа использованы современные методики обработки исходной информации.

Личный вклад соискателя состоит в:

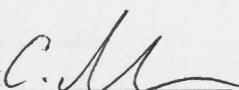
- в постановке всех научных задач, представленных в диссертации, личном участии в разработке моделей и вычислительных методов, их реализации в программных кодах и применении, обработке и интерпретации полученных результатов, подготовке основных публикаций по выполненной работе и т.п.. Основная часть численных расчетов, а также разработка, реализация и тестирование компьютерных программ выполнены автором лично или при его непосредственном участии.

Соискатель представил 20 опубликованных работ в рецензируемых научных изданиях из перечня, утвержденного Минобрнауки России, 20 из них опубликованы в изданиях, индексируемых в наукометрических базах данных Web of Science, Scopus.

Пункт 2.6 Положения о порядке присуждения ученых степеней в НИТУ «МИСиС» соискателем ученой степени не нарушен.

Экспертная комиссия приняла решение о возможности присуждения Леонову Ивану Васильевичу ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

При проведении тайного голосования экспертная комиссия в количестве 6 человек, участвовавших в заседании, из 7 человек, входящих в состав комиссии, проголосовала: за 6, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель Экспертной комиссии  Мухин С.И.

13.11.2018