

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Кузьмина Валерия Ипполитовича «Влияние ближнего порядка на электронные и магнитные свойства сильно коррелированных систем», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 физика конденсированного состояния.

Исследование свойств сильно коррелированных электронных систем - одно из актуальных направлений современной физики конденсированного состояния. Множество необычных свойств и сложность теоретического описания данного класса систем обуславливают высокий научный интерес к ним. Поэтому тему диссертационного исследования Кузьмина В.И. следует считать актуальной. В данной работе в рамках простейших микроскопических моделей сильных электронных корреляций исследуется электронный спектр и ближние спиновые корреляции в нормальном состоянии ВТСП купратов, а также магнитные свойства систем со спиновыми кроссоверами под давлением.

Во вводном разделе приведено описание актуальности и новизны исследования, указаны цель и задачи, приведены результаты, выносимые на защиту, произведена оценка их достоверности и указан личный вклад соискателя.

Первая глава является обзорной. В ней кратко описаны некоторые свойства ВТСП купратов, систем со спиновыми кроссоверами под давлением, микроскопические модели и методы их исследования. В конце главы объявлены цель и задачи работы.

Во второй главе решается методическая задача о том, насколько электронная структура модели Хаббарда, которая является фундаментальной моделью сильных электронных корреляций, может быть воспроизведена в t - J модели, которая может быть получена из модели Хаббарда в пределе большого кулоновского отталкивания во втором порядке теории возмущений и широко используется в литературе, - прежде всего для исследования свойств ВТСП купратов. Вопрос о соответствии возникает из-за того, что, строго говоря, эффективным гамильтонианом для модели Хаббарда является t - J^* модель, которая содержит трехцентровые перескоки помимо самой t - J модели, в которой ими пренебрегается. При этом амплитуда их пропорциональна обмену, т.е. нельзя говорить о ее малости при типичных

для ВТСП купратов значениях кулоновского отталкивания. Произведено сравнение электронной структуры в модели Хаббарда, t - J модели, t - J^* модели в рамках кластерной теории возмущений. Соискателем сделаны два вывода: вблизи половинного заполнения на низкоэнергетическом масштабе электронная структура согласуется достаточно хорошо во всех моделях, но при высоких энергиях квазичастиц порядка t учет трехцентровых перескоков необходим для воспроизведения дисперсии модели Хаббарда; при увеличении допирования расхождение между t - J моделью и моделью Хаббарда усиливается.

Третья глава посвящена исследованию формирования псевдощели и ближнего магнитного порядка в модели Хаббарда и их эволюции с допированием и температурой в рамках кластерной теории возмущений в нормальной фазе. Для кластеров достаточно большого размера 4×4 проанализировано поведение электронной спектральной функции и внутрикластерных спиновых корреляций при нулевой температуре в зависимости от допирования, а также при фиксированном допировании в зависимости от температуры. Сделан вывод об эволюции электронной структуры с допированием через три качественно различные стадии и отмечено, что данный вывод находится в согласии с более ранними расчетами для нулевой температуры в рамках других методов, а также то, что электронная структура находится в значительной взаимозависимости от ближнего магнитного порядка. Основным выводом главы является утверждение о том, что температурная зависимость электронной структуры и ближнего магнитного порядка качественно аналогична концентрационной и характеризуется сильной псевдощелью при низких температурах, слабой псевдощелью при повышении температуры до псевдощелевой температуры T^* , и ферми-жидкостным поведением при $T > T^*$.

Четвертая глава содержит результаты исследования магнитных свойств спинового кроссовера с ростом давления в двухорбитальной модели Канамори, содержащей синглетный (низкоспиновый) и триплетный (высокоспиновый) ионные термы, в рамках кластерной теории среднего поля. По четвертой главе выносятся на защиту температурные зависимости константы Кюри парамагнитной восприимчивости и ближних спиновых корреляторов, которые проявляют возвратное поведение, в отличие от стандартного гейзенберговского поведения, вблизи спинового кроссовера, а также оценка фазовой диаграммы ферропериклаза $(\text{Mg}, \text{Fe})\text{O}$ из рассматриваемой модели - для данного соединения указаны диапазоны температур и давлений, в котором можно ожидать полученные эффекты.

Закключение содержит основные результаты и выводы диссертации.

Полученные результаты предоставляют новые подробности о поведении электронных и магнитных свойств сильно коррелированных систем и в силу этого имеют значение для физики конденсированного состояния. Результаты опубликованы в трех статьях журнала Phys. Rev. B и были доложены на российских и международных конференциях. О достоверности результатов свидетельствует согласие с расчетами других авторов в рамках различных методов в частных случаях, а также использование методики, систематически учитывающей влияние ближних корреляций.

В качестве замечаний хотелось бы отметить несколько пунктов:

1. На Рис. 3.3 (d), Рис 3.6 (d) и Рис. 3.16 (b) при высоких степенях легирования наблюдается нечто, что можно было бы назвать «горячими точками». На Рис. 3.16 (b) даже сдвоенные «горячие точки». Однако, это никак не обсуждается в диссертационной работе. Хотелось бы узнать мнение диссертанта о данных особенностях.

2. Также интересно, что на Рис. 3.6 (d) при $t^*=0$ имеются «горячие точки» и Ферми дуга в центре квадранта зоны Бриллюэна, хотя казалось бы при данных условиях именно здесь поверхность Ферми должна быть наиболее сильно разрушена псевдощелевыми эффектами.

3. На Рис. 3.11 представлены спектры с явно выраженной запрещенной щелью в окрестности уровня Ферми, однако, этот факт не отражен в диссертации, также не обсуждается природа этой запрещенной зоны.

4. В главе 4 показано, что для рассматриваемых систем возникает магнитный фазовый переход первого в некоторой области модельных параметров. Известно, что при переходе первого рода ферромагнетик-парамагнетик возникает область фазового расслоения, что было показано для модели Хаббарда в ряде работ. Однако, данный момент не обсуждается в представленной диссертационной работе.

Приведенные выше замечания не снижают общую положительную оценку работы. Диссертация представляет собой законченную научно-исследовательскую работу, содержит решение ряда важных научных задач об электронных и магнитных свойствах ВТСП купратов и систем со спиновыми кроссоверами. Содержание работы адекватно отражено в автореферате и публикациях. Считаю, что данная диссертация удовлетворяет требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Кузьмин

Валерий Ипполитович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент,
доктор физ.-мат. наук (01.04.07),
профессор РАН, член-корреспондент
РАН



Некрасов
Игорь Александрович

«11» нояб 2020

Подпись И. А. Мещеряков
заверяю : И. А.
зам. Директора Бол



Сведения об оппоненте

по диссертационную работу Кузьмина Валерия Ипполитовича «Влияние ближнего порядка на электронные и магнитные свойства сильно коррелированных систем», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 физика конденсированного состояния.

Фамилия, имя, отчество	Некрасов Игорь Александрович
Ученая степень и отрасль науки	доктор физико-математических наук
Шифр и наименование специальности, по которой защищена диссертация	01.04.07– физика конденсированного состояния
Ученое звание	член-корреспондент РАН
Полное наименование организации, являющейся основным местом работы оппонента, ведомственная принадлежность	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук»
Почтовый индекс, адрес	620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 106 http://www.iep.uran.ru
Телефон, e-mail	+7 (343) 2678823 nekrasov@iep.uran.ru
Структурное подразделение	лаборатория теоретической физики
Занимаемая должность	Главный научный сотрудник
Список основных публикаций официального оппонента по теме диссертации в рецензируемых изданиях за последние 5 лет (не более 15 публикаций)	1. PI Bezotosnyi, KA Dmitrieva, AV Sadakov, KS Pervakov, AV Muratov, AS Usoltsev, A Yu Tsvetkov, S Yu Gavrilkin, NS Pavlov, AA Slobodchikov, O Yu Vilkov, AG Rybkin, IA Nekrasov, VM Pudalov, Electronic band structure and superconducting properties of SnAs, Physical Review B 100 (18), 184514 (2019). 2. PA Igoshev, IA Nekrasov, NS Pavlov, TH Chinyaev, EO Yakupov, Investigation of magnetocaloric effect: Stoner approximation vs DMFT, Journal of Physics: Conference Series 1389 (1), 012083 (2019). 3. IA Makarov, VA Gavrichkov, EI Shneyder, IA Nekrasov, AA Slobodchikov, SG Ovchinnikov, Antonio Bianconi, Effect of CuO₂ Lattice Strain on the Electronic Structure and Properties of High-T_c Cuprate Family, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism 32 (7), 1927-1935 (2019). 4. I. A. Makarov, V. A. Gavrichkov, E. I. Shneyder, I. A. Nekrasov, A. A. Slobodchikov, S. G. Ovchinnikov, A. Bianconi / Effect of CuO₂ Lattice Strain on the Electronic Structure and Properties of High-T_c Cuprate Family // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, https://doi.org/10.1007/s10948-018-4936-9 5. I. A. Nekrasov and N. S. Pavlov / Hidden Fermi Surface in KxFe₂-ySe₂: LDA + DMFT Study // JETP Letters, 2018, Vol. 108, No. 9, pp. 623–626 6. PA Igoshev, EE Kokorina, IA Nekrasov / Investigation of the magnetocaloric effect in correlated metallic systems with Van Hove singularities in the

	electron spectrum // Physics of Metals and Metallography 118 (3), 207-216 (2017) 7. IA Nekrasov, NS Pavlov, MV Sadovskii / On the origin of the shallow and “replica” bands in FeSe monolayer superconductors // JETP Letters 105 (6), 370-374 (2017) 8. VA Gavrichkov, ZV Pchelkina, IA Nekrasov, SG Ovchinnikov / Pressure effect on the energy structure and superexchange interaction in undoped orthorhombic La₂CuO₄ // International Journal of Modern Physics B 30 (25), 1650180 (2016) 9. IA Nekrasov, NS Pavlov, MV Sadovskii, AA Slobodchikov / Electronic structure of FeSe monolayer superconductors // Low Temperature Physics 42 (10), 891-899 (2016) 10. Coupling of Hubbard fermions with phonons in La₂CuO₄: A combined study using density-functional theory and the generalized tight-binding method/ E.I. Shneyder, J. Spitaler, E.E. Kokorina [et al.] // Journal of Alloys and Compounds. – 2015. – V. 648. – Pp. 258-264. 11. Nekrasov, I. A. Electronic structure of NaFeAs superconductor: LDA+DMFT calculations compared to the ARPES experiment/ I.A. Nekrasov, N.S. Pavlov, M.V. Sadovskii//JETP Letters. – 2015. – V. 102, no.1. – Pp. 26-31. 12. Nekrasov, I. A. Electronic and magnetic properties of the new iron-based superconductor [Li_{1-x}Fe_xOH]FeSe/ I.A. Nekrasov, M.V. Sadovskii// JETP Letters. – 2015. – V. 101, no. 1. – Pp. 47-50. 13. Mutual independence of critical temperature and superfluid density under pressure in optimally electron-doped superconducting LaFeAsO_{1-x}F_x/ G. Prando, T. Hartmann, W. Schottenhamel [et al.] //Physical review letters. – 2015. – V. 114, no. 24. – P. 247004.
--	--

Верно

Директор ФГБУН «Институт электрофизики
Уральского отделения Российской академии
наук»

