

## ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу

*Кузяна Романа Оганесовича*

«Моделювання фізичних властивостей оксидних сполук перехідних металів у рамках мікроскопічної узагальненої багатозонної моделі Габбарда»

яка представлена на здобуття наукового ступеня

доктора фізико-математичних наук за спеціальністю

01.04.07 – фізика твердого тіла

Перш за все, варто зазначити **актуальність проблеми**, розв'язанню якої присвячена представлена робота. Протягом тривалого часу серед напрямків наукової діяльності, до яких найбільш активно долучалася світова наукова спільнота, завжди були присутні ті, що так чи інакше пов'язані зі сполуками на основі перехідних металів (високотемпературна надпровідність, колосальний магнітоопір, феромагнетизм в розбавлених магнітних напівпровідниках тощо). Швидко зростаючий за обсягом експериментальний доробок у цих напрямках вимагає від теоретиків відповідних дій, завдяки яким накопичені результати спостережень отримують свою інтерпретацію та піддаються критичному аналізу. Одним з нагальних питань у цьому контексті була та залишається проблема розробки дієвих обчислювальних методів для функцій відгуку на зовнішні електромагнітні поля у сполуках перехідних металів. Слід підкреслити, що наявність сильних кореляцій в електронних  $d$ -оболонках іонів перехідних металів значно ускладнює задачу й призводить до необхідності використання багаточастинкової квантової теорії. Ввижається доцільним розглядати згаданий клас матеріалів, виходячи з єдиного, узгодженого підходу.

Треба відзначити, що **тема дисертації Кузяна Р.О. узгоджена з планами наукових досліджень** відділу функціональних оксидних матеріалів Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України в рамках

держбюджетних науково-дослідних робіт: «Нова генерація матеріалів на основі віртуальних сегнетоелектриків для використання в умовах космосу» (2006-2007); «Моделювання електронних поверхневих станів і прогнозування фізичних властивостей наноструктур з різною морфологією» (2007-2009); «Розробка фізико-хімічних основ створення вільної від свинцю текстурованої кераміки на основі віртуальних сегнетоелектриків з високим рівнем електрофізичних властивостей, необхідних для приладів новітньої електронної техніки» (2007-2009); «Моделювання електронних, механічних, температурних, флексоелектричних і флексомагнітних властивостей та поверхневих станів наноматеріалів, а також фазових переходів, індукованих магнітними домішками» (2010-2012); «Моделювання магнітних властивостей, магнітоелектричних взаємодій та аномалій поверхневих станів в наноматеріалах, мультифероїках і графеноподібних матеріалах» (2013-2015); «Синтез та дослідження нових однофазних залізомістких оксидних магнітоелектриків з мультифероїдною фазою поблизу кімнатних температур» (2014-2015); «Моделювання особливостей фазових діаграм та фізичних властивостей оксидних мультифероїків з ротосиметрією, електронної структури реальних поверхонь в кристалах типу сфалериту і вюрциту та оксидних уособлених нанокластерів, імплантованих магнітними домішками» (2016-2018). А також міжнародних проектів: NATO PROGRAMME SECURITY THROUGH SCIENCE, Collaborative Linkage Grant «Excitations and Quasiparticles in Low Dimensional Transition Metal Compounds» (2000-2002); NATO PROGRAMME SECURITY THROUGH SCIENCE, Collaborative Linkage Grant «Exchange couplings and anisotropy in diluted magnetic oxide semiconductors» (2005-2007); Спільний проект НАНУ і Національного центру наукових досліджень Франції «Теоретичні дослідження розчинних магнітних напівпровідників з відсутнім центром інверсії» - CNRS, France and NASU: PICS (2009-2011); Програма НАТО «Наука заради миру і безпеки» - NATO Science for Peace and Security Programme «New Oxide and Nitride Wurtzite Structures for Security Applications" (2014-2017).

**Метою роботи** Кузяна Р.О. була розробка системного підходу до моделювання фізичних властивостей сполук перехідних металів на основі сучасних уявлень про електронну структуру і про роль кореляційних ефектів. **Об'єктом дослідження** виступали сполуки перехідних металів групи заліза, **предметом дослідження** - парамагнітні домішки в оксиді цинку (Co, Mn) і в матеріалах зі структурою перовськіту, подвійні перовськіти на основі заліза та купрати.

На відміну від багатьох докторських дисертацій, дана робота дійсно є цілісною науковою працею, в якій вдало сформульовані задачі дослідження, а відповідні розділи логічно та послідовно зв'язані між собою: всі вони спрямовані на вирішенні визначеної автором мети. Тому я не бачу потреби зупинятися на окремих розділах дисертації, а підкреслю лише основні, по-справжньому **нові результати**, що були отримані автором і представлені в даній в роботі.

В дисертації вперше для широкого класу матеріалів запропоновано системний підхід до моделювання фізичних властивостей шляхом побудови реалістичної багатозонної узагальненої моделі Габбарда. Вперше продемонстрована можливість пов'язати відгуки системи в різних діапазонах енергій, використовуючи ефективні моделі, строго одержані з основної моделі методом проектування Левдіна або канонічного перетворення.

Зокрема, в рамках запропонованого підходу отримані такі результати:

- Для парамагнітних домішок вперше показано зв'язок ефективного спінового гамільтоніана з локальною електронною структурою матеріалу. Запропоноване мікроскопічне обґрунтування суперпозиційної моделі поля лігандів (ефективного кристалічного поля), показана необхідність врахування кореляційних ефектів.
- Розвинуто модель суперобміну між багатоелектронними іонами з урахуванням реальної геометрії *d*-орбіталей, габбардовської і гундовської взаємодій між електронами в *d*-оболонці іона перехідного металу.

- Вперше показана можливість утворення феримагнітних надструктур, які призводять до встановлення магнітного далекого порядку при як завгодно малій концентрації іонів перехідних металів. Запропоновано пояснення нелінійної поведінки кривих намагніченості і наявності петель гістерезису при кімнатній температурі, що спостерігаються в напівпровідниках, легованих перехідними металами і в подвійних перовськітах.
- Отримала розвиток модель подвійного обміну. В рамках моделі Габбарда з виродженням вперше показано, що низькоенергетичними квазічастинками в цій моделі є орбітальні полярони.
- Вперше запропоновано мікроскопічні механізми магнітоелектричної взаємодії у віртуальних сегнетоелектриках, легованих марганцем.
- Для перспективного класу купратів, що містять  $\text{CuO}_2$  ланцюжки з крайовим зачепленням  $\text{CuO}_4$  кластерів (edge-sharing cuprates) отримано такі результати.

Оскільки автором дисертації використовувалися адекватні методи теоретичної фізики, строгий математичний апарат та загально відомі модельні наближення (метод канонічних перетворень, метод проектування Левдіна, метод функцій Гріна для неупорядкованої системи, лінійна теорія спінових хвиль, комп'ютерні розрахунки зонної структури в межах наближення локальної спінової густини  $L(S)DA$ , та  $LSDA+U$ , метод представлення функції Гріна у вигляді ланцюгового дробу), можна із впевненістю стверджувати, що **отримані рівняння, сформульовані положення та зроблені висновки є достатньо науково-обґрунтованими та достовірними.**

Слід також підкреслити теоретичну та практичну **цінність та значення** отриманих Кузяном Р.О. та представлених в дисертації **результатів**: вони вже буди з успіхом використані для інтерпретації експериментів по електронному парамагнітному резонансу, непружному розсіюванню нейтронів, резонансному непружному розсіюванню рентгенівських променів, для опису магнітних

властивостей оксидних матеріалів, проведених як в провідних вітчизняних, так і закордонних лабораторіях.

Всі головні положення дисертаційної роботи, винесені на захист, **були опубліковані** у 36 статтях в реферованих міжнародних журналах і **пройшли апробацію** на 18 конференціях. Деякі з представлених результатів та запропонованих підходів вже знайшли своє використання в дослідженнях інших вчених й широко цитуються в літературі: кількість цитувань опублікованих робіт - понад 760, згідно з Web of Science, понад 980 згідно Google Scholar.

Однак, проведений детальний аналіз дисертаційної роботи дозволив виявити певні недоліки.

- В Розділі 5.4. автором запропоновано елегантний метод визначення спектра двохмагнетонних збуджень за наявності великого магнітного поля. Дану проблему, як виявляється, вдається звести до задачі про ізольовану домішку у трансляційно інваріантній системі. При цьому домішкове збурення має відмінне від нуля значення на декількох щільно розташованих вузлах ефективної кристалічної ґратки. Проте, в процесі подальшого розрахунку функція Гріна системи з одиничним дефектом розраховується ітераційно шляхом послідовного обчислення домішкових потенціалів, розташованих на окремих вузлах. Представляється, що можна було би досягнути більшого розуміння впливу параметрів задачі на кінцевий результат, якби було б розраховано відповідну Т-матрицю розсіювання, особливо беручи до уваги, що вона, у даному випадку, є матрицею не занадто великого порядку.

- В Розділі 7.3 автор зауважує, що ним запропоновано новий метод, який дає функцію Гріна у формі ланцюгового дробу. Метод розрахунку спектральної функції, про який йдеться, дійсно є новаторським. Однак, наявне твердження автора щодо запропонованого ним методу є дещо перебільшеним. У тому формулюванні, яке присутнє в роботі, дане твердження набуває змісту, що не зовсім відповідає дійсності. Адже метод представлення функції Гріна у формі

ланцюжкового дробу давно і добре відомий у фізиці неупорядкованих систем. Слід хоча б згадати про роботи Хайдока та Пересади. Для справедливості слід зауважити, що в роботі наявні належні посилання на оригінальні роботи, в яких вперше вводився метод розкладення функції Гріна в нескінченний ланцюжковий дріб. Проте, наведеному в дисертації формулюванню слід було б надати дещо іншого звучання.

- На рис. 7.10. в дисертаційній роботі графічно представлено закон дисперсії при зміні величини оптичного потенціалу, який вносить ефективне затухання в систему. На графіку представлені енергетичні залежності як дійсної, так і уявної частин хвильового вектору. При цьому виявляється, що в області щілини, яка була присутня в спектрі за відсутності ефективного затухання, з'являються стани з певною дисперсією у напрямку, перпендикулярному до границі зразка. Дійсно, введення затухання приведе до розмиття країв зон і, за подальшого його зростання, до цілковитого розмиття щілини, як такої. Як видно з рисунку, дистанція між дійсною частиною хвильового вектору та границею зони в околі щілини є суттєво меншою уявної частини хвильового вектору. Таким чином, критерій Іоффе-Регеля на даному інтервалі енергії не виконується. Використання у даному випадку закону дисперсії для опису систематики станів не виглядає коректним. Належна інтерпретація представлених результатів, з моєї точки зору, потребує подальшого осмислення.

Зроблені зауваження спрямовані, скоріше, на перспективи й поліпшення якості подальших досліджень дисертанта, вони не применшують значимість представлених в дисертаційній роботі результатів та загальну позитивну оцінку самої роботи у цілому.

Детальне вивчення автореферату дисертації показав, що сам **автореферат та наведені у ньому публікації адекватно й у достатній мірі повно передають зміст дисертації.**

**За своїм змістом, спрямованістю, результатами та висновками представлена дисертаційна робота цілком відповідає спеціальності 01.04.07 – фізика твердого тіла.**

Ступінь обґрунтованості висновків та основних положень, актуальність обраної тематики, беззаперечна новизна, важливість та достовірність отриманих результатів дозволяють впевнено стверджувати, що подана дисертаційна робота Р.О. Кузяна «Моделювання фізичних властивостей оксидних сполук перехідних металів у рамках мікроскопічної узагальненої багатозонної моделі Габбарда» відповідає усім кваліфікаційним вимогам пунктів 9, 10, 12 «Порядку присудження наукових ступенів» Постанови Кабінету Міністрів України від 24 липня 2013 року за № 567, які висуваються до докторських дисертацій, а її автор, Кузян Роман Оганесович, заслуговує присудження йому наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла.

**Провідний науковий співробітник  
відділу теорії нелінійних процесів  
в конденсованих середовищах  
Інституту теоретичної фізики  
ім. М.М. Боголюбова НАНУ  
доктор фізико-математичних наук**

**Ю.В. Скрипник**

**Підпис Ю.В. Скрипника засвідчую,  
Учений секретар Інституту теоретичної фізики  
ім. М.М. Боголюбова НАНУ  
кандидат фізико-математичних наук  
старший науковий співробітник**

**С.М. Перепелиця**