

На правах рукописи



Николаев Сергей Алексеевич

**ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ДИНАМИКИ РЕШЕТКИ, ФЕРРОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ
ПОЛЯРИЗАЦИИ И ОРБИТАЛЬНОГО МАГНЕТИЗМА
В СЛОЖНЫХ ОКСИДАХ МАРГАНЦА**

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Екатеринбург – 2015

Работа выполнена на кафедре «Теоретическая физика и прикладная математика» Физико-технологического института ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор
Мазуренко Владимир Гаврилович

Научный консультант: доктор физико-математических наук
Соловьев Игорь Владимирович

Официальные оппоненты: **Кучинский Эдуард Зямович**,
доктор физико-математических наук, ФГБУН
Институт электрофизики Уральского отделения
Российской академии наук, ведущий научный
сотрудник лаборатории теоретической физики;

Потеряев Александр Иванович,
кандидат физико-математических наук,
ФГБУН «Институт физики металлов имени
М.Н. Михеева» Уральского отделения Российской
академии наук, старший научный сотрудник
лаборатории оптики металлов

Ведущая организация: **ФГБУН Институт химии твердого
тела Уральского отделения Российской
академии наук**

Защита состоится «13» февраля 2015 г. в 15:00 ч. на заседании диссертационного совета Д 212.285.02 на базе ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по адресу: 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира 19, ауд. И-420 (Зал Ученого совета).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»: <http://dissovet.science.urfu.ru/news2/>.

Автореферат разослан « ____ » _____ 2015 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета

Ищенко Алексей Владимирович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Одной из главных задач современной науки является поиск и исследование многофункциональных материалов, в которых наблюдается одновременная взаимосвязь различных эффектов на микроскопическом уровне. Данное направление имеет большие перспективы в информационных технологиях, которые стремятся к усовершенствованию и миниатюризации интегрированных полупроводниковых устройств, и в таких самостоятельных областях как спинтроника и магноника, исследующих процессы передачи информации посредством спиновой поляризации электрического тока и спиновых волн, соответственно [1, 2].

Множество работ посвящено изучению свойств мультиферроиков – материалов, одновременно проявляющих магнитные и ферроэлектрические свойства, сложная взаимосвязь которых открывает широкий спектр практических приложений, основанных главным образом на магнитоэлектрическом эффекте [3–5]. Особым классом данных соединений являются несобственные мультиферроики, в которых возникновение макроскопической поляризации связано с корреляционными эффектами и является результатом фазового перехода второго рода [6–7]. В данных материалах на микроскопическом уровне тесно связаны спиновые, орбитальные и решеточные степени свободы, а наличие магнитоэлектрического эффекта делает их перспективными материалами для разработки различного рода устройств. Но помимо технологических приложений, мультиферроики представляют большой интерес с точки зрения фундаментальных исследований и являются наиболее подходящими системами для апробации многих физических моделей.

С точки зрения разнообразия физических свойств сложные оксиды марганца занимают важное место среди многофункциональных материалов. Наблюдение колоссального магнитосопротивления в LaMnO_3 , допированного Са, привело к большому числу исследований редкоземельных манганитов, среди которых был найден широкий класс, проявляющий сильную связь между структурными и магнитными свойствами [8]. Открытие ферроэлектрической поляризации в TbMnO_3 и ее контроля внешним магнитным полем в работах [9, 10] вызвало новую волну исследований,

направленных на понимание природы данной связи и поиск новых материалов, обладающих подобными свойствами. Так магнитоэлектрический эффект был экспериментально отмечен в других манганитах HoMnO_3 и YMnO_3 [11].

Степень разработанности темы исследования. Сложные оксиды марганца, проявляющие свойства мультиферроиков и слабого ферромагнетизма, имеют широкий спектр потенциальных приложений и находятся в центре внимания современной науки как в фундаментальных, так и прикладных исследованиях. Тем не менее, основные механизмы возникновения макроскопической поляризации и магнитного упорядочения во многих рассматриваемых системах до конца не изучены и не имеют единой точки зрения. Кроме того, большинство теоретических работ направлено на изучение электронных свойств в данных материалах, в то время как наблюдается острый недостаток в исследовании динамики решетки, что необходимо в первую очередь для подтверждения экспериментальных спектров и корректного учета колебаний атомов в прогнозировании свойств материалов. С другой стороны расчеты орбитальной намагниченности в твердых телах в течение долгого периода времени представляли собой сложную задачу методологического характера, которая затем была решена в современной теории орбитальной намагниченности. Тем не менее ее применение в рамках первопринципных методов весьма ограничено, что ставит целью создание расчетного метода и его апробации на реальных системах.

Целью диссертационной работы является первопринципное исследование особенностей колебательных спектров, ферроэлектрических свойств и орбитального магнетизма в сложных оксидах марганца. **Задачи исследования** сформулированы следующим образом:

1. Провести первопринципное исследование динамики решетки низкотемпературной фазы орторомбического YMnO_3 с учетом возможных магнитных конфигураций и на основе полученных данных интерпретировать экспериментальные спектры.

2. Провести теоретическое исследование ферроэлектрической активности в классе сложных оксидов марганца на основе модели двойного обмена, в рамках которой представить наглядное объяснение механизмов возникновения электрической поляризации.

3. Реализовать формализм современной теории орбитальной намагниченности в рамках приближения Хартри-Фока для эффективной модели Хаббарда, на основе которого получить распределение орбитальных магнитных моментов в LaMnO_3 и сделать выводы о применимости методики относительно стандартных подходов.

Научная новизна представленных в диссертационной работе результатов состоит в следующем:

1. *Впервые* проведены первопринципные расчеты колебательных спектров в орторомбическом YMnO_3 , а также исследована их связь с магнитным порядком в системе;

2. *Впервые* представлена наглядная физическая интерпретация, основанная на модели двойного обмена, для ферроэлектрической активности в сложных оксидах марганца;

3. *Впервые* современная теория орбитальной намагниченности была реализована в приближении Хартри-Фока и эффективной модели, построенной из первых принципов, а также апробирована на примере ряда оксидов переходных металлов. Идея изучения поправок в стандартное определение орбитального магнитного момента, возникающих в современной теории, является оригинальной.

Научная и практическая ценность диссертационной работы заключается:

1. Первопринципное описание фононных спектров YMnO_3 отражает важность более детального исследования связи электронных, магнитных и колебательных степеней свободы, что играет одну из ключевых ролей в микроскопическом понимании свойств мультиферроиков;

2. Достигнуто более глубокое понимание механизмов ферроэлектрической активности в ключевых представителях класса сложных оксидов марганца, которое может найти применение в задачах управления и контроля электрической поляризации в несобственных мультиферроиках;

3. Разработанная схема расчета орбитальной намагниченности в рамках современной теории и приближения Хартри-Фока может быть использована как стартовая точка в дальнейших методологических работах, направленных на описание орбитального магнетизма из первых принципов.

Методология и методы исследования, используемые в данной работе, основаны на теории функционала электронной плотности, в рамках которой рассчитаны электронные и колебательные спектры, а также получены параметры эффективных моделей для рассматриваемых систем. Исследование ферроэлектрической активности выполнено на основе формализма современной теории электрической поляризации в модели двойного обмена для эффективной модели Хаббарда в приближении Хартри-Фока. Исследование орбитального магнетизма выполнено в рамках современной теории орбитальной намагниченности, реализованной в приближении Хартри-Фока для эффективной модели Хаббарда.

Положения, выносимые на защиту:

1. Формирование высокочастотных пиков на частотах 496 см^{-1} и 620 см^{-1} в колебательных спектрах YMnO_3 связано с переходом в низкотемпературную фазу с группой симметрии $P2_1nt$ и формированием антиферромагнитного порядка E-типа, основной вклад в их образование вносят колебания с неприводимыми представлениями B_{2g} и $A_g(3)$, что соответствует модам растяжения и искажения октаэдров MnO_6 с софазным и противофазным колебаниями ионов кислорода в плоскости, соответственно.

2. Механизм двойного обмена является ключевым приближением, которое позволяет описать ферроэлектрические свойства манганитов в рамках простой физической модели, построенной на основе теории возмущений по параметрам, характеризующим расщепление электронных уровней, где электрическая поляризация может быть выражена аналитически через корреляционные функции, определяющие взаимную ориентацию магнитных моментов в системе.

3. Возникновение электрической поляризации в орторомбических манганитах представляет собой взаимосвязанный эффект пространственно неоднородной магнитной конфигурации и орбитального упорядочения антиферро-типа, в котором ферроэлектрическая активность определяется деформацией магнитной структуры типа спиновой спирали вследствие спин-орбитального взаимодействия.

4. Орбитальный магнитный момент в приближения Хартри-Фока для эффективной модели, описывающей низкоэнергетическую область спектра оксидов переходных металлов, может быть рассчитан на основе стандартного

определения \mathcal{M}^0 через матричные элементы оператора орбитального момента, в то время как поправки $\Delta\mathcal{M}^{LC}$ и \mathcal{M}^{IC} , возникающие в современной теории орбитальной намагниченности, вносят пренебрежимо малый вклад в результате взаимного сокращения отдельных компонент в обратном пространстве, что, в свою очередь, отражает важность учета нелокальных вкладов в орбитальную намагниченность.

Личный вклад автора состоит в непосредственном участии в разработке программ и алгоритмов моделирования, обработке и интерпретации результатов, а также их апробации. Автором были проведены все первопринципные расчеты электронных и фононных спектров орторомбического манганита YMnO_3 , выполнены расчеты электрической поляризации в модели двойного обмена и приближении Хартри-Фока для всех рассматриваемых систем и получены аналитические выражения ферроэлектрической поляризации в теории возмущений для моноклинного BiMnO_3 и гексагонального YMnO_3 . Наконец, автором разработан, реализован и апробирован метод расчета орбитальных магнитных моментов на основе современной теории орбитальной намагниченности в приближении Хартри-Фока. Параметры эффективных гамильтонианов в модели Хаббарда, а также аналитическое выражение для электрической поляризации орторомбического YMnO_3 в теории возмущений были получены И.В. Соловьевым. Постановка задач, выбор методов их решения и обсуждение полученных результатов были проведены совместно с научным руководителем и научным консультантом.

Степень достоверности и апробация диссертационной работы подтверждена публикациями в высокорейтинговых журналах, представлении результатов на конференциях, а также следующими факторами:

- расчеты электронных и колебательных спектров, а также параметров эффективных моделей выполнены в рамках теории функционала электронной плотности, которая в настоящее время является наиболее распространенным первопринципным методом в теоретической физике конденсированного состояния;
- исследование ферроэлектрических свойств и орбитального магнетизма

основано на современных теориях электрической поляризации и орбитальной намагниченности, которые являются наиболее разработанными теориями для описания данных свойств в периодических системах.

Основные положения диссертационной работы докладывались автором на European School on Magnetism, 2011 (г. Тырговиште, Румыния, 2011), Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых ВНКСФ-19 (г. Архангельск, 2013), XIV Всероссийской школе-семинаре по проблемам физики конденсированного состояния вещества СПФКС-14 (г. Екатеринбург, 2013).

Публикации. Результаты исследований изложены в шести публикациях, из которых четыре в зарубежных реферируемых изданиях и две в сборниках конференций.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, двух приложений, списка условных обозначений и списка литературы. Объем диссертации составляет 119 страниц, включая 3 таблицы и 19 рисунков.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность исследований, сформулированы цели и задачи диссертационной работы, ее научная новизна и практическая значимость, приведены положения, выносимые на защиту, указаны личный вклад автора, апробация, структура и объем работы.

В **первой главе** «Методы расчета электронных и колебательных свойств в твердых телах» приведен обзор основных первопринципных методов расчета электронной структуры и динамики решетки в кристаллах, а также современных теорий электрической поляризации и орбитальной намагниченности. В первой части главы кратко описаны ключевые положения формализма функционала электронной плотности, приближения локальной электронной плотности и его расширение в методе $LDA+U$, с помощью которого моделируются электронные корреляционные эффекты в переходных металлах,

представлен обзор теории возмущений функционала электронной плотности и метода линейного отклика, которые позволяют рассчитать колебательные спектры на основе расчетов электронной структуры, а также описан метод Хартри-Фока для решения эффективной многоорбитальной модели Хаббарда, построенной для низкоэнергетической области электронного спектра, и кратко изложены методы ее построения в рамках первопринципных расчетов. Во второй части главы представлен обзор современных теорий электрической поляризации и орбитальной намагниченности, формализм которых основан на геометрии фаз Берри и в настоящее время является основным методом исследования ферроэлектричества и орбитального магнетизма в периодических системах.

В конце первой главы с учетом целей диссертации сформулированы основные задачи, приведенные в общей характеристике работы.

Вторая глава «Влияние магнитного порядка на динамику решетки в орторомбическом YMnO_3 » посвящена первопринципному исследованию колебательных спектров орторомбического YMnO_3 в низкотемпературной фазе с группой симметрии $P2_1nm$. С этой целью нами выполнены расчеты в рамках теории возмущений функционала плотности [12] с учетом электронных одноузельных корреляций в приближении LDA+ U [13], которая реализована в вычислительном пакете VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package [14]). На первом этапе работы показано, что антиферромагнитная (АФМ) конфигурация E-типа является энергетически наиболее выгодной в низкотемпературной фазе YMnO_3 , но для параметра $U = 6.0$ эВ стабилизируется АФМ A-тип.

На этапе расчетов динамики решетки нами определены эффективные заряды Борна и тензор высокочастотной статической диэлектрической проницаемости. Величины зарядов Борна отличаются от своих номинальных значений, что в первую очередь отражает наличие динамических вкладов в статический заряд в результате ферроэлектрического фазового перехода. Более того, нарушение симметрии пространственной инверсии при переходе в низкотемпературную фазу приводит к анизотропии диагональных компонент зарядов Борна, а также появлению недиагональных вкладов, что является следствием сильного искажения октаэдров MnO_6 .

На основе полученных силовых констант, эффективных зарядов Борна

и диэлектрического тензора построены дисперсионные кривые и фононные плотности состояний YMnO_3 для магнитных конфигураций А- и Е-типов с использованием пакета Phonopy [15]. Поскольку низкотемпературная фаза $P2_1nm$ является полярной, в данной работе учтены неаналитические поправки динамической матрицы, приводящие к расщеплению продольных и поперечных оптических мод для волновых векторов $\mathbf{q} \rightarrow 0$ [12].

Из представленных на рисунке 1 фононных плотностей состояний видно, что характерной особенностью полученных спектров является наличие двух высокочастотных пиков 510 см^{-1} и 610 см^{-1} , наблюдаемых в магнитной конфигурации Е-типа. Главный вклад в их образование дают колебания октаэдров MnO_6 , а именно колебания ионов кислорода O_2 и O_3 . Стоит отметить, что пик II на частоте 610 см^{-1} имеет место только для конфигурации Е-типа, в то время как пик I на частоте 520 см^{-1} характерен для обоих представленных спектров, но также более заметен в Е-типе. Учет одноузельного кулоновского взаимодействия приводит к более выраженному проявлению второго пика для параметров $U \geq 2.0 \text{ эВ}$, а его значение 610 см^{-1} для $U = 2.0 \text{ эВ}$ находится в хорошем согласии с экспериментально полученной частотой 620 см^{-1} [16]. Величина пика I также находится в хорошем согласии с экспериментальным значением 495 см^{-1} .

В **третьей главе** «Ферроэлектрическая активность в модели двойного обмена» представлено исследование, направленное на установление связи между первопринципными расчетами и эффективными моделями для электрической поляризации, где на основе формализма фаз Берри и модели двойного обмена дана физическая интерпретация механизмов возникновения электрической поляризации в сложных оксидах марганца.

Исходной точкой данного исследования является тот факт, что основные электронные и магнитные свойства манганитов достаточно хорошо описываются эффективным гамильтонианом, построенным в базисе функций Ванье для $3d$ -орбиталей Mn [17]:

$$\hat{\mathcal{H}}_{ij}^{\text{MF}} = \hat{t}_{ij} + \hat{\mathcal{V}}_i \delta_{ij}, \quad (1)$$

где i, j – номер атома, $\hat{t}_{ij} = ||t_{ij}^{mm'}||$, $m(m') = xy, yz, 3z^2 - r^2, zx$ и $x^2 - y^2$; матричные элементы \hat{t}_{ij} отвечают за кристаллическое поле ($i = j$) и интегралы

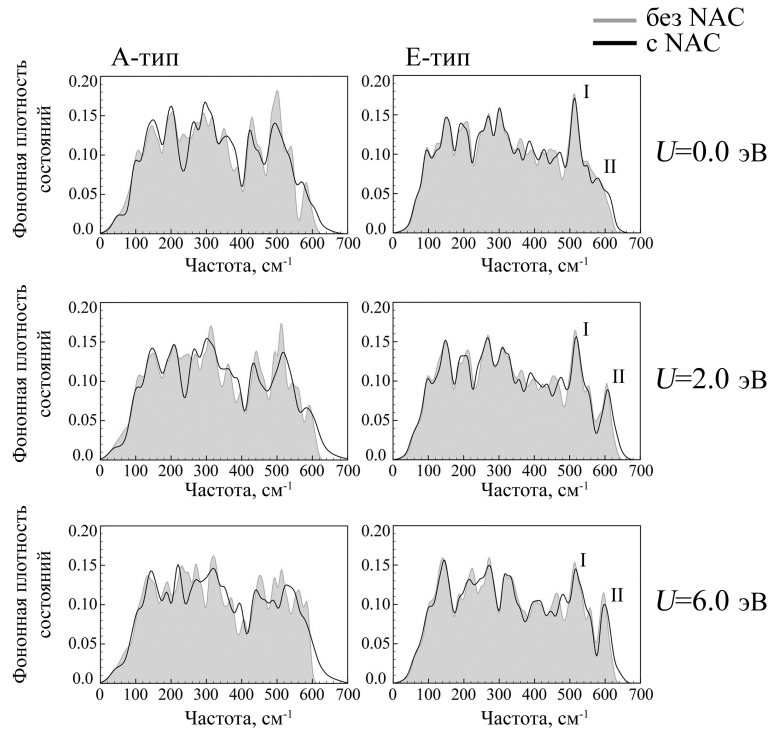


Рисунок 1 — Фононные плотности состояний, полученные для АФМ конфигураций А- (слева) и Е-типа (справа) низкотемпературной фазы YMnO_3 , рассчитанные с и без учета неаналитических поправок (NAC, выделенная линия и заполненная область, соответственно). Римскими цифрами I и II обозначены высокочастотные пики.

перескока ($i \neq j$); $\hat{\mathcal{V}}_i = \|\mathcal{V}_i^{mm'}\|$ — одноузельный потенциал Хартри-Фока. Мы допускаем, что в данной модели можно пренебречь спин-орбитальным взаимодействием при вычислении электрической поляризации, так как спин-орбитальное взаимодействие отвечает главным образом за отклонение магнитных моментов от коллинеарного упорядочения, но не играет важной роли в расчетах электрической поляризации, если ориентация магнитных моментов известна и определяет форму одноузельного потенциала. Основным приближением механизма двойного обмена является тот факт, что $\hat{\mathcal{V}}_i^\downarrow$ можно представить в виде $\Delta_{\text{ex}} + \Delta\hat{\mathcal{V}}_i^\downarrow$, где Δ_{ex} — внутриатомное обменное расщепление между спинами \uparrow и \downarrow , $\Delta\hat{\mathcal{V}}_i^\downarrow$ — орбитальное расщепление между незаполненными состояниями со спином \downarrow . Согласно первому правилу Хунда, в оксидах марганца основному состоянию соответствует конфигурация с максимальным спином $S = 2$, и в результате Δ_{ex} будет содержать большой вклад, пропорциональный S , который можно рассматривать как наибольший физический параметр. Тогда в пределе $\Delta_{\text{ex}} \rightarrow \infty$ можно заменить $\Delta\hat{\mathcal{V}}_i^\downarrow$ на $\hat{\mathcal{V}}_i^\uparrow$. Переходя в локальную систему координат на каждом атоме, мы получим хорошо известный гамильтониан

модели двойного обмена на подпространстве состояний спина \uparrow [18]:

$$\hat{\mathcal{H}}_{ij}^{\text{DE}} = \xi_{ij} \hat{t}_{ij} + \hat{\mathcal{V}}_i^\uparrow \delta_{ij}, \quad (2)$$

где множители ξ_{ij} определяются направлениями магнитных моментов $\mathbf{e}_i = (\cos \phi_i \sin \theta_i, \sin \phi_i \cos \theta_i, \cos \phi_i)$:

$$\xi_{ij} = \cos \frac{\theta_i}{2} \cos \frac{\theta_j}{2} + \sin \frac{\theta_i}{2} \sin \frac{\theta_j}{2} e^{-i(\phi_i - \phi_j)}. \quad (3)$$

На основе представленной модели электрическая поляризация может быть рассчитана в рамках формализма фаз Берри [19].

Другим важным параметром, описывающим характерные особенности электронной структуры, является расщепление Δ между заполненными и незаполненными орбиталями со спином \uparrow . Используя выражение для \mathbf{P}^{el} в базисе функций Ванье, дипольный момент на атоме i можно записать в виде:

$$\mathbf{P}_i = \frac{e}{V} \sum_j \Delta \tau_{ji} |\xi_{ij}|^2 w_{ij}^2, \quad (4)$$

где w_{ij} – вес функции Ванье, $\Delta \tau_{ji}$ – расстояние между атомами. Предполагается, что в атомном пределе весь вес сконцентрирован на центральном узле, а веса на соседних узлах могут быть получены в первом порядке теории возмущений по \hat{t}_{ij}/Δ , стартуя с атомного предела:

$$|w_{ij}|^2 = \frac{1}{\Delta^2} \sum_{m \leq 4} (t_{ij}^{5m})^2, \quad (5)$$

где суммирование ведется по четырем заполненным орбиталям. Учет всех неэквивалентным диполей, возникающих в результате нарушения магнитной симметрии, будет определять электрическую поляризацию. Наконец, выражение для $|\xi_{ij}|^2$ можно переписать как:

$$|\xi_{ij}|^2 = \frac{1}{2}(1 + \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j), \quad (6)$$

откуда следует, что зависимость электрической поляризации от магнитной структуры в модели двойного обмена определяется корреляционными функциями $\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j$ между направлениями спиновых магнитных моментов. Полученная нами зависимость имеет форму, похожую на феноменологическое

описание механизма магнитострикции, который часто используется для объяснения магнитоэлектрического эффекта в манганитах [20]. Однако, здесь этот результат определен теорией двойного обмена, а механизм двойного обмена и эффект магнитострикции могут быть отнесены к электрическому и ионному вкладам в макроскопическую поляризацию, соответственно.

В данной работе параметры эффективного гамильтониана (1) получены из первопринципных расчетов электронной структуры.

Исследование электрической поляризации в орторомбических манганитах. В данном разделе представлены результаты проведенного нами анализа электрической поляризации в орторомбических манганитах. Используя формализм фаз Берри в модели двойного обмена, построенной для низкоэнергетической области электронного спектра, получена угловая зависимость поляризации \mathbf{P}^{el} относительно вращения магнитных моментов в АФМ конфигурации E-типа. Согласно результатам расчетов, магнитная структура E-типа нарушает операцию пространственной инверсии и приводит к возникновению электрической поляризации, направленной вдоль орторомбической оси \mathbf{a} . Для структуры спиновой спирали, которая сохраняет операцию пространственной инверсии, \mathbf{P}^{el} равна нулю. Во всех расчетах рассматривались два приближения. В первом случае расчеты проводились без учета одноузельного кулоновского взаимодействия, что дает переоценку значения поляризации примерно в два раза. С другой стороны расчеты с учетом электронных корреляций дают значение \mathbf{P}^{el} , близкое к полученному в полном метода Хартри-Фока без каких-либо приближений. Кроме того, нами рассмотрена другая магнитная структура, которая также удовлетворяет операциям пространственной группы симметрии, но имеет направление электрической поляризации вдоль орторомбической оси \mathbf{c} , значение которой на два порядка меньше, чем для АФМ E-типа. Несмотря на то, что данная конфигурация находится выше по энергии, представленный анализ отражает возможность управления ферроэлектрической поляризацией.

Модель двойного обмена позволяет свести анализ электрической поляризации в орторомбических манганитах к одномерной ферромагнитной зигзагообразной цепочке e_g -электронов. Согласно полученным результатам, переход в локальную систему координат переводит зигзагообразную цепочку в

линейную с неэквивалентными интегралами перескока относительно движения вдоль орторомбической оси \mathbf{a} , в которой орбитальное упорядочение имеет антиферро-тип, характеризующийся чередованием заполненных орбиталей на разных узлах цепочки. Используя формализм фаз Берри, нами получено аналитическое выражение для электрической поляризации в рассматриваемой цепочке, в котором исследована зависимость относительно расщепления Δ между уровнями e_g -орбиталей. Так для случая $\Delta = 0$ показано, что в системе появляется центр инверсии, который расположен в центре межузельной связи и дает симметричные интегралы перескока относительно центра связи. Таким образом, отбрасывая ян-теллеровское расщепление, мы эффективно создаем центр инверсии, и случай $\Delta = 0$ можно использовать в качестве реперной точки для определения P_E^{el} . В пределе $\Delta \rightarrow \infty$ выражение для P_E^{el} пропорционально как симметричным, так и кососимметричным компонентам $\hat{\mathbf{t}}_{ij}$.

Наконец, используя результаты теории возмущений в модели двойного обмена, получено аналитическое выражение для электрической поляризации в орторомбических манганитах, из которого следует, что для возникновения ферроэлектрических свойств необходимо деформировать конфигурацию спиновой спирали, что и происходит в реальности из-за спин-орбитального взаимодействия. Таким образом, конечное значение \mathbf{P}^{el} представляет собой результат искажения однородной спиновой спирали, а не наличия ее самой, что отличается от предложенного ранее механизма возникновения электрической поляризации в соединениях с магнитной структурой типа спиновой спирали [21]. Другим важным условием для возникновения ферроэлектрической поляризации в орторомбических манганитах является асимметрия интегралов перескока в представлении кристаллического поля, которые должны иметь одновременно симметричные и кососимметричные компоненты.

Исследование ферроэлектрической поляризации в гексагональной фазе YMnO_3 . Полученные результаты расчета с использованием фаз Берри в модели двойного обмена дают вектор электрической поляризации, направленный вдоль оси \mathbf{c} и равный $P_c \approx 0.01 \mu\text{Кл}/\text{см}^2$ и $P_c \approx 0.05 \mu\text{Кл}/\text{см}^2$ для магнитной конфигурации Γ_3 с и без учета одноузельных электронных корреляций, соответственно. Кроме того, показано, что поляризация изменяет свой знак при повороте магнитных моментов в одной из плоскостей на 180° , приводя к

конечной разности $\Delta P_c \approx 0.02 \mu\text{Кл}/\text{см}^2$ ($0.09 \mu\text{Кл}/\text{см}^2$). Полученный результат отражает возможность управления поляризацией посредством изменения магнитной конфигурации в системе. С использованием теории возмущений в рамках модели двойного обмена нами получено аналитическое выражение для ферроэлектрической поляризации, откуда следует, что основной вклад в электрический дипольный момент дает перенос весов функций Ванье между следующими ближайшими соседями в смежных плоскостях ab .

Природа несобственного ферроэлектричества ViMnO_3 . Из расчетов в рамках модели двойного обмена и формализма фаз Берри показано, что электрическая поляризация АФМ конфигурации $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ лежит в плоскости zx , а ее компоненты принимают значения $P_x = -0.988 \mu\text{Кл}/\text{см}^2$ и $P_z = -0.025 \mu\text{Кл}/\text{см}^2$ ($P_x = -1.928 \mu\text{Кл}/\text{см}^2$ и $P_z = -0.074 \mu\text{Кл}/\text{см}^2$) с учетом (без учета) одноузельного кулоновского взаимодействия. С другой стороны, электрическая поляризация для конфигурации $\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow$, которая находится выше по энергии, направлена параллельно оси y : $P_y = -4.428 \mu\text{Кл}/\text{см}^2$ и $P_y = -2.331 \mu\text{Кл}/\text{см}^2$ без и с учетом потенциала Хартри-Фока, соответственно. Полученные значения находятся в хорошем согласии с результатами модели без каких-либо дополнительных приближений.

Далее нами получено аналитическое выражение на основе теории возмущений для ферроэлектрической поляризации в ViMnO_3 , откуда следует, что \mathbf{P}^{el} пропорциональна коррелятору $\mathbf{e}_1^\perp \cdot \mathbf{e}_3^\perp$ между АФМ компонентами магнитных моментов атомов Mn1 и Mn3, при этом изменение величины ферромагнитной компоненты вдоль оси y приводит к изменению величины электрической поляризации. Данный результат отражает возможность управления ферроэлектрической поляризацией посредством приложенного магнитного поля. Кроме того, из аналитического выражения следует, что при изменении направления магнитного момента на одном из узлов $\mathbf{e}_i \rightarrow -\mathbf{e}_i$, например $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \rightarrow \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow$, \mathbf{P}^{el} изменяет свой знак, а структуры $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ и $\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow$ соответствуют двум возможным типам доменов. Наконец, электрическая поляризация обращается в ноль, если АФМ компоненты магнитных моментов Mn1 и Mn3 ортогональны друг другу.

Используя представление кристаллического поля для определения весов функций Ванье в полученных аналитических выражениях, нами рассчитаны

значения электрической поляризации для всех рассматриваемых систем, которые находятся в хорошем согласии с результатами расчетов на основе представленных моделей.

Четвертая глава «Исследование орбитального магнетизма в LaMnO_3 » посвящена разработке метода расчета орбитальных магнитных моментов в рамках современной теории орбитальной намагниченности и приближения Хартри-Фока для эффективной модели Хаббарда, а также его апробации в сложных оксидах переходных металлов на примере манганита лантана LaMnO_3 .

Согласно современной теории орбитальной намагниченности, орбитальный магнитный момент нормального периодического изолятора определяется суммой локального \mathcal{M}^{LC} и коллективизированного \mathcal{M}^{IC} вкладов [22]:

$$\mathcal{M} = \mathcal{M}^{LC} + \mathcal{M}^{IC} = \frac{e}{2\hbar c \Omega} \text{Im} \sum_{n=1}^{occ} \int_{BZ} d\mathbf{k} \langle \partial_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} | \times (\mathcal{H}_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{n\mathbf{k}}) | \partial_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} \rangle, \quad (7)$$

где Ω – объем зоны Бриллюэна, $u_{n\mathbf{k}} = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}\psi_{n\mathbf{k}}$ – периодическая часть блоховской функции, которая является собственным вектором гамильтониана $\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}\mathcal{H}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. В данной главе нами рассмотрено, как выражение (7) для орбитальной намагниченности в рамках современной теории можно переформулировать с учетом разложения волновых функций по базисным векторам. Для этого блоховская функция $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ может быть представлена в виде суперпозиции локализованных орбиталей $\phi_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R})$, центрированных на атомных позициях \mathbf{R} :

$$|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = \sum_{\alpha} c_{n\mathbf{k}}^{\alpha} |\phi_{\alpha}^{\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\alpha\mathbf{R}} c_{n\mathbf{k}}^{\alpha} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} |\phi_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R})\rangle, \quad (8)$$

где N – это число примитивных ячеек в кристалле, α – комбинация атомных и орбитальных индексов, $\phi_{\alpha}^{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ – блоховская сумма базисных орбиталей. В качестве функций $\phi_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ выбраны функции Ванье, которые используются для построения низкоэнергетической модели, однако стоит отметить, что базис можно понимать в более общем смысле, как любой ортонормированный базис атомоподобных функций. Тогда используя выражение (8) для определения производной $|\partial_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}\rangle$, а также свойства матричных элементов в рассматриваемом базисе, выражение (7) можно

переписать в виде:

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}^{LC} &= \mathcal{M}^0 + \Delta\mathcal{M}^{LC} \\
&= \mu_B \sum_n \sum_{\alpha'\alpha} \int_{BZ} \frac{d\mathbf{k}}{\Omega} c_{n\mathbf{k}}^{\alpha'*} \mathcal{L}_{\mathbf{k}}^{\alpha'\alpha} c_{n\mathbf{k}}^\alpha \\
&\quad + \frac{e}{2\hbar c} \text{Im} \sum_n \sum_{\alpha'\alpha} \int_{BZ} \frac{d\mathbf{k}}{\Omega} \partial_{\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}}^{\alpha'*} \times \mathcal{H}_{\mathbf{k}}^{\alpha'\alpha} \partial_{\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}}^\alpha
\end{aligned} \tag{9}$$

и

$$\mathcal{M}^{IC} = \frac{e}{2\hbar c} \text{Im} \sum_n \sum_{\alpha} \int_{BZ} \frac{d\mathbf{k}}{\Omega} \varepsilon_{n\mathbf{k}} \partial_{\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}}^{\alpha*} \times \partial_{\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}}^\alpha, \tag{10}$$

где

$$\mathcal{L}_{\mathbf{k}}^{\alpha'\alpha} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} \langle \phi_{\alpha'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}') | (\mathbf{r} - \mathbf{R}') \times \mathbf{p} | \phi_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \rangle e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \tag{11}$$

и $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}^{\alpha'\alpha}$ – матричные элементы оператора углового момента и гамильтониана в базисе функций Ванье, соответственно. Из полученного выражения видно, что локальная циркуляция \mathcal{M}^{LC} определена двумя вкладками. Первый вклад \mathcal{M}^0 является стандартным и определяется периодической частью оператора углового момента в базисе функций Ванье:

$$\mathcal{M}^0 = -\mu_B \text{Tr}_{\alpha} \{ \mathcal{L} \mathcal{D} \}, \tag{12}$$

где $\mathcal{D} = [\mathcal{D}^{\alpha\alpha'}]$ – одноузловая матрица плотности, $\mathcal{L} = [\mathcal{L}^{\alpha\alpha'}]$ – диагональные по узлам матричные элементы оператора углового момента. Второй вклад в локальную компоненту $\Delta\mathcal{M}^{LC}$ и коллективизированный вклад \mathcal{M}^{IC} являются дополнениями для \mathcal{M}^0 , возникающими в рамках современной теории.

Представленная схема расчета орбитального момента разработана на основе эффективного гамильтониана (1) модели Хаббарда в базисе функций Ванье для низкоэнергетической части электронного спектра и реализована нами в программном коде в рамках метода Хартри-Фока [17]. Данный подход позволяет соединить первопринципные методы с различными моделями на примере реальных систем, в которых можно более точно решить проблему электронных корреляций и корректно провести анализ сложных магнитных структур.

Апробация расчетного метода проведена на примере манганита лантана LaMnO_3 , который является каноническим представителем слабого

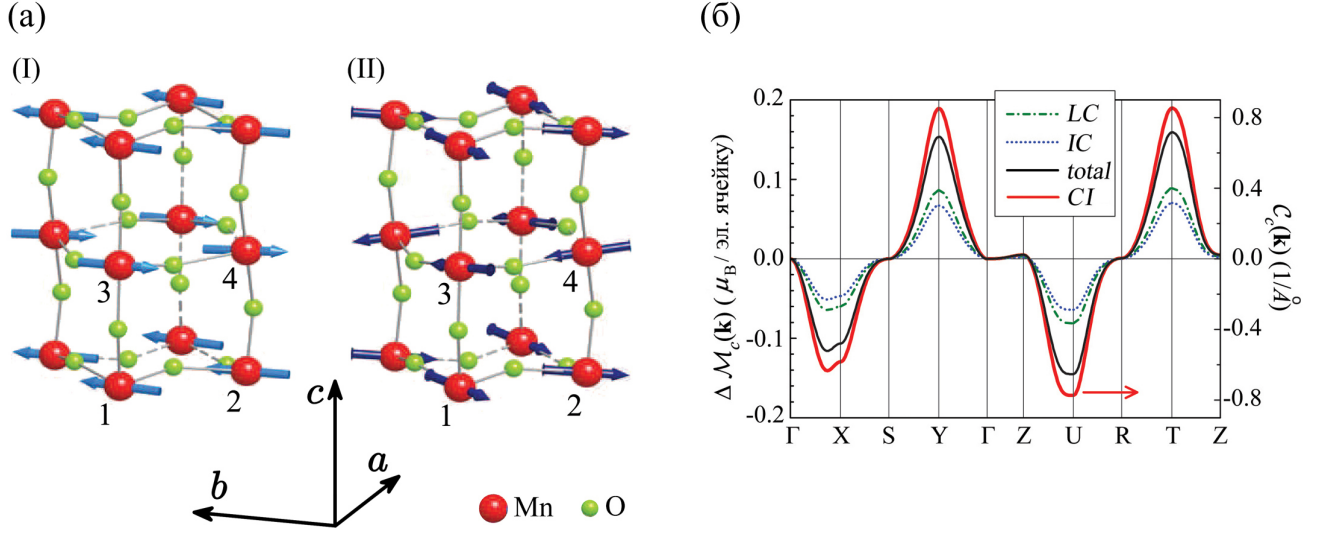


Рисунок 2 — (а) Распределение спиновых (I) и орбитальных (II) магнитных моментов в элементарной ячейке LaMnO_3 , полученное в приближении Хартри-Фока. В целях наглядности представленные магнитные моменты масштабированы. (б) Дисперсионная зависимость вкладов ΔM_c^{LC} (LC), M_c^{IC} (IC), их суммы ($total$), а также инварианта Чжэня (CI) вдоль высокосимметричных точек зоны Бриллюэна.

ферромагнетизма. На рисунке 2(а) представлено полученное распределение магнитных моментов в элементарной ячейке LaMnO_3 , откуда видно, что магнитный порядок почти совпадает с АФМ упорядочением А-типа вдоль оси \mathbf{b} , однако присутствует небольшой ферромагнитный вклад вдоль оси \mathbf{c} , что подтверждает наличие слабого ферромагнетизма: спиновый магнитный момент на атоме 1 имеет величину $(0.354, 3.952, 0.111) \mu_B$. С другой стороны, распределение орбитальных магнитных моментов сильно деформировано и не соответствует АФМ А-типу, в свою очередь наблюдается сильное отклонение моментов вдоль осей \mathbf{a} и \mathbf{c} . Вклад в орбитальный магнитный момент $\boldsymbol{\mu}^0$ атома 1, полученный через матрицу плотности, имеет компоненты $(-0.030, -0.057, -0.008) \mu_B$, а суммарный вклад \mathcal{M}^0 от всех атомов в элементарной ячейке направлен вдоль оси \mathbf{c} и равен $-0.032 \mu_B$.

По формулам (9) и (10) нами рассчитаны вклады в орбитальный магнитный момент LaMnO_3 , возникающие в современной теории, $\Delta M_c^{LC} = 1.05 \times 10^{-4} \mu_B$ и $M_c^{IC} = -2.28 \times 10^{-4} \mu_B$, компоненты вдоль осей \mathbf{a} и \mathbf{b} тождественно равны нулю. Представленные значения противоположны по знаку и имеют величину, существенно меньшую в сравнении с

\mathcal{M}^0 . Для дальнейшего анализа исследована зависимость поправок вдоль высокосимметричных точек зоны Бриллюэна:

$$\Delta\mathcal{M}(\mathbf{k}) = \Delta\mathcal{M}^{LC}(\mathbf{k}) + \mathcal{M}^{IC}(\mathbf{k}) = \frac{e}{2\hbar c} \text{Im} \sum_n \langle \partial_{\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}}^{\alpha'} | \times (\mathcal{H}_{\mathbf{k}}^{\alpha'\alpha} + \varepsilon_{n\mathbf{k}}) | \partial_{\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}}^{\alpha} \rangle. \quad (13)$$

Из полученных дисперсионных кривых на рисунке 2(б) следует, что значения $\Delta\mathcal{M}_c(\mathbf{k})$ в отдельных \mathbf{k} -точках могут быть достаточно большими и превышать величину \mathcal{M}_c^0 . Однако при интегрировании по зоне Бриллюэна данные вклады взаимно компенсируют друг друга, приводя к малому значению $\Delta\mathcal{M}_c$. В свою очередь, их поведение тесно связано с инвариантом Чжена:

$$\mathbf{c} = \frac{1}{\Omega} \int_{BZ} d\mathbf{k} \mathbf{c}(\mathbf{k}) = -\frac{\Omega}{2\pi} \int_{BZ} d\mathbf{k} \text{Im} \sum_n \langle \partial_{\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}}^{\alpha} | \times | \partial_{\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}}^{\alpha} \rangle. \quad (14)$$

Сильная дисперсионная зависимость $\Delta\mathcal{M}(\mathbf{k})$ означает, что соответствующий прообраз Фурье $\Delta\mathcal{M}$ в реальном пространстве определяется в значительной степени нелокальными вкладами, возникающими в результате электронного переноса между узлами.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

1. На основе первопринципного моделирования колебательных спектров в орторомбической фазе YMnO_3 нами показано, что формирование высокочастотных пиков 496 см^{-1} и 620 см^{-1} связано со структурным переходом в низкотемпературную фазу $P2_1nm$ и установлением антиферромагнитного порядка E-типа. Основной вклад в образование данных мод вносят колебания с неприводимыми представлениями B_{2g} и $A_g(3)$, что соответствует растяжению и искажению октаэдров MnO_6 с софазным и противофазным колебаниями ионов кислорода в плоскости, соответственно. Кроме того, выявлена важность учета электронных корреляций и неаналитических поправок в динамическую матрицу при расчете фононных спектров;

2. В рамках механизма двойного обмена и приближения Хартри-Фока для эффективной модели Хаббарда нами проведено теоретическое исследование ферроэлектрической поляризации для класса сложных оксидов марганца.

Представленная модель описывает основные электронные свойства манганитов на основе двух приближений, в пределе больших внутриатомного обменного расщепления Δ_{ex} между спинами \uparrow и \downarrow и внутриатомного расщепления Δ между заполненными и незаполненными состояниями со спином \uparrow . Теория возмущений по параметрам $1/\Delta_{ex}$ и $1/\Delta$ дает аналитическое выражение для электрической поляризации через корреляционные функции $\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j$ между направлениями магнитных моментов соседних атомов. При этом, полученная зависимость совпадает с феноменологическим описанием механизма магнитострикции, однако в данном случае она возникает строго в рамках модели двойного обмена. Используя метод Хартри-Фока для эффективной модели, полученной из первых принципов, были рассчитаны зависимости электрической поляризации от ориентации магнитных моментов, а также выведены аналитические выражения для некоторых манганитов из класса несобственных мультиферроиков. Согласно полученным данным, ферроэлектрическая активность в орторомбических манганитах представляет собой сложный эффект, который является результатом пространственно неоднородной магнитной конфигурации и орбитального упорядочения антиферро-типа, где возникновение электрической поляризации связано с деформацией спиновой спирали вследствие спин-орбитального взаимодействия. Для гексагональной фазы YMnO_3 в рамках теории возмущений было показано, что основной вклад в дипольный электрический момент определяется весами функций Ванье, связанных с переносом заряда между следующими ближайшими соседями в смежных плоскостях ab , что, в свою очередь, дает разность поляризации $0.02 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ при переходе между магнитными конфигурациями $\Gamma_2 \rightarrow \Gamma_3$. Анализ ферроэлектрических свойств моноклинного VtMnO_3 показал, что угловая зависимость электрической поляризации для магнитной конфигурации типа $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ определяется коррелятором $\mathbf{e}_1^\perp \cdot \mathbf{e}_3^\perp$ между антиферромагнитными компонентами магнитных моментов из двух смежных групп, что хорошо объясняет ранее полученные результаты в рамках более общих моделей;

3. На основе современной теории орбитальной намагниченности и эффективной модели Хаббарда в приближении Хартри-Фока нами разработан и реализован метод расчета орбитальных магнитных моментов в сложных

оксидах переходных металлов. Из представленного анализа следует, что стандартное выражение \mathcal{M}^0 , определенное через матричные элементы оператора углового момента, имеет поправки $\Delta\mathcal{M}^{LC}$ и \mathcal{M}^{IC} , которые возникают в рамках современной теории. Апробация расчетной схемы на примере слабого ферромагнетика LaMnO_3 показала, что орбитальный магнитный момент определяется главным образом вкладом \mathcal{M}^0 , в то время как поправками современной теории можно пренебречь ввиду их малости. Из детального анализа вкладов $\Delta\mathcal{M}^{LC}$ и \mathcal{M}^{IC} следует, что их отдельные компоненты в обратном пространстве могут принимать достаточно большие значения и достигать максимума в определенных высокосимметричных точках зоны Бриллюэна, однако при интегрировании они значительно компенсируют друг друга, приводя к малому значению всей поправки. Данный результат отражает важность учета нелокальных вкладов в орбитальный магнитный момент. Полученное распределение орбитальных магнитных моментов в элементарной ячейке LaMnO_3 сильно деформировано от коллинеарного порядка А-типа, а результирующий орбитальный момент \mathcal{M} направлен вдоль оси \mathbf{c} и равен $-0.032 \mu_B$.

Перспектива дальнейших разработок состоит в более детальном изучении связи электронных, магнитных и решеточных степеней свободы в многофункциональных материалах, например, в исследовании влияния магнитного порядка на колебательные спектры магнитных кристаллов. Предложенный механизм двойного обмена может служить хорошей стартовой моделью для анализа ферроэлектрической активности в манганитах, которая позволяет понять основные причины ее возникновения. Представленная схема расчета орбитальных магнитных моментов в рамках современной теории орбитальной намагниченности и приближения Хартри-Фока может быть использована для реализации современной теории в первопринципных расчетах. В дальнейшей работе автора планируется модификация и апробация изложенной методологии на других системах. Кроме того, представленный анализ поправок $\Delta\mathcal{M}^{LC}$ и \mathcal{M}^{IC} , а именно их дисперсионная зависимость в обратном пространстве, может стимулировать исследования, направленные на поиск экспериментальных методов, способных измерить вклады нелокальных компонент.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future / S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman et al. // *Science*. – 2001. – V. 294, № 5546. – P. 1488–1495.
2. *Kruglyak, V. V.* Magnonics / V. V. Kruglyak, S. O. Demokritov, D. Grundler // *J. Phys. D*. – 2010. – V. 43, № 26. – P. 264001 1–14.
3. *Schmid, H.* Multiferroic magnetoelectrics / H. Schmid // *Ferroelectrics*. – 1994. – V. 162, № 1. – P. 317–338.
4. *Hill, N. A.* Why Are There so Few Magnetic Ferroelectrics? / N. A. Hill // *J. Phys. Chem. B*. – 2000. – V. 104, № 29. – P. 6694–6709.
5. *Spaldin, N. A.* The renaissance of magnetoelectric multiferroics / N. A. Spaldin, M. Fiebig // *Science*. – 2005. – V. 309, № 5733. – P. 391–392.
6. *Picozzi, S.* First principles studies of multiferroic materials / S. Picozzi, C. Ederer // *J. Phys.: Condens. Matter*. – 2009. – V. 21, № 30. – P. 303201 1–32.
7. *Cheong, S. W.* Multiferroics: a magnetic twist for ferroelectricity / S. W. Cheong, M. Mosto-voy // *Nature Materials*. – 2007. – V. 6. – P. 13–20.
8. *Salamon, M. B.* The physics of manganites: Structure and transport / M. B. Salamon, M. Jaime // *Rev. Mod. Phys.* – 2001. – V. 73, № 3. – P. 583–628.
9. Magnetic control of ferroelectric polarization / T. Kimura, T. Goto, H. Shintani et al. // *Nature*. – 2003. – V. 426, № 6962. – P. 55–58.
10. Magnetoelectric phase diagrams of orthorhombic RMnO_3 (R=Gd, Tb, and Dy) / T. Kimura, G. Lawes, T. Goto et al. // *Phys. Rev. B*. – 2005. – V. 71, № 22. – P. 224425 1–10.
11. Observation of coupled magnetic and electric domains / M. Fiebig, T. Lottermoser, D. Froehlich et al. // *Nature*. – 2002. – V. 419, № 6909. – P. 818–820.
12. Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory / S. Baroni, S. de Gironcoli, A. dal Corso, P. Giannozzi // *Rev. Mod. Phys.* – 2001. – V. 73, № 2. – P. 515–562.
13. *Anisimov, V.* Band theory and Mott insulators: Hubbard U instead of Stoner J / V. Anisimov, J. Zaanen, O. Andersen // *Phys. Rev. B*. – 1991. – V. 44, № 3. – P. 943–954.
14. *Kresse, G.* *Ab initio* molecular dynamics for liquid metals / G. Kresse, J. Hafner // *Phys. Rev. B*. – 1993. – V. 47, № 1. – P. 558–561.
15. *Togo, A.* First-principles calculations of the ferroelastic transition between rutile-type and CaCl_2 -type SiO_2 at high pressures / A. Togo, F. Oba, I. Tanaka // *Phys. Rev. B*. – 2008. – V. 78, № 13. – P. 134106 1–9.
16. Infrared signature of ion displacement in the noncollinear spin state of orthorhombic YMnO_3 / J. Kim, S. Jung, M. S. Park et al. // *Phys. Rev. B*. – 2006. – V. 74, № 5. – P. 052406 1–4.
17. *Solovyev, I. V.* Combining DFT and many-body methods to understand correlated materials / I. V. Solovyev // *J. Phys.: Condens. Matter*. – 2008. – V. 20, № 29. – P. 293201 1–33.
18. *Anderson, P. W.* Considerations on double exchange / P. W. Anderson, H. Hasegawa // *Phys. Rev.* – 1955. – V. 100, № 2. – P. 675–681.

19. *King-Smith R. D.* Theory of polarization of crystalline solids / R. D. King-Smith, D. Vanderbilt // *Phys. Rev. B.* – 1993. – V. 47 № 3. – P. 1651–1654.
20. *Moriya, T.* Theory of Absorption and Scattering of Light by Magnetic Crystals / T. Moriya // *J. Appl. Phys.* – 1968. – V. 39. – P. 1042–1049.
21. *Katsura, H.* Spin Current and Magnetoelectric Effect in Noncollinear Magnets / H. Katsura, N. Nagaosa, A. V. Balatsky // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. – V. 95, № 5. – P. 057205 1–5.
22. Orbital magnetization in crystalline solids: Multi-band insulators, Chern insulators, and metals / D. Ceresoli, T. Thonhauser, D. Vanderbilt, R. Resta // *Phys. Rev. B.* – 2006. – V. 74, № 2. – P. 024408 1–13.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

Статьи в зарубежных рецензируемых научных журналах, определенных ВАК России:

1. *Nikolaev, S.A.* Influence of magnetic order on phonon spectra of multiferroic orthorhombic YMnO_3 / S.A. Nikolaev, A.N. Rudenko, V.G. Mazurenko // *Solid State Commun.* – 2013. – V. 164. – P. 16–21 (0.38 п.л./0.3 п.л.).
2. *Solovyev, I.V.* Double-exchange theory of ferroelectric polarization in orthorhombic manganites with twofold periodic magnetic texture / I.V. Solovyev, S.A. Nikolaev // *Phys. Rev. B.* – 2013. – V. 87, № 14. – P. 144424 1–15 (0.94 п.л./0.45 п.л.).
3. *Nikolaev, S.A.* Orbital magnetization of insulating perovskite transition-metal oxides with a net ferromagnetic moment in the ground state / S.A. Nikolaev, I.V. Solovyev // *Phys. Rev. B.* – 2014. – V. 89, № 6. – P. 064428 1–11 (0.69 п.л./0.35 п.л.).
4. *Solovyev, I.V.* Spin dependence of ferroelectric polarization in the double exchange model for manganites / I.V. Solovyev, S.A. Nikolaev // *Phys. Rev. B.* – 2014. – V. 90, № 18. – P. 184425 1–13 (0.8 п.л./0.4 п.л.).

Другие публикации:

5. *Николаев, С.А.* Ферроэлектрическая поляризация орторомбических манганитов в модели двойного обмена / С.А. Николаев // Сборник материалов Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых ВНКСФ-19, г. Архангельск. – Архангельск: Изд-во АСФ России, 2013. – С. 224-225 (0.06 п.л./0.06 п.л.).
6. *Николаев, С.А.* Орбитальная намагниченность в рамках модельных гамильтонианов на примере YTiO_3 / С.А. Николаев // Сборник материалов XIV Всероссийской школы-семинара по проблемам физики конденсированного состояния СПФКС-14, г. Екатеринбург. – Екатеринбург: ИФМ УрО РАН, 2013. – С. 58 (0.06 п.л./0.06 п.л.).

Подписано в печать
5 декабря 2014 г.
Офсетная печать

Формат 60x84 1/16

Тираж 100 экз.

Бумага писчая

Заказ №

Отпечатано в ризографии НИЧ УрФУ
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира 19