

На правах рукописи



ГОЛУБЕВА Линара Раушановна

**ФЛУКТУАЦИИ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ И МАГНИТНЫЕ
СВОЙСТВА СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ АКТИНИДОВ И
СОЕДИНЕНИЙ С УЗКИМИ ЗОНАМИ**

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Екатеринбург – 2016

Работа выполнена на кафедре физики Института фундаментального образования ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор
Повзнер Александр Александрович

Официальные оппоненты: **Кудасов Юрий Бориславович,**
доктор физико-математических наук, доцент,
ФГУП Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский научно-исследовательский
институт экспериментальной физики,
главный научный сотрудник научно-технического
центра физики высоких плотностей энергии и
направленных потоков излучений (НТЦФ);

Мирзоев Александр Аминулаевич,
доктор физико-математических наук, профессор,
ФГБОУ ВПО «Южно-Уральский государственный
университет» (национальный исследовательский
университет), старший научный сотрудник
кафедры общей и теоретической физики.

Ведущая организация: ФГБУН Институт электрофизики Уральского
отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург

Защита состоится «26» февраля 2016 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, д. 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://lib.urfu.ru/mod/data/view.php?d=51&rid=249693>

Автореферат разослан «__» _____ 2015 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета

Ищенко Алексей Владимирович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Согласно диаграмме Хилла сложное поведение демонстрируют 5f-металлы и их соединения, находящиеся на границе между магнитоупорядоченными и сверхпроводящими системами (Pu, Am, U-Ge и др.). Эти металлы не могут быть описаны ни локализованной, ни зонной моделью, в силу чего природа их магнитного состояния, в частности причины наблюдаемой в них сильной температурной зависимости спиновой магнитной восприимчивости остаются предметом дискуссий. Возникающие трудности связаны с отсутствием достоверной информации о природе магнитного состояния и ее связи с электронной структурой, получаемой при первопринципных расчетах.

Не достаточно изученной особенностью рассматриваемых систем, являются возникновение в них зарядовых валентных флуктуаций, приводящих к кондоповедению магнитной восприимчивости. При этом в первопринципных расчетах электронной структуры основного состояния требуется учет валентных флуктуаций, приводящих к электронным переходам с изменением спиновых и орбитальных моментов.

С другой стороны простейшую интерполяцию между локализованной и зонной моделью дает модель Хаббарда, учитывающая внутриатомное кулоновское взаимодействие и зонное движение в одной и той же группе сильно коррелированных (f- и d-) электронов. Известно, что в рамках флуктуационной теории эффект хаббардовских корреляций, сводится к рассмотрению движения электронов во флуктуирующих обменных полях, вследствие чего возникает перенормировка электронных состояний: $\varepsilon \rightarrow \varepsilon \pm \xi$. Можно ожидать, что расщепление электронных термов во флуктуирующих обменных полях приведет к флуктуациям чисел заполнения на узлах. Учет таких флуктуаций важен для оценки вкладов в уравнение магнитного состояния продольных и поперечных спиновых флуктуаций, а также для корректной оценки коэффициента межмодовой связи, пропорционального второй производной свободной энергии по намагниченности и определяющего устойчивость ферромагнитных решений, а также температурно-полевые зависимости амплитуды спиновых флуктуаций. Представляется актуальным учет подобных эффектов и при описании магнитных свойств на основе первопринципных расчетов электронной структуры.

Важным также является исследование спиновых и зарядовых флуктуаций в соединениях с узкими d-(f-)зонами, характеризующихся наличием ковалентных pd(f)-связей. Очевидно, в этих соединениях имеет место эффект гибридизации сильно коррелированных (d- или f-) и некоррелированных (p-) состояний, приводящий к возникновению на границе гибридизационной щели резких пиков

плотности электронных состояний с аномально большой кривизной (вторая производная плотности состояний по энергии) вблизи уровня Ферми. К таким системам можно отнести сверхпроводящие купраты и ферромагнитные манганиты лантана, а также сплавы на основе германидов урана, для которых были получены экспериментальные указания на сосуществование ферромагнетизма и сверхпроводимости (например, UGe_2 при высоких давлениях).

Степень разработанности темы исследования. Несмотря на существенные успехи теории магнитных флуктуаций до сих пор окончательно не решен вопрос о соотношении спиновых и зарядовых флуктуаций в модели Хаббарда, которая наряду с зонным движением электронов учитывает только наиболее важное внутриатомное кулоновское взаимодействие. При этом центре внимания исследований электронной структуры основного состояния находится валентные флуктуации в сильно коррелированные системы с узкими f -зонами, таких как Am , δ - Pu и сплавы $Pu-115$.

Спиновая магнитная восприимчивость нормальной фазы рассматриваемых сильно коррелированных систем резко возрастает при приближении к температуре сверхпроводимости. Однако до сих пор не выяснено с какими особенностями электронной структуры и флуктуациями электронной плотности связана их неустойчивость к магнитному упорядочению. При этом имеются экспериментальные указания на то, что например, у ряда сплавов $Pu-115$ неустойчивость к сверхпроводимости может быть связана со спин-флуктуационным механизмом. Однако радиус спиновых корреляций резкое возрастание, которого согласно принципу минимума энергии должно приводить к разрушению куперовских пар до сих пор не определен. Ожидается, что решение этих вопросов возможно на основе теории учитывающей в уравнение магнитного состояния различие вкладов от поперечных и продольных спиновых флуктуаций, а также условий, приводящих к флуктуациям чисел заполнения на узлах.

Несмотря на огромное количество теоретических работ, также остается до конца не изученной природа магнитного состояния узкозонных сильно коррелированных соединений и сплавов с $pd(f-)$ гибридизацией. Ранее гибридизационная модель уже развивалась применительно к анализу магнорезистивного и магниторефрактивного эффектов фазовом магнитном переходе в ферромагнитных полупроводниках (например, манганиты лантана $La_{1-x}Ca_xMnO_3$). Очевидно, что анализ подобной модели в рамках теории электронных спиновых и зарядовых флуктуаций также представляет интерес для описания магнитного состояния нормальной фазы вблизи неустойчивости к ферромагнетизму и (или) сверхпроводимости. В частности это относится к очень хорошо изученным на эксперименте ВТСП купратам и германидам урана, в

которых при высоких давлениях наблюдается сосуществование ферромагнетизма и сверхпроводимости (например, UGe_2).

Целью диссертационной работы является развитие теории спиновых и зарядовых флуктуаций в модели Хаббарда, ее обобщениях дополнительно учитывающих межузельные df -обменные взаимодействия, $pd(f)$ -гибридизацию и на этой основе исследование с использованием методов первопринципных вычислений, электронной структуры и магнитных свойств сильно коррелированных $5f$ -металлов и соединений с узкими d, f -зонами.

Задачи исследования сформулированы следующим образом:

1. На основе представлений о флуктуирующих в пространстве и времени обменных и зарядовых полях, описать продольные и поперечные спиновые флуктуации, зарядовые флуктуации чисел заполнения узлов в модели Хаббарда, а также в ее обобщениях учитывающих межузельное обменное взаимодействие и гибридизацию.
2. Получить уравнение магнитного состояния для намагниченности и уравнения для аномальных средних возникающих при синглетном спаривании сильно коррелированных электронов через парамагоны, с целью анализа условий температурной устойчивости и неустойчивости ферромагнитной и парамагнитной фаз.
3. Учитывая при первопринципных расчетах плотности электронных состояний, химического потенциала и электронных концентраций, спиновые и зарядовые флуктуации связанные с хаббардовскими корреляциями, а также межузельными df -обменными взаимодействиями рассмотреть температурные зависимости магнитной восприимчивости сильно коррелированных f -электронов в америции, δ -плутонии, сплавах и соединениях $Pu-115$. Оценить температурные зависимости амплитуд спиновых флуктуаций, зарядовых флуктуаций чисел заполнения и температурные границы парамагнитной фазы исследуемых систем.
4. Рассмотреть электронные флуктуации в модели, учитывающей наряду с зонным движением электронов и хаббардовским взаимодействием, $pd(f)$ -гибридизацию. Получить и сопоставить с результатами первопринципных вычислений выражения для электронного спектра, плотности электронных состояний и для температурной зависимости спиновой магнитной восприимчивости. Оценить температуры спаривания через спиновые флуктуации с учетом возможной роли зарядовых флуктуаций и межмодового взаимодействия, провести анализ спиновой магнитной восприимчивости и температуры Кюри применительно к модели некоторых ВТСП купратов, ферромагнитных и сверхпроводящих сплавов UGe_2 под давлением.

Научная новизна представленных в диссертационной работе результатов состоит в следующем:

1. В рамках модели Хаббарда и ее обобщений учитывающих межузельное fd -обменное взаимодействие и $pd(f)$ -гибридизацию впервые наряду со спиновыми флуктуациями описан эффект зарядовых флуктуаций чисел заполнения, которые ограничивают рост продольных спиновых флуктуации, что приводит к изменению знака коэффициента межмодовой связи.
2. Впервые показано, что условия потери устойчивости ферромагнитных решений уравнения магнитного состояния и изменения знака коэффициента межмодовой связи, на температурной зависимости парамагнитной спиновой восприимчивости возникает максимум, а радиус спиновых корреляций начинает убывать с понижением температуры.
3. В модели электронной структуры A_m и δ -плутония, вытекающей из первопринципных LDA+U-расчетов показано, что причиной наблюдаемой температурной зависимости их спиновой магнитной восприимчивости являются спиновые и зарядовые флуктуации, причем в случае A_m возникает резкое возрастание фактора обменного усиления и радиуса спиновых корреляций с понижением температуры, приводящее к формированию почти ферромагнитного состояния.
4. Впервые на основе анализа температурной зависимости спиновой магнитной восприимчивости $PuRhGa_5$ сделан вывод о наличии пика плотности электронных состояний в области псевдощели, связанной со спин-орбитальным взаимодействием, найдены параметры межэлектронных взаимодействий при которых достигается согласие с экспериментальными данными.
5. В рамках развитой теории учитывающей спиновые и валентные флуктуации f - и d -электронов, и их межузельное обменное взаимодействие, с использованием электронной структуры, найденной в LDA+U+SO расчетах, достигнуто согласие с экспериментальными данными о температурной зависимости магнитной восприимчивости $PuCoGa_5$.
6. Показано, что в усиление электронных флуктуации в d -подсистеме $PuCoGa_5$ за счет fd -обменного взаимодействия может приводить к синглетному спариванию d -электронов.
7. В модели жесткой полосы, построенной на основе первопринципных LDA+U+SO расчетов, описана температурная зависимость магнитной восприимчивости, оценены параметры межэлектронных взаимодействий, температуры некогерентного синглетного спаривания d -электронов в

нормальной (не сверхпроводящей) фазе сплавов $\text{Pu}_{1-x}\text{An}_x\text{CoGa}_5$ с малыми количествами актинидов U и Np ($x=0,1$).

8. Показано, что гибридизационные особенности плотности электронных состояний коррелированных d(f)-электронов и почти свободных p-электронов при увеличении числа дырок в валентной (нижней) зоне приводят к потере устойчивостей ферромагнитных решений уравнения магнитного состояния (оптимально легированные купраты $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$).
9. Впервые показано, что за счет обмена парамагнонами возможно возникновение синглетного спаривания с d-симметрией параметра порядка в сильно коррелированных системах с pd- и pf-гибридизацией (UGe_2 при $p=1,5-1,7$ ГПа, оптимально легированные ВТСП купраты $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$).

Теоретическая и практическая значимость работы. Развитие теории электронных спиновых и зарядовых флуктуаций в сильно коррелированных системах на основе d- и f-металлов является важнейшим направлением современной физики конденсированных состояний. При этом наряду с развитием методов первопринципных расчетов электронных и фононных спектров, большое значение имеет построения моделей, которые позволяют сравнить принципиально важные положения теории с наблюдаемыми на эксперименте зависимостями электронных и магнитных свойств от температуры и давления.

Одной из важнейших групп сильно коррелированных систем образуют актиниды, сильно коррелированные соединения на их основе и родственные им d,f-системы. Особо остро стоит вопрос о возможности сосуществования сверхпроводимости и ферромагнетизма, наблюдаемого, например, в ряде сплавов на основе урановых соединений. Большое научное значение имеет исследование электронных и магнитных свойств семейства соединений Pu-115, необычная сверхпроводимость которых зависит от магнитных взаимодействий.

Кроме того исследуемые актинидные системы имеют важное практическое значение. Особый интерес представляет δ -плутоний, поскольку он является стратегически важным элементом для ядерной энергетики. При этом наблюдаемые магнитные восприимчивости радиоактивного плутония и других актинидных систем имеют сложные температурно-временные зависимости, связанные с формированием радиационных дефектов и малым вкладом связанным с радиационным химическим загрязнением. С другой стороны можно видеть наличие в наблюдаемой магнитной восприимчивости ряда вкладов, связанных со спиновыми и валентными флуктуациями. Хотя наиболее существенное влияние электронные флуктуации должны оказывать на магнитные и электронные свойства свежих радиоактивных образцов, их знание необходимо и для корректной оценки эффектов изучаемых в радиационном материаловедении.

Таким образом теоретическое исследование и моделирование электронных и магнитных свойств сильно коррелированных актинидов и их соединений, имеет как научное, так и практическое значение.

Методология и методы исследования. Решение поставленных в диссертации задач описания электронных и магнитных свойств сильно коррелированных 5f-металлов, их соединений и сплавов потребовало разработки теории электронных спиновых и зарядовых флуктуаций, основанной на введении функциональных интегралов по стохастическим обменным и зарядовым полям (преобразования Стратоновича-Хаббарда). Учет произвольных по амплитуде флуктуаций осуществлялся на основе приближения Кленина-Гертца при суммировании рядов квантово-статистических средних, определяющих функционал свободной энергии, нормальную и аномальную функции Грина. Для сильно коррелированных f- и d-электронов последовательно рассматривались модель Хаббарда, а также ее расширение связанное с дополнительным учетом fd-обменного взаимодействия в двухзонной модели (Pu-115) и pd(f)-гибридизации ($\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, UGe_2). Для описания электронных структур развивался подход основанный на методе LDA+U+SO, в котором учитывались флуктуации спиновой и зарядовой плотности связанные внутриатомными хаббардовскими корреляциями.

Автор выносит на защиту следующие положения:

1. Перенормировки электронного спектра за счет расщепления во флуктуирующих обменных полях приводят к флуктуациям чисел заполнения, обуславливают потерю устойчивости ферромагнетизма с понижением температуры за счет смены знака коэффициента межмодовой связи, что сопровождается уменьшением радиуса спиновых корреляций.
2. Спиновые флуктуации в системе 5f-электронов Am приводят к резкому возрастанию магнитной восприимчивости при приближении к экспериментально наблюдаемой температуре сверхпроводимости.
3. В PuCoGa_5 флуктуации плотности f-электронов посредством fd-обменного взаимодействия усиливают флуктуации спиновой и зарядовой плотности d-электронов, что приводит к возникновению максимума на температурной зависимости их магнитной восприимчивости, к смене знака коэффициента межмодовой связи и к парамагнетонному синглетному спариванию в d-подсистеме. Легирование PuCoGa_5 малыми количествами актинидов U и Np ($x=0,1$) ведет к усилению электронных флуктуаций, к понижению температур максимума спиновой восприимчивости и синглетного спаривания d-электронов.
4. В энергетической области псевдощели спектра f-электронов PuRhGa_5 имеется пик плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми,

который обуславливает температурное усиление спиновых флуктуаций, возникновение температурного максимума парамагнитной восприимчивости f-электронов, смену знака коэффициента межмодовой связи и уменьшение радиуса спиновых корреляций вблизи экспериментально наблюдаемой температуры сверхпроводимости.

5. В случае, когда уровень Ферми оказывается в непосредственной энергетической области гибридационного пика, может иметь место парамагнитное синглетное спаривание d(f)-подобных электронов с d-симметрией параметра порядка. При ферромагнитном упорядочении в ограниченном интервале температур от T_{c1} до T_{c2} ниже T_{c2} возникает неустойчивость к синглетному парамагнитному спариванию ($U\text{Ge}_2$ в интервале давлений $p=1,5-1,7$ ГПа).

Достоверность полученных результатов обеспечивается согласием с экспериментальными данными и теоретическими работами, использованием и развитием апробированных методик, а также подтверждена публикациями в реферируемых научных журналах, индексируемых в базах Scopus и Web of Science, докладами на крупных Международных конференциях.

Апробация результатов. Материалы диссертационного исследования докладывались на следующих конференциях и совещаниях:

1. 44th International conference «Journées des Actinides» (Israel, April 2014)
2. 45th International conference «Journées des Actinides» (Czech Republic, April 2015)
3. 3rd International conference on superconductivity and magnetism, (Turkey, April–May 2012)
4. 4th International conference on superconductivity and magnetism, (Turkey, April–May 2014)
5. XXII Международная конференция «Новое в магнетизме и магнитных материалах» (Астрахань, сентябрь 2012)
6. XXXVI совещание по физике низких температур (Санкт-Петербург, июль 2012)
7. VII Всероссийская научно-техническая конференция «Физические свойства металлов и сплавов» (Екатеринбург, ноябрь 2013).

Личный вклад автора: постановка задач, выбор методов решения задач, интерпретации полученных результатов и их апробация выполнены совместно с руководителем. Аналитические результаты получены совместно с соавторами работ. Первопринципные расчеты электронной структуры, численные расчеты магнитных и электронных свойств, а также сопоставление с экспериментом выполнены непосредственно диссертантом.

Публикации: По материалам диссертации опубликовано 13 научных работ: 6 статей в рецензируемых научных журналах, входящих в перечень ВАК РФ, из которых 5 статей индексируются международными системами цитирования Scopus и Web of Science и 7 в сборниках конференций. Список работ диссертанта приведен в конце автореферата.

Структура и объем диссертации: диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы. Она изложена на 136 страницах, включая 52 рисунка. Список цитируемой литературы содержит 100 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертационного исследования, степень ее разработанности, сформулированы цели, научная новизна, а также теоретическая и практическая значимость работы, изложены методы исследования и приведены положения, выносимые на защиту, указаны степень достоверности и апробация результатов.

В первой главе «Литературный обзор» согласно диаграмме Хилла [1] выделен ряд элементов и соединений на их основе (Am , $\delta\text{-Pu}$, UGe_2 , Pu-115), в которых в зависимости от изменения температуры, давления или химического состава экспериментально наблюдается неустойчивость к сверхпроводимости или магнетизму.

Во второй части главы представлен обзор основных электронных и магнитных свойств исследуемых систем, природа которых даже в не сверхпроводящей фазе окончательно не выяснена. В частности остается открытым вопрос о причинах наблюдаемой в них сильной температурной зависимости спиновой магнитной восприимчивости.

В третьей части главы кратко описаны современные методы расчета электронной структуры систем с сильными электронными корреляциями, а именно приближение локальной плотности LDA (Local Density Approximation)+U+SO и теория динамического среднего поля DMFT (dynamic mean-field theory). К основным ограничениям существующих первопринципных методов расчета электронной структуры относятся трудности согласования полученных электронных структур с экспериментальными данными и однозначного критерия выбора параметров расчета. В конце первой главы для решения этих проблем предлагается самосогласованная схема первопринципного расчета электронной структуры и магнитной восприимчивостью исследуемых систем.

Поскольку важную роль в электронных и магнитных свойствах актинидов играют 5f-электроны, **во второй главе** развивается однозонная модель, предложенная Хаббардом [2], где гамильтониан системы состоит из гамильтониана невзаимодействующих электронов H_0 и гамильтониана кулоновского взаимодействия H_U :

$$H = H_0 + H_U, \quad (1)$$

который записывается через операторы спиновой S_v и зарядовой N_v плотности:

$$H_U = U \sum_v \left(\frac{1}{4} N_v^2 - (S_v^z)^2 \right), \quad (2)$$

U – параметр внутриатомного кулоновского отталкивания электронов. Зная полный гамильтониан системы можно посчитать статистическую сумму:

$$Z = Z_0 \langle \sigma(\beta) \rangle_0, \quad (3)$$

где Z_0 – статистическая сумма невзаимодействующих электронов, $\sigma(\beta)$ – матрица рассеяния. Далее, используя преобразование Хаббарда-Стратоновича исходная многочастичная задача сводится к задаче о движении электронов во флуктуирующих в пространстве и во времени стохастических обменных (ξ) и зарядовых (η) полях:

$$Z/Z_0 = \iint \exp \left\{ -\beta U^{-1} \sum_v (|\xi_v|^2 + |\eta_v|^2) \right\} \langle T_\tau \exp[-\beta H_{\text{int}}(V)] \rangle_0 (d\xi d\eta). \quad (4)$$

Здесь: $\beta=1/T$, T_τ – оператор упорядочения по мацубаровскому времени τ , $H_{\text{int}}(V)$ – эффективный гамильтониан. Вычисляя функциональные интегралы в (4) методом перевала по переменным находится уравнение магнитного состояния:

$$M(D^{-1} - 2\kappa M^2) = H/U, \quad (5)$$

где M – намагниченность, H – поле, D^{-1} – обратный фактор обменного усиления, определяющий магнитное состояние системы, κ – коэффициент спиновой жесткости, определяемый через поперечную $\chi_\perp(m)$ и продольную $\chi_\parallel(m)$ компоненты восприимчивости:

$$\kappa = U (\chi_\perp^{(f)} - \chi_\parallel^{(f)}) / \langle m^2 \rangle. \quad (6)$$

Здесь $\langle m^2 \rangle$ – квадрат амплитуды спиновых флуктуаций, совпадающая с перевальным значением обменного поля на узле ξ и равна:

$$\langle m^2 \rangle = (BTD/U)^2, \quad (7)$$

B – коэффициент разложения функции Линдхарда. Из (5) спиновая парамагнитная восприимчивость f-электронов равна:

$$\chi^{(f)} = 2U^{-1} (1 - D^{-1}) D. \quad (8)$$

Для расчета полной восприимчивости помимо спиновой (8) добавляется восприимчивость s-, p- и d-электронов $\chi^{(l)}$ и орбитальная $\chi_{orb}^{(f)}$:

$$\chi(T) = \chi^{(f)} + \sum_{l=s,p,d} \chi^{(l)} + \chi_{orb}^{(f)}. \quad (9)$$

Для оценки границ парамагнитной фазы определяются нормальная $G_{k\sigma}$ и аномальная $F_{k,-k}^{\sigma-\sigma}$ функции Грина:

$$G_{k\sigma} = \langle T_{\tau} a_{k\sigma}^{+} a_{k\sigma} \sigma(\beta) \rangle_0, \quad F_{k,-k}^{\sigma-\sigma} = \langle T_{\tau} a_{k\sigma} a_{-k-\sigma} \sigma(\beta) \rangle_0. \quad (10)$$

При этом получено уравнение для оценки температуры возможности синглетного спаривания электронов через спиновые флуктуации:

$$T_C = Um_{\perp}^2 \left[\frac{U \left(\sum_{\alpha=\pm 1} \alpha g_0 (\mu + Un/2 + \alpha Um) \right)^2}{\sum_{\alpha=\pm 1} g_0 (\mu + Un/2 + \alpha Um)} - 2\kappa m^2 \right], \quad (11)$$

где g_0 – плотность состояний, μ – химический потенциал, а первое слагаемое уравнения связано с зарядовыми флуктуациями, индуцированными спиновыми:

$$\langle (\delta n)^2 \rangle = \left(\frac{\sum_{\alpha} \alpha g_0 (\mu + \alpha U \sqrt{\langle m^2 \rangle} + Un/2)}{\sum_{\alpha} g_0 (\mu + \alpha U \sqrt{\langle m^2 \rangle} + Un/2)} \right)^2 \langle m^2 \rangle. \quad (12)$$

Показано, что в зависимости от величины зарядовых флуктуаций возможно увеличение либо уменьшение температуры синглетного спаривания через парамагноны. При этом радиус спиновых корреляций $R_C = (AD)^{1/2}$ и изменяется с температурой пропорционально $\chi^{1/2}$.

В рамках однозонной модели Хаббарда были исследованы электронные и магнитные свойства δ -Pu. Используя информацию об электронном спектре δ -Pu из работы [3] (LDA+U+SO, FP-LAPW) в настоящем исследовании было получено согласие расчетов с экспериментом по магнитной восприимчивости (Рисунок 1).

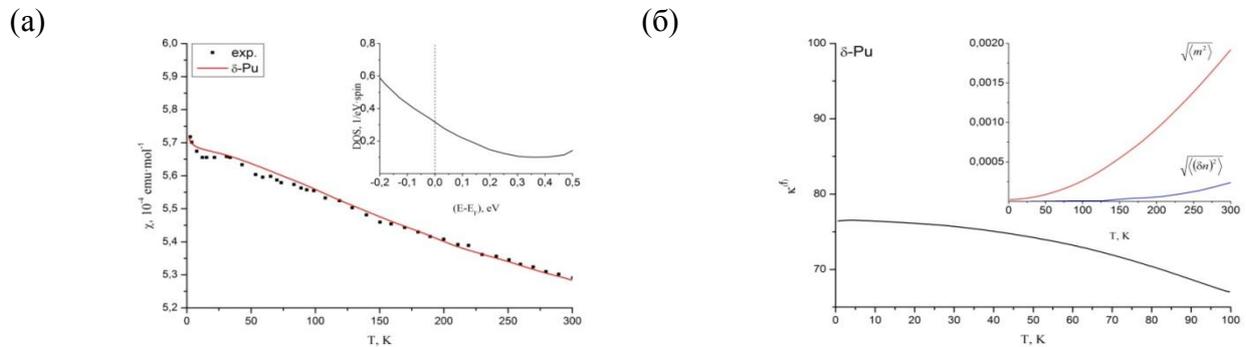


Рисунок 1 – (а) Зависимость $\chi(T)$ δ -Pu в сравнение с экспериментом [4]. На вставке изображена плотность состояний f-электронов вблизи уровня Ферми для δ -Pu [3]. (б) Зависимость $\kappa(T)$ δ -Pu. На вставке изображены температурные зависимости $\sqrt{\langle m^2 \rangle}$ и $\sqrt{\langle (\delta n)^2 \rangle}$ для δ -Pu

Кроме того впервые были получены оценки температурных зависимостей амплитуд спиновых и зарядовых флуктуаций. Полученные малые значения зарядовых флуктуаций при положительном коэффициенте межмодовой связи приводят к тому, что аномальные средние не возникают и, следовательно, синглетное спаривание в δ -Pu не реализуется. Из оценок фактора Стонера для δ -Pu ($S=4,85$) следует, что парамагнитное состояние сохраняется вплоть до самых низких температур.

Ранее диссертантом в соавторстве была выполнена работа по расчету электронной структуры Am [5] (LDA+U+SO, LMTO), где исследуемая фаза AmI была получена из ГЦК-решетки фазы AmII в приближении всестороннего сжатия. В настоящем диссертационном исследовании найденная электронная структура использовалась для расчета магнитной восприимчивости америция ($U=U_f=4\text{эВ}$). Резкий рост спиновой магнитной восприимчивости (Рисунок 2) при низких температурах указывает на значительное увеличение магнитных флуктуаций. Полученное при $T \rightarrow 0$ огромное значение фактора Стонера ($S=878$) указывает на наличие тенденции к ферромагнетизму (почти ферромагнитное состояние). При этом зарядовые флуктуации в Am заметно усиливаются по сравнению с δ -Pu, что приводит к возможности возникновения аномальных средних. Оцененная температура возможного синглетного спаривания в Am мала и составляет $\sim 1\text{К}$, при $R_c \approx 2a$ (a – период кристаллической решетки).

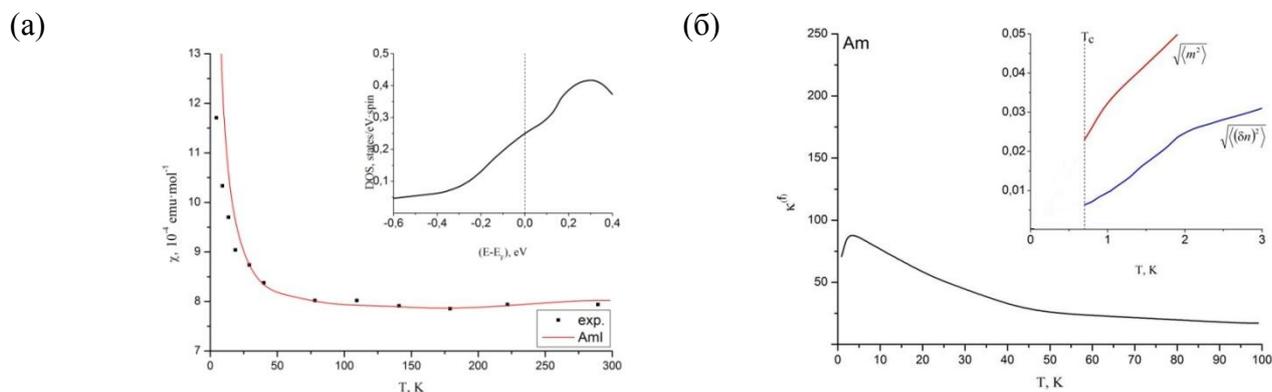


Рисунок 2 – (а) Зависимость $\chi(T)$ Am в сравнение с экспериментом [6]. На вставке изображена плотность состояний f-электронов вблизи уровня Ферми для Am [5]. (б) Зависимость $\kappa(T)$ Am. На вставке изображены температурные зависимости $\sqrt{\langle m^2 \rangle}$ и $\sqrt{\langle (\delta n)^2 \rangle}$ для Am

Далее однозонная модель Хаббарда апробировалась для соединения PuRhGa_5 . Использование результатов расчета электронной структуры из первопринципных исследований (например, [7]) не позволило добиться согласия с экспериментальными данными.

Поэтому при моделировании флуктуационного вклада в температурную зависимость магнитной восприимчивости одновременно развивалась самосогласованная процедура расчета электронной структуры в методе LDA+U+SO (с использованием базиса FP-LAPW). В рамках этой процедуры при параметре кулоновского взаимодействия $U=U_f=4\text{эВ}$ получено согласие с экспериментом по магнитной восприимчивости для PuRhGa₅ (Рисунок 3) и обнаружен дополнительный максимум плотности f-состояний в псевдощелевой области. Экстраполированный к нулю температур фактор обменного усиления оказался равным $S=10$. При этом коэффициент межмодовой связи PuRhGa₅ (Рисунок 3) с понижением температуры меняет знак и становится отрицательным, что приводит к исчезновению ферромагнитных неустойчивостей и повышению оценочных значений температуры синглетного спаривания (граница парамагнитной нормальной фазы) до значения 10К при $R_c \approx 1,4a$.

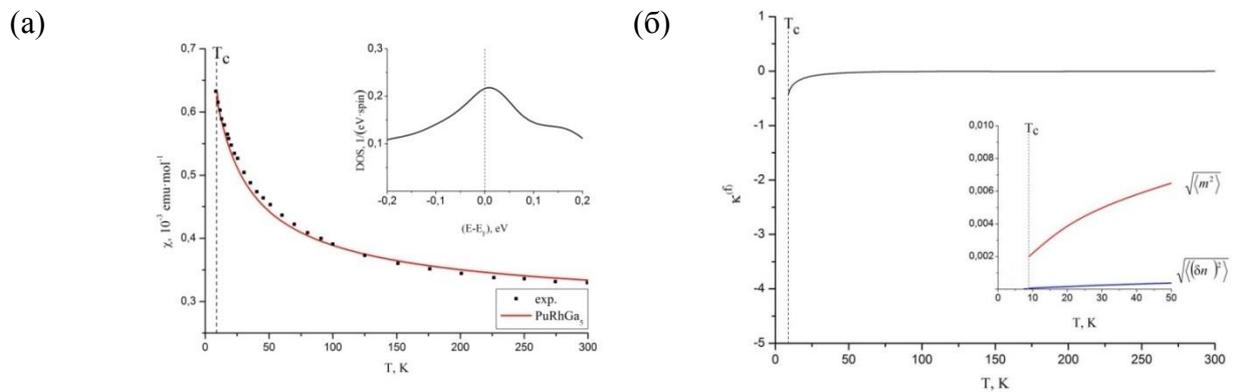


Рисунок 3 – (а) Зависимость $\chi(T)$ PuRhGa₅ в сравнение с экспериментом [8]. На вставке изображена плотность состояний f-электронов вблизи уровня Ферми для PuRhGa₅. (б) Зависимость $\kappa(T)$ PuRhGa₅. На вставке изображены температурные зависимости $\sqrt{\langle m^2 \rangle}$ и $\sqrt{\langle (\delta n)^2 \rangle}$ для PuRhGa₅

Далее отмечается, что развитая схема расчета в однозонной модели Хаббарда не дает согласия с экспериментальными данными для изоструктурного соединения PuCoGa₅. В связи с этим в **третьей главе** исследуются системы, которые не описываются одной группой сильно коррелированных электронов. С этой целью развивалась двухзонная модель Хаббарда, которая, в отличие от однозонной модели, учитывает fd-обменные взаимодействия:

$$H_{ex} = \sum_{\mathbf{q}, l \neq l'} J_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{\mathbf{q}, l} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{q}, l'}, \quad (13)$$

где индекс l равен 1 в случае f-электронов и 2 в случае d-электронов, $J_{\mathbf{q}}$ – Фурье-образ параметра межузельного обменного взаимодействия электронов разных зон,

а кулоновское взаимодействие рассматривает для двух сильно коррелированных l -зон (f и d электронов):

$$H_U^{(l)} = U_l \sum_{\mathbf{q}, l} |\mathbf{S}_{\mathbf{q}, l} \mathbf{e}_{\mathbf{q}, l}|^2 - U_l \sum_{\mathbf{q}, l} \left| \frac{N_{\mathbf{q}, l}}{2} \right|^2. \quad (14)$$

В рамках двухзонной модели Хаббарда было показано, что учет обменного взаимодействия сильно коррелированных f- и d-электронов приводит взаимному усилению флуктуаций их электронной плотности. Выражения для коэффициентов межмодовой связи, амплитуды флуктуаций чисел заполнения, фактора обменного усиления, уравнения относительно температуры синглетного спаривания (11) в подсистемах f- и d-электронов описывается выражениями (6,11) с парциальными плотностями состояний и параметрами взаимодействий для каждой группы электронов. В тоже время квадрат амплитуды флуктуаций обменных полей содержит дополнительный вклад связанный с межузельным обменным взаимодействием и имеет вид

$$\xi_l^2 = \langle m_l^2 \rangle + \sum_{l'} (-1)^{l+l'-1} (J^2 / U_{l'} U_l) \langle m_{l'}^2 \rangle \quad (15)$$

где J – однородная часть параметра fd-обменного взаимодействия электронов, $\langle m_l^2 \rangle$ – амплитуда флуктуаций спиновой плотности подсистемы f- или d-электронов (в зависимости от значения индекса l), определяемая выражением (7) со значениями фактора обменного усиления и коэффициента разложения функции Линдхарда, отвечающими этим группам электронов.

Аналогично ранее развитой схеме сначала рассчитывалась электронная структура PuCoGa₅ в LDA+U+SO-методе. Анализ тонкой структуры показывает, что помимо f-электронов большой вклад в формирование магнитных свойств вносят также d-электроны. Поэтому для них дополнительно определялись параметры кулоновского взаимодействия $U_d=3,2$ эВ, а $U_f=4$ эВ. Полученная температурная зависимость магнитной восприимчивости сопоставлена с экспериментом на рисунке (4). Как видно из рисунка, коэффициент межмодовой связи d-электронов в парамагнитной области вблизи экспериментально наблюдаемой температуры сверхпроводимости отрицателен, а оценка температуры синглетного спаривания в системе d-электронов с учетом fd-взаимодействия ($J=0,14$ эВ) отвечает более высокому значению 20К, при значениях радиусов корреляций в спиновых подсистемах f- и d-электронов $R_c^{(f)} \approx 2,58a$ и $R_c^{(d)} \approx 1,43a$.

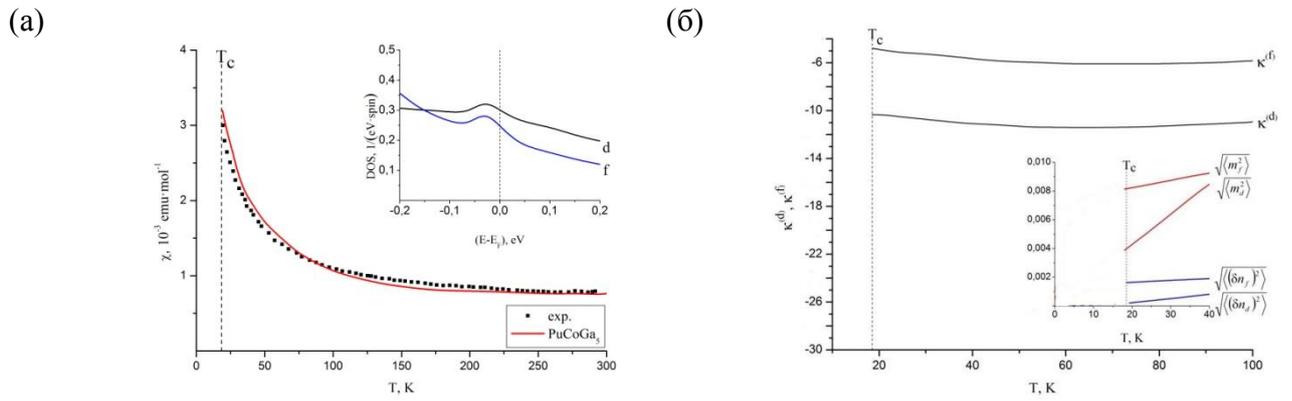


Рисунок 4 – (а) Зависимость $\chi(T)$ PuCoGa_5 в сравнение с экспериментом [9]. На вставке изображена плотность состояний d- и f-электронов вблизи уровня Ферми для PuCoGa_5 . (б) Зависимость $\kappa(T)$ PuCoGa_5 . На вставке изображены температурные зависимости $\sqrt{\langle m^2 \rangle}$ и $\sqrt{\langle (\delta n)^2 \rangle}$ для PuCoGa_5

Известно, что легирование PuCoGa_5 малым количеством актинидов 10% Np и 10%U ($\text{Pu}_{1-x}\text{An}_x$) CoGa_5 приводит к изменению магнитных характеристик. Для этих сплавов изменение электронных концентраций (x) осуществлялось путем смещения химического потенциала на кривой плотности электронных состояний родительского соединения PuCoGa_5 . Затем производился расчет восприимчивости, результаты которого сравнивались с экспериментом. В результате получено, что амплитуды спиновых и зарядовых флуктуаций исследуемых сплавов заметно меньше, чем в родительском соединении. При этом как и в исходном PuCoGa_5 , коэффициенты межмодовой связи вблизи экспериментально наблюдаемой температуры сверхпроводимости – отрицательны, причем синглетное спаривание через парамагны возникает в d-подсистеме.

В четвертой главе развивается обобщение модели Хаббарда для систем с pd(f)-гибридизацией. Здесь гамильтониан системы состоит из гамильтониана невзаимодействующих p-электронов, гамильтониана Хаббарда (2), а также гамильтониана, описывающего гибридизацию:

$$H_{pd} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} V_{\mathbf{k}} (d_{\mathbf{k}, \sigma}^+ p_{\mathbf{k}, \sigma} + p_{\mathbf{k}, \sigma}^+ d_{\mathbf{k}, \sigma}), \quad (16)$$

где $V_{\mathbf{k}}$ – энергетический интеграл перекрытия p- и d-состояний. Такая модель ранее уже развивалась для манганитов лантана [10], однако здесь впервые был выполнен анализ магнитной восприимчивости и неустойчивости относительно образования синглетных пар через парамагны.

Уравнение магнитного состояния для гибридизированных электронов имеет вид, совпадающий с (5). Однако входящие в это уравнение величины определяются через энергетические спектры гибридизованных электронов. Так коэффициент межмодовой связи определяется спектром d-подобных электронов

$$\kappa = \frac{1}{2m^2} \sum_{\alpha, \theta=\pm 1} \int \frac{\partial E_{\alpha, k}^{(\theta)}}{\partial k} \frac{\partial^2 E_{\alpha, k}^{(\theta)}}{\partial m^2} f(E_{\alpha, k}^{(\theta)} - \mu) 4\pi k^2 dk + \frac{n^{(ef)}}{U_d m^3}, \quad (17)$$

где $n^{(ef)} = \frac{1}{2} \sum_{i\alpha, \theta=\pm 1} \int \frac{\partial E_{\alpha, k}^{(\theta)}}{\partial k} \frac{\partial E_{\alpha, k}^{(\theta)}}{\partial m} f(\partial E_{\alpha, k}^{(\theta)} - \mu) 4\pi k^2 dk$, а энергии гибридизированных электронных состояний ($E_{\alpha, k}^{(\theta)}$) определяются выражением:

$$E_{\alpha, k}^{(\theta)} = (\varepsilon_k^d - U_d n_d / 2 + \alpha U_d m + \varepsilon_k^p) / 2 + \theta \sqrt{V_k^2 + (\varepsilon_k^d - U_d n_d / 2 + \alpha U_d m - \varepsilon_k^p)^2 / 4}. \quad (18)$$

При этом фактор обменного усиления

$$D^{-1} = 1 - n^{(ef)} / m. \quad (19)$$

Решая уравнение относительно аномального среднего

$$\begin{aligned} \Delta_+^{(\theta, \theta')}(\mathbf{k}) &= \frac{V(\mathbf{k})}{E_{\alpha, \theta}(\mathbf{k}) - E_{\alpha, \theta'}(\mathbf{k})} T \times \\ &\times \sum_{\omega_k} G_{k, \theta'}^{(0)} G_{k, \theta}^{(0)} \sum_{\mathbf{k}'} \Delta_+^{(\theta, \theta')}(\mathbf{k}') \left(\frac{U}{D^{-1} + X_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}} \right) \frac{V(\mathbf{k}')}{E_{\alpha, \theta}(\mathbf{k}') - E_{\alpha, \theta'}(\mathbf{k}')} \end{aligned} \quad (20)$$

получаем, что $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta \cdot V(\mathbf{k}) / (\sum_{\mathbf{k}} V(\mathbf{k})^2)^{1/2}$, в соответствии с видом гибридизационного потенциала, в случае локализации ковалентных связей в плоскости- $V_{\mathbf{k}} = V(\cos k_x - \cos k_y)$ имеет d-симметрию.

Согласно анализу уравнения (20) ненулевое решение относительно параметра Δ возникает ниже температуры T_{sc} , значение которой определяется уравнением (11) с учетом формулы (17). При этом ненулевое решение уравнения для T_{sc} получаются, как и ранее, в условиях термодинамической неустойчивости магнитных решений уравнения (5).

Ожидается, что pd-гибридизация играет важную роль в формировании электронной структуры сплавов LSCO ($\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$). Для моделирования их электронной структуры определялась электронная плотность состояний и энергетический электронный спектр в модели с гибридизацией сильно коррелированных d-электронов с p-электронами на основе данных об электронной структуре родительского соединения La_2CuO_4 . Далее путем смещения химического потенциала оценивалось изменение электронной концентрации за счет легирующего элемента, соответственно при $x=0,1; 0,16; 0,2$. Учет гибридизационных эффектов приводит к плотности состояний с большой

отрицательной кривизной (Рисунок 5). При этом для всех трех исследуемых сплавов получено, что $\chi(T)$ описывается единой универсальной кривой (Рисунок 5).

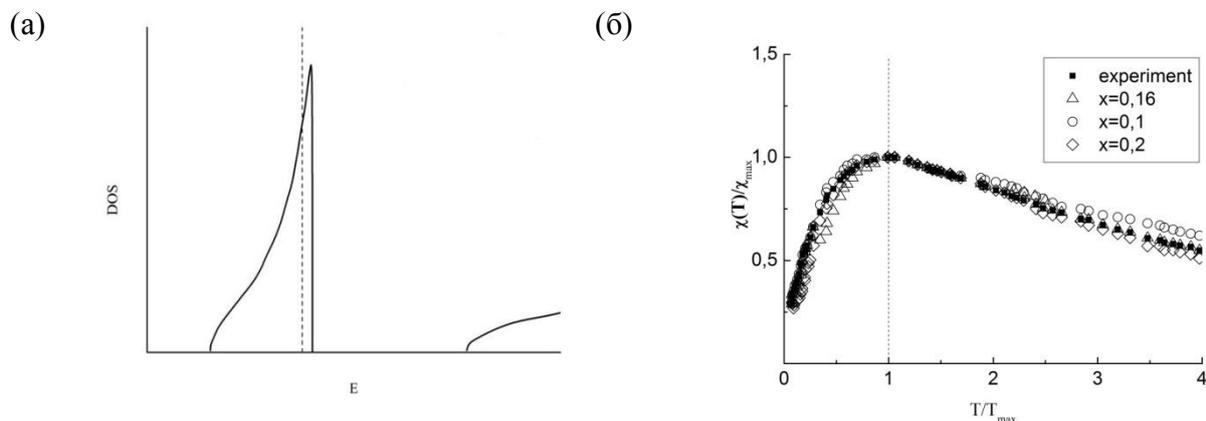


Рисунок 5 – (а) Схема плотности состояний для нормальной парамагнитной фазы $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. (б) Зависимость относительной магнитной восприимчивости от приведенной температуры: ■ - экспериментальные данные [11], ○, △, ◇ - результаты численных расчетов температурных зависимостей магнитной восприимчивости $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (для $x=0,1; 0,16; 0,2$)

Как спиновые, так и зарядовые флуктуации здесь заметно больше, чем в актинидах и их соединениях, а коэффициенты межмодовой связи для всех сплавов – отрицательные и большие по модулю, что определяет высокие значения температур синглетного спаривания. Например, при $x=0,16$ $T_{sc} \sim 50\text{K}$ при $R_c \approx 3a$.

В рамках гибридной модели также моделировалась электронная структура UGe_2 под давлением (Рисунок 6), в соответствии с которой с ростом приложенного давления плотность состояний на уровне Ферми и амплитуды электронных флуктуации растут.

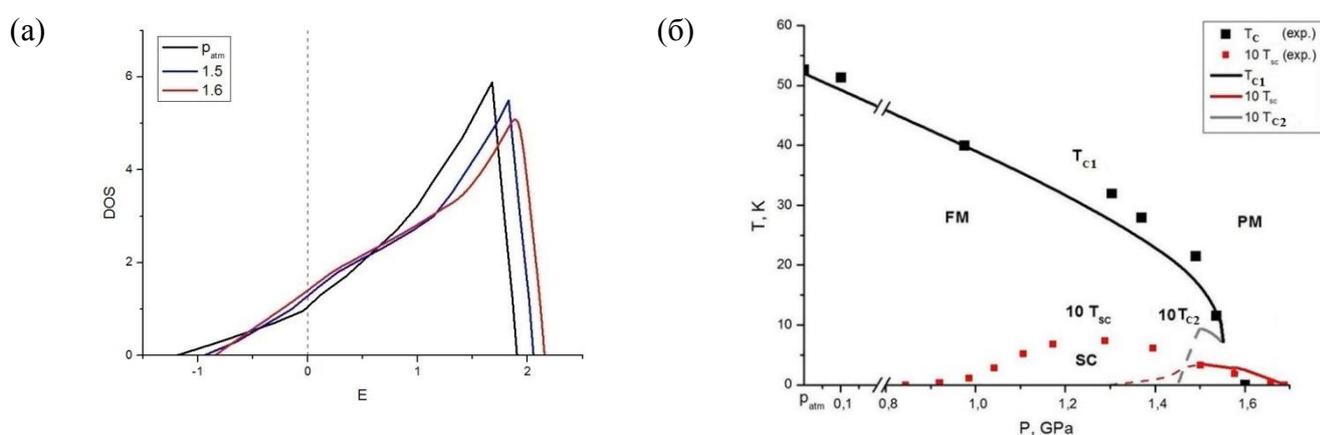


Рисунок 6 – (а) Схема плотности состояний для нормальной парамагнитной фазы UGe_2 под давлением. (б) Сравнение расчетных значений температуры Кюри и температуры синглетного спаривания с фазовой диаграммой UGe_2 [12], где SC – сверхпроводящая фаза, FM – ферромагнетизм, PM – парамагнитная область

Полученные из решений уравнения магнитного состояния оценки зависимостей от давления температур Кюри T_c для UGe_2 , согласуются с экспериментом (Рисунок 6). Кроме того, согласно проведенному анализу в небольшой области давлений $p=1,5-1,7$ ГПа в UGe_2 возникает ферромагнетизм в ограниченном интервале температур (ФОТ) от $T_{c2}(> 0K)$ до T_{c1} . При этом значения температуры синглетного спаривания, которые согласуются с данными об экспериментально наблюдаемых температурах сверхпроводимости T_{sc} , которые оказываются меньше $T_{c2} > T_{sc}$. При $p < 1,5$ ГПа значения температур синглетного спаривания, полученные в рамках настоящей модели, не согласуются с экспериментом (красная пунктирная линия на рисунке 6), что может быть связано с переходом к триплетному механизму спаривания.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ВЫВОДЫ

В диссертационной работе развивалась теория электронных спиновых и зарядовых флуктуаций, в рамках которой исследовалась электронная структура и магнитные свойства сильно коррелированных актинидов и соединений с узкими d,f-зонами. Среди конкретных результатов работы целесообразно выделить следующие:

1. В рамках модели Хаббарда и ее обобщений на случай двух коррелированных d,f-зон с межузельным df-взаимодействием и коррелированной d(f)- и некоррелированной p-зон, развита теория электронных флуктуаций, в которой рассматривается расщепление электронных состояний флуктуирующими обменными полями, приводящее к возникновению флуктуаций чисел заполнения узлов.
2. Получены уравнения магнитного состояния, учитывающее вклады продольных и поперечных спиновых флуктуаций и флуктуаций чисел заполнения. Сформулированы условия устойчивости ферромагнитных решений, которые зависят от температуры через температурные зависимости факторов обменного усиления и коэффициентов межмодовой связи.
3. Вытекающие из уравнения магнитного состояния условия устойчивости ферро- и парамагнитных решений дополнены уравнениями для аномальных функций Грина, позволяющими оценить температуры при которых возможно некогерентное синглетное парамагнитное спаривание сильно коррелированных электронов. С учетом особенностей электронных структур, сделана оценка температурной границы нормальной (не сверхпроводящей) парамагнитной фазы.
4. На основе результатов LDA+U+SO исследования электронной структуры δ -плутония и америция, проведены расчеты описывающие влияние спиновых

флуктуаций на температурные зависимости магнитной восприимчивости сильно коррелированных f -электронов. Достигнуто согласие результатов расчета с экспериментальными данными по температурным зависимостям восприимчивости, которая значительно возрастает при приближении к экспериментально наблюдаемой температуре сверхпроводимости. Определены значения факторов обменного усиления, описаны температурные зависимости амплитуд спиновых и зарядовых флуктуаций, коэффициентов межмодовой связи.

5. Получено что плотность f -электронных состояний PuRhGa_5 имеет пик в области псевдощели. Оценены температурные зависимости амплитуд спиновых и зарядовых флуктуаций и границы парамагнитной фазы исследуемых систем. Показано, что спиновые флуктуации в системе f -электронов приводят к наблюдаемой температурной зависимости спиновой магнитной восприимчивости. При этом PuRhGa_5 (в отличие от Am) константа межмодовой связи меняет знак и становится отрицательной, что ведет к потере ферромагнитных решений в области температур вблизи экспериментально наблюдаемой температуры сверхпроводимости (примерно 10К).

6. Для PuCoGa_5 показано, что спиновые и зарядовые флуктуации реализуются не только в f - но и в d -подсистеме, приводя к наблюдаемым температурным зависимостям спиновой магнитной восприимчивости. Коэффициент межмодовой связи в d -подсистеме приводит к неустойчивости ферромагнетизма, а fd -обменное взаимодействие дополнительно усиливает флуктуации плотности d -электронов, что обуславливает их парамагнетонное синглетное спаривание ниже 20 К.

7. Легирование PuCoGa_5 даже малыми количествами актинидов U и Np ($x=0,1$) ведет к ослаблению межмодовой связи и амплитуд электронных флуктуаций, приводя к понижению температур потери устойчивости ферромагнитных решений и возникновения синглетных пар.

8. На основе развитых представлений о гибридизации сильно коррелированных d -электронов с p -электронами и результатов первопринципных расчетов, предложена модель электронной структуры легированных купратов лантана ($\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$). В рамках модели электронной структуры получена экспериментально наблюдаемая d -симметрия параметра порядка связанного с синглетным парамагнетонным спариванием d -подобных электронов. Установлены температурные зависимости и границы парамагнитной фазы исследуемых систем. Получены температурные зависимости амплитуд спиновых и зарядовых флуктуаций, спиновой магнитной восприимчивости LSCO , согласующиеся с экспериментальными данными для парамагнитной фазы.

9. На основе представлений о гибридизации сильно коррелированных f -электронов с p -электронами и результатов первопринципных расчетов развита модель электронной структуры UGe_2 . В рамках модели определена область

ферромагнитного упорядочения UGe_2 и при различных давлениях проведены оценки температур Кюри, результаты которых согласуются с экспериментом.

10. Показано, что в UGe_2 синглетное парамагнетное спаривание возможно при $p=1,5-1,7$ ГПа. В этом же интервале давлений ферромагнетизм реализуется в ограниченном интервале температур от T_{c1} до T_{c2} , причем область синглетного спаривания оказывается ниже T_{c2} .

Перспектива дальнейшей разработки темы. Развитая в настоящей работе теория электронных спиновых и зарядовых флуктуаций, описывающая свойства нормальной фазы исследуемых систем, в дальнейшем может служить хорошей стартовой моделью для исследования их сверхпроводящей фазы. Представляет особый интерес анализ механизмов триплетного спаривания сильно коррелированных электронов, что, в частности, поможет описать электронную структуру, условия и механизмы сосуществования ферромагнетизма и сверхпроводимости в германидах урана UGe_2 , $UCoGe$ и $URhGe$ и др.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Moore, K. T. Nature of the 5f states in actinide metals /K.T. Moore, G. van der Laan// Rev. Mod. Phys. – 2009. – V. 81, № 1. – P. 235-298.
2. Hubbard, J. Electron correlations in narrow energy bands / J. Hubbard // Proc. Roy. Soc.– 1963. – V. 276.– P. 238-257.
3. Повзнер, А.А. Особенности электронной структуры и магнитной восприимчивости δ -плутония /А.А. Повзнер, А.Г. Волков, А.Н. Филанович// Письма в ЖТФ. – 2010. –Т. 36. –В.23. –С. 47-54.
4. McCall, S.K. Emergent magnetic moments produced by self-damage in plutonium/ S.K. McCall, M. J. Fluss, B.W. Chung, M.W. McElfresh, D.D. Jackson, G.F. Chapline//PNAS. – 2006. – V. 103, № 46. – P. 17179-17183.
5. Lukoyanov, A.V. Electronic structure and magnetic state of transuranium metals under pressure / A.V. Lukoyanov, A.O. Shorikov, V.B. Bystrushkin, A.A. Dyachenko, L.R. Kabirova, Yu.Yu. Tsiovkin, A.A. Povzner, V.V. Dremov, M.A. Korotin, V.I. Anisimov // J. Phys.Condens. Matter. –2010. – V. 22. – P. 495501 1-5.
6. Kanellakopoulos, B. The magnetic susceptibility of americium and curium metal/ B. Kanellakopoulos, A. Blaise, J.M. Fournier, W. Müller // Sol. St. Comm.– 1975. – V. 17. – P. 713-715.
7. Лукоянов, А.В. Электронная структура и магнитные свойства соединений класса $PuMGa_5$ в рамках метода LDA+U+SO/ А.В. Лукоянов, А.О.

- Шориков, В.И. Анисимов, В.В. Дремов//Письма в ЖЭТФ. . – 2012. –Т. 96. – В.7. –С. 499-503.
8. Boulet, P. Tuning of the electronic properties in PuCoGa₅ by actinide (U, Np) and transition-metal (Fe, Rh, Ni) substitutions /P. Boulet, E. Colineau, F. Wastin, J. Rebizant, P. Javorsky, G.H. Lander, J.D. Thompson // Phys. Rev. B.– 2005. – V. 72. – P. 104508 1-8.
 9. Sarrao, J. L. Plutonium-based superconductivity with a transition temperature above 18 K / J. L. Sarrao, L.A. Morales, J.D. Thompson, B.L. Scott, G.R. Stewart, F. Wastin, J. Rebizant, P. Boulet, E. Colineau, G.H. Lander // Nature.– 2002. – V. 420.– P. 297-299.
 10. Волков, А.Г. Аномальное влияние внешнего магнитного поля на спиновые флуктуации в магнитных полупроводниках с сильной *pd*-гибридизацией и эффект колоссального магнитосопротивления / А.Г. Волков, А.А. Повзнер // ФТТ. – 2012. –Т. 54.– В. 12.– С. 2224-2228.
 11. Nakano, T. Spin susceptibility of La_{2-x}Sr_xCuO₄; modification of localized character of Cu 3d-electrons at $x \geq 0,15$ / T. Nakano, K. Yamaya, N. Momono, M. Oda, M. Ido // J. Low Temp. Phys.– 1996. – V. 105.– P. 395-400.
 12. Saxena, S.S. Superconductivity on the border of itinerant-electron ferromagnetism in UGe₂ / S.S. Saxena, P. Agarwal, K. Ahilan, F. M. Grosche, R. K. W. Haselwimmer, M. J. Steiner, E. Pugh, I. R. Walker, S. R. Julian, P. Monthoux, G. G. Lonzarich, A. Huxley, I. Sheikin, D. Braithwaite, J. Flouquet// Nature. – 2000. – V. 406.– P. 587-592.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

Статьи в рецензируемых научных журналах, определенных ВАК:

1. Lukoyanov, A.V. Electronic structure and magnetic state of transuranium metals under pressure / A.V. Lukoyanov, A.O. Shorikov, V.B. Bystrushkin, A.A. Dyachenko, **L.R. Golubeva (Kabirova)**, Yu.Yu. Tsiovkin, A.A. Povzner, V.V. Dremov, M.A. Korotin, V.I. Anisimov // J. Phys. Condens. Matter. – 2010. – V. 22. –P. 495501 1-5 (0,31 п.л. / 0,03 п.л.).
2. Повзнер, А.А. Сверхпроводимость в системе сильно коррелированных электронов PuRhGa₅ / А.А. Повзнер, А.Г. Волков, **Л.Р. Голубева (Кабирова)**, А.Е. Ласкина, Н.Н. Суслина, А.Н. Черепанова // Фундаментальные исследования. – 2012. – №11. – С. 705-709 (0,31 п.л. / 0,05 п.л.).

3. Povzner, A.A. Electronic structure and spin-fluctuation effects in the normal phase PuCoGa_5 / A.A. Povzner, A.G. Volkov, **L.R. Golubeva (Kabirova)** // J. Supercond. Nov. Magn. – 2013. – V. 26. – P. 1653-1656 (0,25 п.л. / 0,08 п.л.).
4. Повзнер, А.А. О возможности спин-флуктуационного механизма возникновения сверхпроводимости в области магнитной неустойчивости (на примере PuCoGa_5) / А.А. Повзнер, А.Г. Волков, **Л.Р. Голубева (Кабирова)** // Известия РАН. Серия физическая. – 2013. – Т. 77, № 10. – С. 1391-1394 (0,25 п.л. / 0,08 п.л.).
5. Povzner, A.A. Magnetic susceptibility and features of electronic structure PuRhGa_5 / A.A. Povzner, A.G. Volkov, **L.R. Golubeva** // J. Supercond. Nov. Magn. – 2014. – V. 27. – P. 2347-2351 (0,31 п.л. / 0,1 п.л.).
6. Povzner, A.A. Spin-fluctuation mechanism of superconductivity of strongly correlated transition metal compounds with pd-hybridization / A.A. Povzner, A.G. Volkov, **L.R. Golubeva** // J. Supercond. Nov. Magn. – 2015. – V. 28. – P. 297-301 (0,31 п.л. / 0,1 п.л.).

Другие публикации:

7. Povzner, A.A. Electronic structure and spin-fluctuation effects in the normal phase PuCoGa_5 / A.A. Povzner, A.G. Volkov, **L.R. Golubeva (Kabirova)** // Conference on superconductivity and magnetism (ICSM 2012): 3rd International conference abstract book: April–May 2012 г. – Turkey, 2012. - P. 233 (0,06 п.л. / 0,02 п.л.).
8. Повзнер, А.А. О возможности спин-флуктуационного механизма возникновения сверхпроводимости в области магнитной неустойчивости (на примере PuCoGa_5) / А.А. Повзнер, А.Г. Волков, **Л.Р. Голубева (Кабирова)** // Новое в магнетизме и магнитных материалах: сборник трудов по материалам XXII Международной конференции: сентябрь, 2012 г. – Астрахань, 2012. - С. 124-127 (0,25 п.л. / 0,08 п.л.).
9. Повзнер, А.А. Спин-флуктуационный механизм возникновения сверхпроводимости в системе сильно коррелированных электронов / А.А. Повзнер, А.Г. Волков, **Л.Р. Голубева (Кабирова)** // Сборник трудов по материалам XXXVI совещания по физике низких температур: июль, 2012 г. – Санкт-Петербург, 2012. - С. 248 (0,06 п.л. / 0,02 п.л.).

10. **Голубева, Л.Р.** Магнитные свойства и критическая температура сверхпроводящих соединений класса Pu115 / **Л.Р. Голубева**, А.А. Повзнер, А.Г. Волков // Физические свойства металлов и сплавов: Сборник тезисов докладов Всероссийской научно-технической конференции: ноябрь, 2013 г. – Екатеринбург, 2013. - С. 29 (0,06 п.л. / 0,02 п.л.).
11. Povzner, A.A. Magnetic susceptibility and features of electronic structure of PuRhGa₅ / A.A. Povzner, A.G. Volkov, **L.R. Golubeva** // Journées des Actinides (JDA 2014): 44th International conference abstract book: April 2014 г. – Israel, 2014. - P.170-171(0,13 п.л. / 0,04 п.л.).
12. **Golubeva, L.R.** The features of the electronic structure of the superconducting compounds of 5f-metals with strong spin-orbit interaction / **L.R. Golubeva**, A.A. Povzner, A.G. Volkov, O.A. Bocharnikova // Conference on superconductivity and magnetism (ICSM 2014): 4rd International conference abstract book: April–May 2014 г. – Turkey, 2014. - P.965 (0,06 п.л. / 0,02 п.л.).
13. Povzner, A.A. Magnetic properties and superconductivity of americium metal under pressure / A.A. Povzner, A.G. Volkov, **L.R. Golubeva** // Journées des Actinides (JDA 2015): 45th International conference abstract book: April 2015 г. – Czech Republic, 2015. - P.01 1-3 (0,19 п.л. / 0,06 п.л.).

Подписано в печать

Формат 60x84 1/16

Бумага писчая

«__» _____ 2015 г.

Офсетная печать

Тираж 100 экз.

Заказ №

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