

Ноговицына Татьяна Андреевна

**ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В
ГЕЛИКОИДАЛЬНЫХ ФЕРРОМАГНЕТИКАХ $MnSi$ И $Fe_{1-x}Co_xSi$ С
НЕЦЕНТРОСИММЕТРИЧНОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКОЙ**

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Екатеринбург – 2018

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

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

Официальные оппоненты: **Мирзоев Александр Аминулаевич,**
доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», г. Челябинск, главный научный сотрудник кафедры компьютерного моделирования и нанотехнологий;

Бодряков Владимир Юрьевич,
доктор физико-математических наук, доцент, ФГБОУ ВО «Уральский государственный педагогический университет», г. Екатеринбург, заведующий кафедрой высшей математики и методики обучения математике

Ведущая организация: ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Ленинградская обл., г. Гатчина

Защита состоится «07» декабря 2018 г. в 15:00 ч на заседании диссертационного совета Д 212.285.02 на базе ФГАОУ ВО «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 ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», <http://lib.urfu.ru/mod/data/view.php?d=51&rid=285506>

Автореферат разослан «___» _____ 2018 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета

Ищенко Алексей Владимирович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. В последнее время наблюдается значительный рост интереса к структурам со спиновой киральностью. В частности, это относится к материалам, в которых из-за антисимметричного релятивистского обменного взаимодействия Дзялошинского – Мории (ДМ) образуется левая спиновая спираль с аномально большим магнитным периодом ($\sim 10^2 \div 10^3$ Å) и фиксированным направлением волнового вектора. Яркими представителями этой группы являются силициды и германиды переходных металлов, кристаллизующиеся в структурном типе В20 с пространственной группой $P2_13$ и др. Такие системы обладают спиновой и решеточной киральностью, и являются прототипами спинтронных материалов, поскольку в них были обнаружены топологически стабильные структуры – скирмионные решетки. Скирмионные состояния на фазовых диаграммах, рассматриваемых в настоящей работе соединений, находятся в области магнитного фазового перехода, однако природа самого перехода до сих пор окончательно не установлена. При этом в области высоких давлений температура перехода в MnSi стремится к нулю, что открывает возможность наблюдения квантовых критических явлений.

При нейтронографических исследованиях были получены указания на то что в сплавах MnSi, $Fe_{1-x}Co_xSi$, $Fe_{1-y}Mn_ySi$ и др. при магнитных фазовых переходах возникают флуктуации спиновой спирали, а во внешнем магнитном поле - скирмионные состояния. Имеются указания (см., например, [1, 2]) на то, что рассматриваемые магнитные фазовые переходы относятся к переходам, индуцированным флуктуациями, однако причины таких особенностей не установлены. Интерпретация такого сценария фазового перехода может быть построена по аналогии с теорией Бразовского для немагнитных материалов [2-4]. Фазовый переход, вызванный флуктуациями, рассматривается как следствие неаналитического слагаемого в функционале свободной энергии Гинзбурга – Ландау, которое образуется поправками, вызванными взаимодействием различных мод флуктуаций. Такая, обусловленная флуктуационным взаимодействием поправка межмодового взаимодействия должна приводить вместо фазового перехода второго рода к фазовому переходу первого рода. Однако выяснение причин зависимости от температуры и смены знака параметра межмодового взаимодействия, требуют изучения их

взаимосвязи с электронной структурой и параметрами межэлектронного взаимодействия, для которых первопринципные расчеты пока не дают однозначных решений. В частности, первопринципные расчеты дают заметные расхождения по величине магнитного момента, полученного на эксперименте и вычисленного *ab initio* в случае MnSi. В этой же связи, остается не выясненной природа наблюдаемых аномалий не только магнитных, но и тепловых свойств.

Таким образом актуальным представляется развитие спин-флуктуационной теории, основанной на результатах первопринципных расчетов основного состояния, которая бы с одной стороны описывала экспериментальные данные о фазовых магнитных и квантовых переходах, в моносилицидах 3d-металлов со спиновой киральностью, а с другой стороны уточняла бы представления об их электронной структуре.

Степень разработанности темы исследования. В современной научной литературе накоплен достаточно большой объем как теоретических, так и экспериментальных работ, посвященных физическим свойствам моносилицидов переходных металлов и их сплавов со спиновой киральностью. Большую часть теоретических исследований геликоидального ферромагнетизма составляют работы Т. Мории и А. Кавабата, К. Мурата и С. Дониах, С.В. Малеева, А.А. Повзнера, Г. Лонзарича и Л. Тайлифера. Развиваемые ранее спин-флуктуационные теории исходили из того, что согласно эмпирической классификации Роудса - Вольфарта рассматриваемые сплавы являются слабыми зонными магнетиками. Однако результаты современных первопринципных расчетов и экспериментальные результаты, указывают на неприменимость этих теорий. При этом П. Баком и М. Янсенем было указано на важную роль взаимодействия между спиновыми флуктуациями в области магнитного фазового перехода в магнетиках со структурой B20.

Ярким представителем моносилицидов 3d-переходных металлов со спиновой киральностью является MnSi. Первопринципные расчеты электронной структуры не дают однозначных решений для расчетных значений магнитных моментов и параметров межэлектронных взаимодействий [5, 6]. Эксперимент показывает ряд аномалий, которые требуют теоретического объяснения. К ним относятся резкие аномалии на температурных зависимостях магнитной восприимчивости,

теплоемкости, объемного коэффициента теплового расширения (ОКТР) [7], вблизи которых возникает температурное «плечо» не известной природы. Исследования рассеяния нейтронов показывают, что при переходе в парамагнитное состояние возникает фаза с флуктуациями спиновой спирали [8]. Аналогичные особенности экспериментально наблюдаются в сплавах $Fe_{1-y}Mn_ySi$.

Сплавы $Fe_{1-x}Co_xSi$ также интенсивно исследуются после обнаружения в них стабильной скирмионной решетки. С точки зрения первопринципного описания электронной структуры основного состояния они отличаются от $MnSi$ и $Fe_{1-y}Mn_ySi$. Так в $MnSi$ уровень Ферми расположен в нижней зоне t_{2g} и e_g - состояний, а в $Fe_{1-x}Co_xSi$ - в отделенной от нее энергетической щелью верхней зоне t_0 - состояний. Таким образом, сравнительное исследование $MnSi$ и $Fe_{1-x}Co_xSi$ позволит рассмотреть роль особенности электронной структуры в формировании магнитных свойств веществ со структурным типом B20. При этом картина температурных зависимостей теплоемкости и ОКТР для этих групп веществ различается [3, 9]. В $Fe_{1-x}Co_xSi$ вблизи температуры максимума однородной магнитной восприимчивости (T_C) в отличие от $MnSi$ и $Fe_{1-y}Mn_ySi$ экспериментально обнаружен сильно размытый по температуре минимум отрицательного коэффициента теплового расширения.

Целью настоящей работы является развитие спин-флуктуационного подхода, основанного на учете результатов первопринципного моделирования электронной структуры основного состояния, к описанию фазовых переходов в сильно коррелированных электронных системах со спиновой киральностью и установление на этой основе механизмов формирования температурных зависимостей магнитной восприимчивости, теплоемкости и теплового расширения в геликоидальных ферромагнетиках $MnSi$ и $Fe_{1-x}Co_xSi$.

В соответствии с целью исследования были поставлены следующие **задачи**:

1. Приложение спин-флуктуационной теории к модели сильно коррелированного ферромагнетика с взаимодействием Дзялошинского-Мория.

2. Уточнение результатов LDA+U+SO - расчетов электронной структуры основного состояния рассматриваемых соединений и сплавов, на основе сопоставления результатов вычислений магнитной восприимчивости, теплоемкости и теплового расширения с экспериментальными данными.

3. Исследование температурных зависимостей локальной намагниченности, амплитуд спиновых флуктуаций и радиусов спиновых корреляции MnSi и $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, и их сопоставление с экспериментальными данными.

4. Изучение магнитообъемных эффектов и магнито-электронных составляющих объемного коэффициента теплового расширения (в модели соответственных состояний), и на этой основе анализ теплоемкости при постоянном давлении.

5. Определение температурных зависимостей решеточных свойств, основанных на описании сильно ангармоничных акустических и оптических мод, электронных и магнитных составляющих тепловых и упругих свойств рассматриваемых соединений и сплавов, в рамках самосогласованной термодинамической модели Дебая – Эйнштейна.

Научная новизна представленных в диссертационной работе результатов состоит в следующем:

1. Предложен феноменологический спин-флуктуационный подход к описанию термодинамических и квантовых переходов в киральных системах, основанный на учете данных об особенностях их электронной структуры.

2. Уточнены данные LDA+U+SO-расчетов о плотностях электронных состояний, значениях параметров межэлектронных взаимодействий в MnSi и $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$.

3. Впервые показано, что изменение знака коэффициента межмодовой связи, обусловленное близостью химического потенциала к области энергий с большой положительной кривизной плотности состояний, что ведет к фазовому магнитному переходу, сопровождаемому исчезновением геликоидального ферромагнетизма и возникновением области геликоидального ближнего порядка. При температуре фазового перехода вследствие изменения знака параметра межмодовой связи формируется максимум на температурной зависимости магнитной восприимчивости MnSi и $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$.

4. Впервые показано, что большие по величине нулевые квантовые флуктуации в MnSi скачкообразно исчезают при фазовом переходе, что приводит к экспериментально наблюдаемым лямбда-подобным аномалиям на температурных зависимостях теплового расширения и теплоемкостей при постоянных объеме и давлении.

5. Показано, что в сплавах $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ эффект нулевых спиновых флуктуаций оказывается пренебрежимым. Получено, что электронные флуктуации, связанные с

различием кулоновских потенциалов атомов Fe и кобальта, «размывают» аномалии теплоемкости и КТР, что ведет к экспериментально наблюдаемому широкому минимуму в области магнитного упорядочения на температурной зависимости отрицательных коэффициентов теплового расширения.

6. Показано, что магнито-электронный вклад в ОКТР меняет знак на положительный при температуре исчезновения геликоидального ближнего порядка (и локальной намагниченности).

7. Впервые установлено, что наблюдаемое на температурных зависимостях теплового расширения и теплоемкости MnSi «плечо», возникает в области геликоидального ближнего порядка, и исчезает с исчезновением локальной намагниченности.

8. Установлено, что параметры Грюнайзена, связанные с ангармонизмом кристаллической решетки в системе $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ уменьшаются с повышением концентрации кобальта. При этом усиливается влияние магнитной и электронной подсистем на коэффициент теплового расширения.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. В моносилициде марганца в основном состоянии возникают нулевые квантовые флуктуации, амплитуда которых резко уменьшается вблизи температуры магнитного фазового перехода. Это приводит к скачку термодинамической энтропии и к лямбда-подобной аномалии теплоемкости при постоянном объеме.

2. Смена знака параметра межмодового взаимодействия приводит к формированию температурных максимумов магнитной восприимчивости MnSi и сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ при фазовом переходе. Вследствие изменения знака параметра межмодового взаимодействия возникают флуктуации спиновых спиралей, геликоидальный порядок исчезает при переходе в парамагнитное состояние.

3. В сплавах $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ наряду со спиновыми термодинамическими флуктуациями возникают флуктуации кулоновских потенциалов Fe и Co на узлах, вклад которых в среднеквадратический спиновый магнитный момент приводит смене знака коэффициента межмодовой связи при фазовом переходе.

4. Лямбда-подобная аномалия теплового расширения, наблюдаемая при фазовом переходе в MnSi связана со скачком объема вследствие исчезновения нулевых флуктуаций.

5. Подавление эффекта нулевых флуктуаций при фазовом переходе в сплавах $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, приводит к тому что особенности температурной зависимости теплового расширения определяются монотонно возрастающими тепловыми флуктуациями и аномалии отрицательного теплового расширения размываются.

Теоретическая и практическая значимость работы заключается в развитии теории спиновых флуктуаций для сильно коррелированных моносилицидов 3d-металлов и сплавов на их основе со спиновой киральностью. Основанная на результатах, проведенных *ab initio* расчетов электронной структуры, феноменологическая спин-флуктуационная теория позволяет не только установить природу магнитных фазовых переходов в рассмотренных киральных магнетиках на основе моносилицидов 3d-переходных металлов, но также уточнить данные о параметрах межэлектронных взаимодействий. Знание о поведении сильно коррелированных соединений переходных металлов со спиновой киральностью при нормальных условиях необходимо для развития представлений о влиянии магнитного поля и давления на их магнитные, электронные и тепловые свойства.

В диссертации исследуются геликоидальные ферромагнетики, являющиеся прототипом материалов современной микроэлектроники. При выборе объектов диссертационного исследования наряду с MnSi , исследовались сплавы $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, которые имеют достаточно широкую область стабильных скирмионных состояний и сравнительно высокие температуры перехода в парамагнитное состояние. Развитые в диссертации подходы, показывают, что величина периодов спиновых спиралей является важным фактором, определяющим размеры скирмионных состояний, и представляют интерес для поиска новых веществ со скирмионными свойствами.

Методология и методы исследования. Для решения поставленных в диссертационном исследовании задач по описанию электронных и магнитных свойств потребовалось развитие спин-флуктуационной теории основанной на функционале свободной энергии в модели Хаббарда – Канамори, дополненным учетом взаимодействия Дзялошинского-Мории. Данная теория основана на исследовании функциональных интегралов по стохастическим обменным и зарядовым полям. При суммировании рядов квантово-статистических средних, использовалось приближение однородных локальных полей, но с учетом в вершинных частях второго порядка зависимостей функций Линдхарда от квазиимпульсов и частот. Такой учет необходим

в связи с экстремально сильной зависимостью факторов обменного усиления от квазиимпульсов и частот, особенно в области магнитных фазовых переходов.

Для описания основного состояния рассматриваемых систем в диссертационном исследовании использовались методы расчета электронной структуры, основанные на теории функционала электронной плотности в приближении LDA+U+SO.

Личный вклад автора. Постановка задач, выбор методов расчета, обсуждение и интерпретация полученных результатов, а также их апробация проведены совместно с научным руководителем. Развитие феноменологической спин-флуктуационной теории выполнено совместно с соавторами работ. Первопринципные расчеты электронной структуры и сопоставление с экспериментом выполнены непосредственно диссертантом.

Достоверность полученных результатов обеспечивается теоретико-методологической обоснованностью, их внутренней непротиворечивостью, согласием с результатами экспериментов и предыдущих теоретических работ.

Апробация результатов работы. Материалы диссертационного исследования были доложены на следующих конференциях: 20th international conference on solid compounds of transition elements (Zaragoza, Spain, April 2016); Первый Российский кристаллографический конгресс (Москва, Россия, ноябрь 2016); Quantum Criticality & Novel Phases 2017 (Berlin, Germany, February - March 2017); The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (Prague, Czech Republic, July 2017); V Конференция по малоугловому рассеянию нейтронов "МУРомец 2017" (Гатчина, Россия, сентябрь 2017); The 21st International Conference on Solid Compounds of Transition Elements (Vienna, Austria, March 2018).

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 15 научных работ, в том числе 9 статей в рецензируемых научных журналах, входящих в перечень ВАК РФ.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы. Она изложена на 138 страницах, включая 52 рисунка и 3 таблицы. Список цитируемой литературы содержит 98 наименования.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность диссертационного исследования, сформулирована цель и поставлены вытекающие из нее задачи. Показаны степень

разработанности темы исследования, 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** представлен обзор экспериментальных и теоретических работ, посвященных сильно коррелированным соединениям и сплавам переходных металлов с кристаллографической структурой типа B20 (пространственная группа $P2_13$), в которой отсутствует инверсионная симметрия. Отличительной чертой этих веществ является атомная и магнитная киральность.

Отмечается, что предложенные ранее спин-флуктуационные теории слабого зонного ферромагнетизма не учитывали особенности зонной структуры, а также не рассматривали роль межмодового взаимодействия спиновых флуктуаций, на которую было указано Баком и Янсенем.

Обсуждаются необычные особенности, наблюдаемые при фазовых переходах в рассматриваемых системах. Отмечается, что до сих пор окончательно не выяснен вопрос о природе резких аномалий теплоемкости, ОКТР и магнитной восприимчивости при фазовом переходе в MnSi. Остаются дискуссионными вопросы, связанные с тем почему в $Fe_{1-x}Co_xSi$ похожее поведение, наблюдается только на восприимчивости, на тепловом расширении в области магнитного упорядочения имеет место широкая инварная аномалия, а теплоемкость изменяется монотонно.

Еще одной особенностью рассматриваемых фазовых переходов является наблюдение при нейтронографическом исследовании флуктуаций спиновой спирали, которые во внешнем поле трансформируются в скирмионную решетку.

Обсуждаются результаты первопринципных расчетов электронной структуры основного состояния MnSi и $Fe_{1-x}Co_xSi$. Перечислены трудности и неоднозначности, возникающие при оценках величин магнитных моментов. Указано на необходимость уточнения значений параметров внутриатомного кулоновского и хундовского межэлектронных взаимодействий.

В конце первой главы, на основе анализа литературных данных, сформулированы задачи диссертационного исследования, а также предлагается схема самосогласованной процедуры описания фазовых магнитных переходов и моделирования электронной структуры, которая объединяет *ab initio* расчеты

электронной структуры с расчетами магнитных, тепловых и электронных свойств с учетом спиновых флуктуаций, с последующим согласованием с экспериментом.

Во **второй главе** развивается феноменологическая спин-флуктуационная теория описания фазового перехода в геликоидальных ферромагнетиках. Для вычислений используется гамильтониан Хаббарда, который состоит из гамильтониана в приближении LDA+U+SO и поправки, которая учитывает многочастичные корреляции, связанные с хаббардовским (U) и хундовским (J) взаимодействиями:

$$\delta H_{\text{int}} = \frac{1}{4} \sum_q \left[(U - J/2) |\delta n_q|^2 - (U + J) \sum_m |\delta n_{q,m}|^2 \right] - \sum_q \left[J |\delta S_q^{(z)}|^2 + (U - J) \sum_m |\delta S_{q,m}^{(z)}|^2 \right]. \quad (1)$$

Далее, используя мацубаровское представление записывается статистическая сумма $Z = Sp T_\tau \exp\left(-\int_0^\beta H(\tau) d\tau\right)$. Для того, чтобы свести многочастичную задачу к взаимодействию электронов с флуктуирующими обменными (ξ) и зарядовыми (η) полями применяются преобразования Стратоновича – Хаббарда

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} (d\xi, d\eta) \exp(-\Phi(\xi, \eta)/T), \quad (2)$$

$\Phi(\xi, \eta) = -T \ln Sp T_\tau \exp(-H_{\text{eff}}(\xi, \eta)/T)$, и записывается эффективный гамильтониан, который описывает одновременное движение свободных электронов во флуктуирующих обменных и зарядовых полях:

$$H_{\text{eff}} = \sum_{k,m,\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k},m}^{(0)} a_{k,m,\sigma}^+ a_{k,m,\sigma} + c \sum_{v,m} (\xi_{v,m} \mathbf{S}_{v,m} + (i/2) \eta_{v,m} n_{v,m}). \quad (3)$$

При квантово-статическом усреднении производится разложение по степеням H_{eff} , результат которого суммируется в приближении однородных локальных полей. При этом возникают параметры межмоджового взаимодействия. Неоднородность обменного взаимодействия рассматривается в вершинных частях второго порядка, описываемых функциями Линдхарда. Учет ДМ-взаимодействия осуществляется путем замены

$$H_{\text{eff}} \rightarrow H_{\text{eff}} - \sum_m [\mathbf{h}_{\mathbf{q}_0,m}^{(D)} \times \mathbf{S}_{-\mathbf{q}_0,m}], \quad \xi_{q,m} = \xi_{q,m} - \mathbf{h}_{\mathbf{q}_0,m}^{(D)} / c, \quad (4)$$

где $\mathbf{h}_{\mathbf{q}_0}^{(D)} = [\mathbf{M}_{\mathbf{q}_0,m} \times \mathbf{d}_{-\mathbf{q}_0}]$ – среднее поле Дзялошинского, $\mathbf{d}_{\mathbf{q}_0} = id\mathbf{q}_0$, d – постоянная

Дзялошинского, $\mathbf{M}_{\mathbf{q}_0,m} (= \langle \mathbf{S}_{\mathbf{q}_0,m} \rangle)$ – вектор неоднородной намагниченности на векторе \mathbf{q}_0 .

Расчет квантово-статистических средних, которые фигурируют в получаемом выражении для статистической суммы, будем проводить на основе приближения

однородных локальных полей. Вычисления функциональных интегралов выполнены на основе метода перевала по переменным $\xi_0, \text{Re}\xi_{\mathbf{q}_0, \gamma}$ и $\text{Im}\xi_{\mathbf{q}_0, \gamma}, \eta_0, \eta_q, |\xi_{q, \gamma}|$ и $\varphi_q^{(\gamma)} (= \arg \xi_{q, \gamma})$.

В результате получаем уравнение магнитного состояния:

$$\mathbf{M}_{\mathbf{q}_0} (D^{-1} + X(\mathbf{q}_0, 0) + a) + 2^{-1} \kappa \mathbf{M}_{-\mathbf{q}_0} (\mathbf{M}_{\mathbf{q}_0})^2 = \mathbf{h}_{\mathbf{q}_0}^{(D)}, \quad (5)$$

в котором $\kappa = (U^3/M^2) \left[(2UM)^{-1} \Delta n - 2 \left(\sum_{\alpha=\pm 1} g_\alpha(\mu) \right)^{-1} \prod_{\alpha=\pm 1} g_\alpha(\mu) \right]$ - коэффициент

межмодового взаимодействия, $D^{-1} = 1 - (2UM)^{-1} \Delta n + \kappa \langle \mathbf{M}^2 \rangle / 3$ - фактор обменного

усиления однородной магнитной восприимчивости, $\Delta n = \sum_{\alpha=\pm 1} \alpha \int_{-\infty}^{\infty} g_\alpha(\varepsilon) f(\varepsilon - \mu) d\varepsilon$.

Используя связь перевальных значений стохастических полей с квантово-статистическими средними операторов спиновой плотности, и устремляя \mathbf{q} к нулю определим однородную магнитную восприимчивость

$$\chi = 8U^{-1} \left[\left(D^{-1} + 2\kappa M_S^2 + a \right)^{-1} - 1 \right], \quad (6)$$

которая имеет температурный максимум при смене знака параметра межмодовой связи и исчезновении термодинамической устойчивости геликоидального ферромагнетизма (температура T_C).

Уравнение магнитного состояния дает два решения: первое описывает ферромагнитный геликоид с фиксированным вектором амплитуды геликоидальной структуры и соответствует модели Янсена-Бака:

$$M_{\mathbf{v}}^{(x)} = M_S \text{Cos}(\mathbf{q}_0 \mathbf{v}) \text{ и } M_{\mathbf{v}}^{(y)} = -M_S \text{Sin}(\mathbf{q}_0 \mathbf{v}). \quad (7 \text{ а})$$

Второе решение описывает область флуктуаций спирали, где фаза ϕ меняется случайным образом ($T_C < T < T_S$ и $\kappa \leq 0$)

$$\langle S_{\mathbf{v}}^{(x)} \rangle = M_S \text{Cos}(\mathbf{q}_0 \mathbf{v} + \phi) \text{ и } \langle S_{\mathbf{v}}^{(y)} \rangle = -M_S \text{Sin}(\mathbf{q}_0 \mathbf{v} + \phi). \quad (7 \text{ б})$$

Внутри областей размеры которых определяются радиусом спиновых корреляций:

$$R_C = k_F^{-1} A^{1/2} (D^{-1} + 2\kappa M_S^2 + a)^{-1/2} \sim (U\chi)^{1/2} \quad (8)$$

сохраняется геликоидальный порядок с различными начальными фазами.

При этом локальная намагниченность M_S не исчезает в точке перехода T_C , и определяется выражением:

$$M_S^2 = (2\kappa)^{-1} \left((D^{-1} + X(\mathbf{q}_0, 0) + a)^2 - (dq_0)^2 \right)^{1/2}. \quad (9)$$

Температура исчезновения локальной намагниченности $T_S (>T_C)$:

$$T_S = \kappa^{-1} B^{-1} U \left(\left| D \left(\langle M^2 \rangle_{T_S}^{1/2} \right)^{-1} \right| - a - dq_0/U \right)^{1/2}.$$

Для численного анализа электронных и магнитных свойств MnSi проведены LDA+U+SO-расчеты электронной структуры. В MnSi уровень Ферми лежит в сильно вырожденной энергетической зоне t_{2g} , e_g – состояний, с сильным хаббардовским (U) и хундовским (J) взаимодействиями. Значения параметра U подбирались при расчетах энергии основного состояния (рисунок 1) и при сравнении расчетов с экспериментом $U=0,93$ эВ, значение параметра обменного взаимодействия Хунда $J=0.49$ эВ следует из вычислений для заданного значения U .

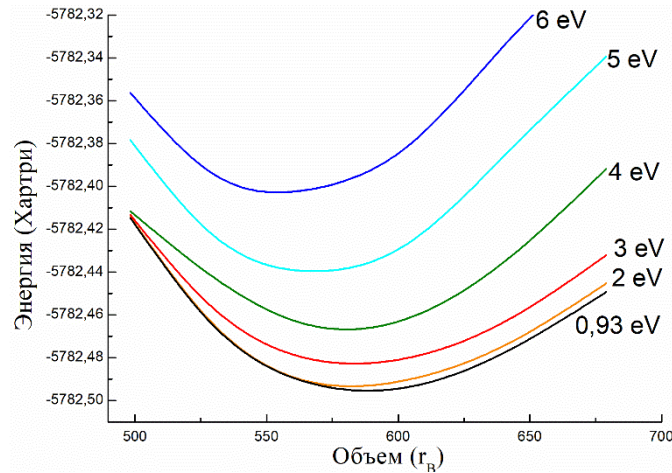


Рисунок 1 - Зависимость энергии от объема элементарной ячейки для разных параметров хаббардовского взаимодействия

Показано, что в основном состоянии MnSi возникают большие по амплитуде нулевые флуктуации, которые в точке T_C скачкообразно исчезают, приводя к наблюдаемым на эксперименте аномалиям. Расчет радиуса корреляции показал, что в точке T_C он имеет значение равное периоду спирали, а затем монотонно убывает. Несмотря на резкое уменьшение радиуса спиновых корреляций с ростом температуры, ближний геликоидальный спиновый порядок сохраняется вплоть до температуры T_S .

Для теплоемкости при постоянном объеме, показано, что аномальный максимум при температуре T_C (рисунок 2 б) связан со скачком термодинамической энтропии (вставка к рисунку 2 б) вследствие скачкообразного исчезновения нулевых квантовых

флуктуаций. При этом в интервале температур от T_C до T_S на $C_V(T)$ формируется «плечо», описывающее область флуктуаций спиновой спирали.

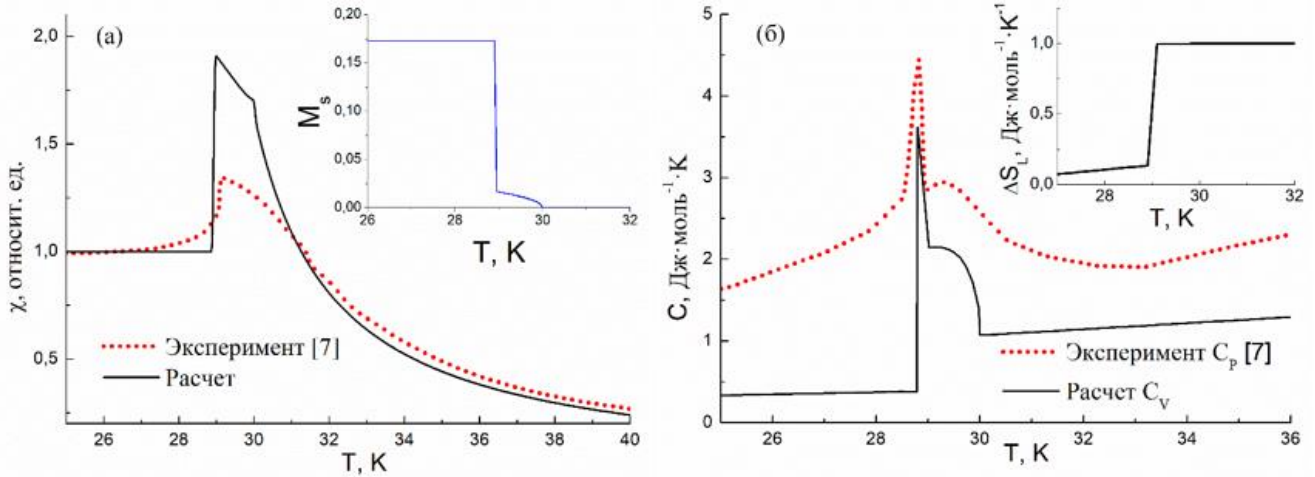


Рисунок 2 – Температурная зависимость магнитной восприимчивости (а) и теплоемкости (б) MnSi. На вставке: (а) локальная намагниченность; (б) изменение энтропии

В **третьей главе** проведено обобщение развиваемой теории на случай неупорядоченных сплавов (на примере $Fe_{1-x}Co_xSi$). Поправка, в исходном гамильтониане, учитывающая флуктуации электронной плотности, обусловленные межэлектронными корреляциями и различием параметров хаббардовского взаимодействия на узлах занятых атомами кобальта или железа:

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{H}_U = & (U_{Fe} - U_{Co}) \sum_v \delta p_v \left[\sum_\sigma \sigma \langle n_\sigma \rangle_0 \delta S_v^{(z)} - \sum_\sigma \langle n_\sigma \rangle_0 \delta n_v / 2 \right] - \\ & - \sum_v (U_{Fe} (1 - p_v) + U_{Co} p_v) \left[(\delta S_v^{(z)})^2 - (\delta n_v)^2 / 4 \right] \end{aligned} \quad (10)$$

$\delta p_v = p_v - p$, p – концентрация атомов кобальта, p_v – проекционный оператор, который может принимать значения 0 на узле занятом железом и 1 если узел занят кобальтом. Эффективный гамильтониан рассматриваемой системы выглядит следующим образом:

$$\tilde{\mathcal{H}} = 2 \sum_q \mathbf{S}_q \zeta_{-q} + i \sum_q n_q \rho_{-q} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \zeta_{-q} &= (c \xi_{-q} - (U_{Co} - U_{Fe}) \sum_v \delta p_v \sum_\sigma \sigma \mathbf{e}_v \langle n_\sigma \rangle_0 e^{iqv} / 4), \\ \rho_{-q} &= (c \eta_{-q} - (U_{Co} - U_{Fe}) \sum_v \delta p_v \sum_\sigma \langle n_\sigma \rangle_0 e^{iqv} / 4), \end{aligned}$$

\mathbf{S}_q – Фурье-образы оператора вектора \mathbf{S}_v , $c = (UT)^{1/2}$, $q = (\mathbf{q}, \omega_{2n})$, ω_{2n} – мацубаровская Бозе частота.

Для описания геликоидального ферромагнитного упорядочения в сплаве необходимо произвести замену, как это было сделано ранее (4). Уравнение магнитного состояния в случае квазибинарного сплава будет иметь ту же форму, что и

в случае MnSi. При этом хундовское взаимодействие не учитывается, и необходимо произвести замены: $U \rightarrow \langle U \rangle_p$, $\langle U \rangle_p = (1-p)U_{Fe} + pU_{Co}$ $m \rightarrow \langle m \rangle_p$). Тогда, согласно уравнению магнитного состояния, амплитуда спиновых флуктуаций для случая неупорядоченного сплава приближенно может быть представлена в виде:

$$\langle m^2 \rangle_p = (3/4)B(T/\langle U \rangle_p)^2 \left(\langle D^{-1} \rangle_p + 2\langle \kappa \rangle_p M_S^2 \right)^{-1} \left(\langle D^{-1} \rangle_p + 2\langle \kappa \rangle_p M_S^2 + A \right)^{-1} + \frac{(U_{Co} - U_{Fe})^2}{4\langle U \rangle_p^2} \sum_{\sigma} \sigma \langle n_{\sigma} \rangle_0 p(1-p) \quad (12)$$

Расчеты показывают, что в выражении амплитуды спиновых флуктуаций нулевыми флуктуациями можно пренебречь, зато появляется вклад от стохастических флуктуаций кулоновских потенциалов различных атомов d-металла.

Для численного анализа полученных выражений рассчитана плотность электронных состояний с использованием метода LDA+U+SO для сплавов Fe_{0.7}Co_{0.3}Si и Fe_{0.5}Co_{0.5}Si. Первопринципные расчеты показали, что уровень Ферми лежит в слабо вырожденной энергетической t₀-зоне с сильным хаббардовским взаимодействием.

В рамках полученной модели плотности электронных состояний представлены результаты расчета магнитной восприимчивости ($\chi(T)$) (рисунок 3). Температурный максимум χ при T_c отвечает условию $\kappa=0$. На вставке к рисунку приведена температурная зависимость амплитуды локальной намагниченности, которая до температуры перехода T_c убывает с ростом температуры. Учет различия потенциалов Fe и Co приводит к тому, что локальная намагниченность сохраняется выше T_c.

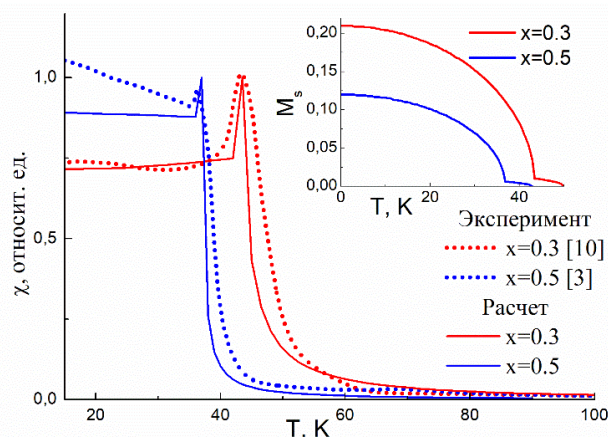


Рисунок 3 – Температурная зависимость магнитной восприимчивости сплавов Fe_{1-x}Co_xSi. На вставке: локальная намагниченность

Расчет энтропии и электронной теплоемкости не выявил никаких аномалий в магнитоупорядоченной области (рисунки 4а и 4б). Это объясняется тем, что спиновые флуктуации, связанные с флуктуациями кулоновских потенциалов железа и кобальта, не изменяются с температурой (вставки к рисункам 4а и 4б).

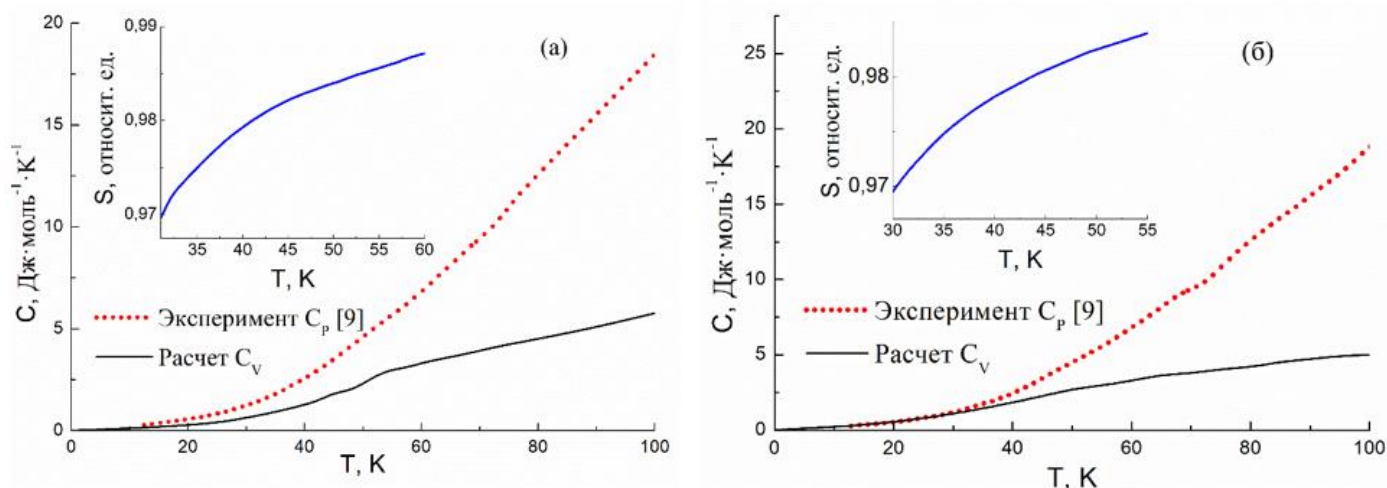


Рисунок 4 - Температурная зависимость теплоемкости (а) сплава $\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{Si}$, (б) сплава $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$. На вставке: температурная зависимость энтропии

В четвертой главе отмечается что для корректного описания экспериментальных данных необходимо выделить решеточную составляющую исследуемых свойств. Экспериментальные фоновые спектры [11] указывают на заметный ангармонизм как оптических, так и акустических фоновых мод. Поэтому, в диссертации используется самосогласованный подход, в котором термодинамический потенциал (ТДП) решетки записывается с учетом фоновангармонизма:

$$\Phi = \Phi_0 + \Phi_{ac} + \Phi_{opt}, \quad (13)$$

где $\Phi_0 = \Phi_0(P)$ – «постоянная» часть ТДП, не зависящая от температуры и являющаяся функцией давления, $\Phi_{ac} = \Phi_{ac}(\theta_{ac}, T)$ - часть ТДП, связанная с акустическими фононами, $\Phi_{opt} = \Phi_{opt}(\theta_{opt}, T)$ - часть ТДП, связанная с оптическими фононами, θ_{ac} – температура Дебая, θ_{opt} – температура Эйнштейна. Первые и вторые производные от ТДП дадут температурные зависимости молярного объема, модуля всестороннего сжатия, теплового расширения, теплоемкости. Для оценки фоновангармонизма определялись параметры Грюнейзена, которые для произвольной термодинамической величины $f=f(T, V)$ при постоянной температуре определяются соотношениями:

$$\gamma_f = -\frac{V}{f} \left(\frac{\partial f}{\partial V} \right)_T; \quad \gamma_f^* = \frac{V^2}{f} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial V^2} \right)_T. \quad (14)$$

Оценки ангармонизма как акустических, так и оптических фононов кристаллической решетки твердого тела, осуществлялись на основе термодинамического моделирования экспериментальных данных.

Далее показано наличие магнито-электронного вклада в тепловое расширение. С помощью модели соответственных состояний

$$g(\varepsilon) = (W/W_0)^{-1} g_0(\varepsilon),$$

рассматривается взаимосвязь ширины энергетической зоны с объемом кристалла. Согласно Хейне [12] относительная ширина зоны $(W/W_0) \sim (V/V_0)^{-n/3}$, где $n=5$ для d-электронов, V и V_0 - значения объемов кристалла, соответствующие W и W_0 .

Далее из условия минимума свободной энергии для относительного изменения объема, находим магнито-электронный вклад в относительное изменение объема

$$\omega = \omega_{0e} + \omega_M, \quad (15)$$

$$\omega_M = \frac{U}{KW} \Gamma_e \chi_{\perp} M^2 - \frac{U}{KW} \Gamma_e \langle M^2 \rangle D^{-1}, \quad (15 \text{ a})$$

$\Gamma_e = \partial \ln \varepsilon(k, V) / \partial \ln V$ - электронная константа Грюнайзена, а величина

$$\omega_{0e} = \frac{1}{KW} \Gamma_e \sum_{\alpha=\pm 1} \int g_{\alpha}(\varepsilon) (\varepsilon - \mu) f(\varepsilon - \mu) d\varepsilon. \quad (15 \text{ б})$$

Объемный коэффициент теплового расширения определяется соотношением

$$\beta = \partial \omega / \partial T = \beta_{el} + \beta_M, \quad (16)$$

и в соответствии с (17), содержит электронную и магнитную составляющие.

На рисунке 5 приведены результаты расчетов ОКТР в самосогласованной термодинамической модели Дебая–Эйнштейна для MnSi и Fe_{1-x}Co_xSi. Результаты моделирования с учетом только фононного ангармонизма, представленные на рисунке 5 не объясняют аномалии в области магнитного перехода.

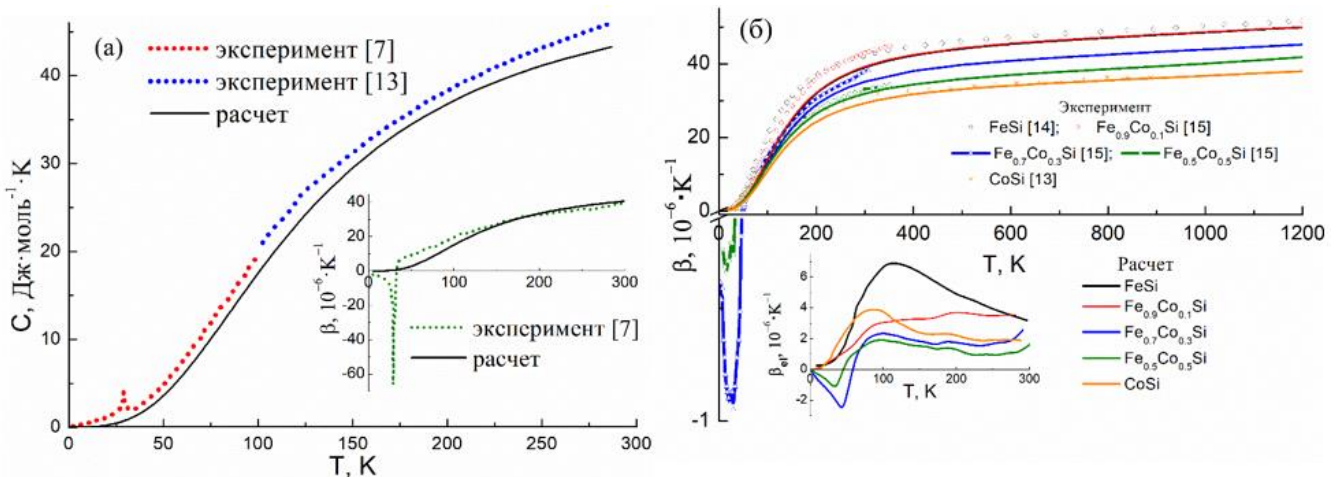


Рисунок 5 – Результаты самосогласованного термодинамического моделирования (а)

Теплоемкость MnSi. На вставке: температурная зависимость ОКТР MnSi. (б) ОКТР системы Fe_{1-x}Co_xSi. На вставке: результат оценки магнито-электронного вклада

Резкая аномалия на ОКТР MnSi обусловлена скачкообразным изменением объема, вследствие исчезновения нулевых флуктуаций. Как и на температурной

зависимости теплоемкости, на $\beta(T)$ наблюдается «плечо», которое соответствует области флуктуаций спиновой спирали (рисунок 6 а).

В сплавах $Fe_{1-x}Co_xSi$ величина ОКТР оказывается отрицательной при $T < T_S$ и меняет знак при переходе из геликоидальной области в парамагнитную, вследствие исчезновения модуля локальной намагниченности на узле (рисунок 6 б). Изменение знака коэффициента межмодовой связи в точке T_C приводит к формированию широкого минимума, обусловленного учетом различия потенциалов хаббардовского взаимодействия Fe и Co.

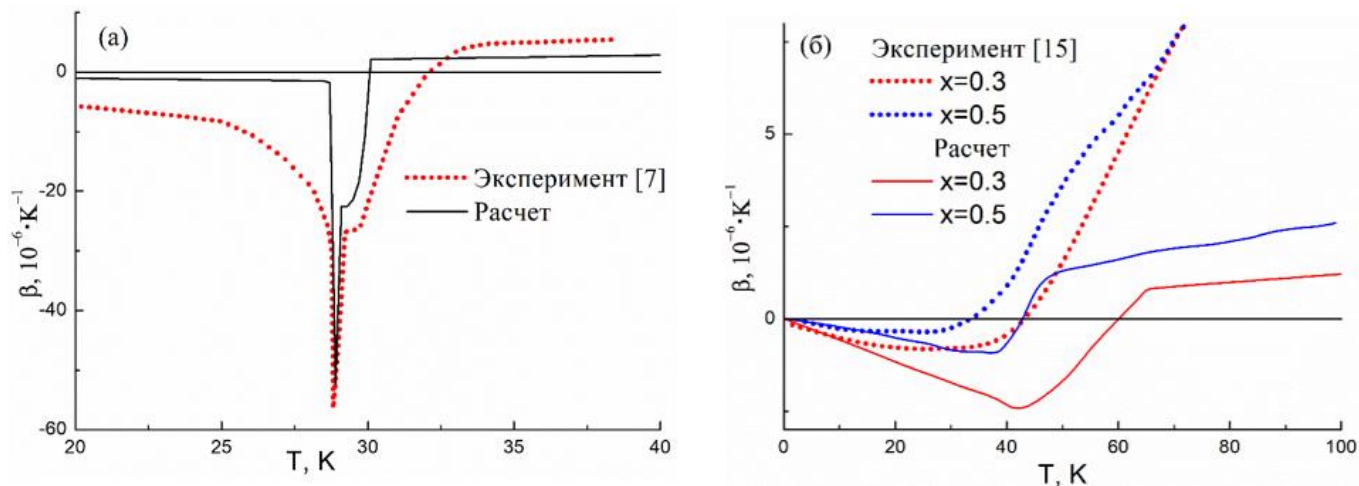


Рисунок 6 – Температурная зависимость ОКТР (а) MnSi, (б) сплавов $Fe_{1-x}Co_xSi$

Величина теплоемкости при постоянном давлении определяется через величину $C_V(T)$ и дополнительной поправки вследствие теплового расширения.

Для сплавов $Fe_{1-x}Co_xSi$ развиваемая спин-флуктуационная теория совместно с самосогласованным термодинамическим моделированием описывают экспериментально наблюдаемые зависимости теплового расширения и теплоемкости в рассматриваемом температурном интервале (рисунок 7).

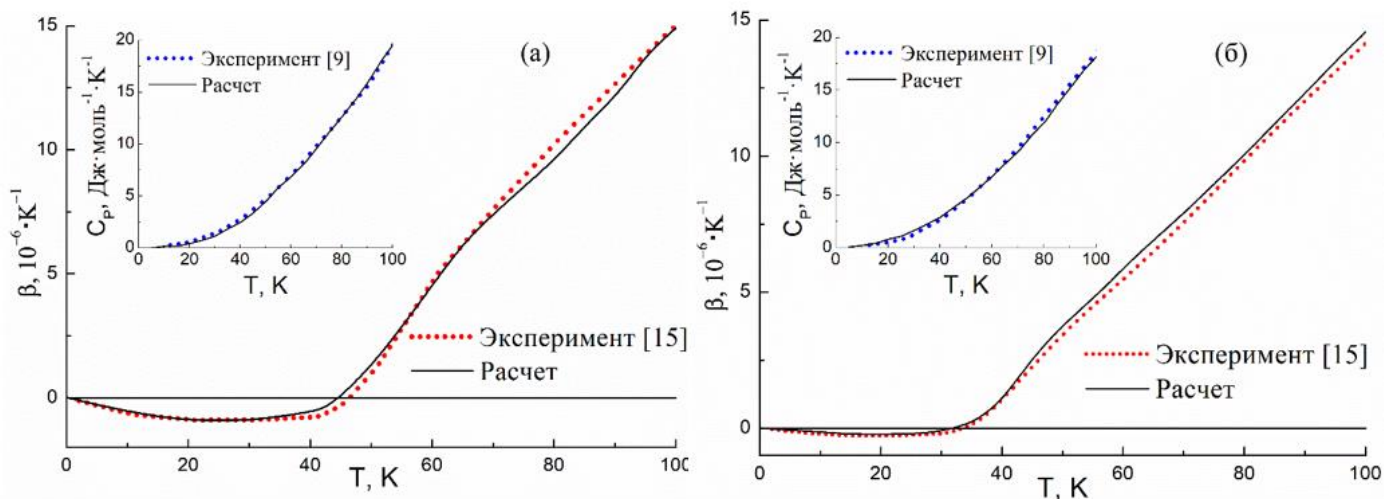
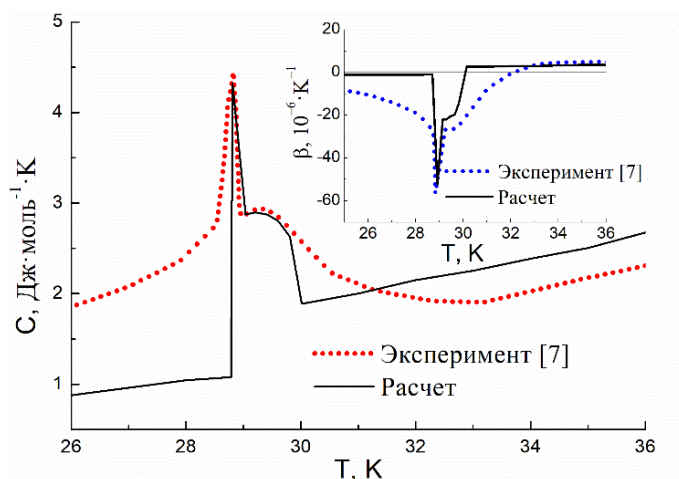


Рисунок 7 – Температурная зависимость ОКТР и теплоемкости (на вставке) сплавов

(а) $Fe_{0.7}Co_{0.3}Si$ и (б) $Fe_{0.5}Co_{0.5}Si$

Для моносилицида марганца (рисунок 8) количественное согласие с экспериментом удается достичь лишь в области магнитного фазового перехода



($T_C < T < T_S$).

Рисунок 8 – Температурная зависимость теплоемкости и ОКТР (на вставке) MnSi.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ РАБОТЫ

В диссертационной работе развивались спин-флуктуационные представления о сильно коррелированных системах с нецентросимметричной кристаллической структурой. Особенностью магнитных фазовых переходов в этих системах является взаимодействие мод спиновых флуктуаций. Исследования электронной структуры показали, что причиной смены знака параметра межмодового взаимодействия вблизи температур магнитных фазовых переходов является энергетическое расположение уровня Ферми вблизи локального минимума на максимуме плотности электронных состояний. Выбранные в качестве объектов исследования моносилицид марганца и сплавы $Fe_{1-x}Co_xSi$ отражают качественно разные ситуации, когда в зависимости от положения уровня Ферми в области электронных состояний с сильным (или слабым) вырождением наряду с хаббардовскими, возникают сильные (или слабые) хундовские взаимодействия. При этом сильные хундовское и хаббардовское взаимодействия усиливают нулевые спиновые флуктуации. На основе развитых представлений был проведен анализ экспериментальных данных об аномалиях магнитных, тепловых и электронных свойств сильно коррелированных систем MnSi и $Fe_{1-x}Co_xSi$, которые в настоящее время интенсивно исследуются экспериментаторами. Среди конкретных результатов работы целесообразно выделить следующие:

1. На основе развитой спин-флуктуационной теории сильно коррелированных соединений с ДМ-взаимодействием получена система уравнений, позволяющая

вычислять температурные зависимости амплитуды спиновых флуктуаций и локальной намагниченности.

2. Проведено обобщение развиваемой теории спиновых флуктуаций на случай квазибинарных сплавов, для которых необходим учет различия кулоновских потенциалов на узлах, занятых разными атомами 3d-металлов.

3. На основе проведенных прямых вычислений электронной структуры в методе LDA+U+SO, рассчитаны и сопоставлены с экспериментом температурные зависимости магнитной восприимчивости, теплоемкости и теплового расширения. В процессе согласования теоретических результатов с экспериментальными уточнены значения параметров межэлектронных взаимодействий для MnSi и сплавов $Fe_{1-x}Co_xSi$.

4. Согласно полученным уравнениям магнитного состояния в области фазового перехода возникают флуктуации спиновой спирали, и в интервале $T_C < T < T_S$ реализуется область геликоидального ближнего порядка. При $T > T_S$ локальная намагниченность исчезает и происходит переход в парамагнитное состояние.

5. Параметр межмодового взаимодействия спиновых флуктуаций зависит от особенностей электронной структуры и меняет знак при фазовом переходе в MnSi и сплавах $Fe_{1-x}Co_xSi$. При этом в согласии с экспериментальными данными возникает температурный максимум магнитной восприимчивости.

6. Расчеты радиуса спиновых корреляций показали, что в точке T_C он равен периоду геликоидальной спирали и убывает с температурой. В случае MnSi радиус спиновых корреляций, в согласии с экспериментом, сохраняет ненулевое значение 0.7λ при переходе в парамагнитное состояние (T_S).

7. Показано, что температурное изменение среднеквадратической амплитуды локальных магнитных моментов приводит к температурному изменению равновесного объема, в результате чего возникает магнито-электронный вклад в тепловое расширение рассматриваемых сильно коррелированных киральных магнетиках.

8. В основном состоянии MnSi возникают большие по величине нулевые флуктуации спиновой плотности, амплитуда которых резко уменьшается вблизи точки фазового перехода, что приводит к наблюдаемым на эксперименте резким аномалиям на температурных зависимостях теплоемкости и теплового расширения. При этом, поскольку локальная намагниченность на узле при температуре T_C , не исчезает, на температурных зависимостях теплоемкости и ОКТР формируется «плечо».

9. В основном состоянии сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ нулевыми флуктуациями можно пренебречь, по сравнению с флуктуациями кулоновских потенциалов Fe и Co на узлах. Это приводит к сильному размытию температурного минимума отрицательного ОКТР, обусловленного сменой знака коэффициента межмодовой связи.

10. Для нецентросимметричных кристаллов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ показано, что отсутствие инварной аномалии в сплаве с содержанием кобальта 10% коррелирует с изменением структурной (и магнитной) киральности, существенно отличающейся от киральности сплавов $\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{Si}$ и $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$. Изменение атомной киральности коррелирует с увеличением решеточного ангармонизма (параметров Грюнайзена).

11. Термодинамическое моделирование в модели Дебая-Эйнштейна позволило оценить фононные составляющие тепловых свойств, как для MnSi , так и для сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, в частности определить теплоемкость при постоянном давлении. Развитые самосогласованный термодинамический подход и спин-флуктуационная теория, основанная на первопринципных расчетах электронной структуры, позволяет количественно описать экспериментально наблюдаемые зависимости теплового расширения и теплоемкости в достаточно широком температурном интервале.

Смена знака параметра межмодового взаимодействия в термодинамическом потенциале, указывает на то, что фазовый переход является переходом первого рода как в MnSi , так и в сплавах $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$. Однако, в моносилициде марганца из-за скачка амплитуды нулевых флуктуаций переход близок к квантовому фазовому переходу.

Перспектива дальнейшей разработки темы. Развитый в рамках диссертационного исследования подход, основанный на сочетании анализа экспериментальных данных в рамках спин-флуктуационной теории и, прямых расчетов электронной структуры будет использован для изучения скирмионных фаз в MnSi , $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, $\text{Fe}_{1-y}\text{Mn}_y\text{Si}$ и др. Этот подход также может представлять интерес для исследования спинового транспорта в планарных магнетиках с ДМ-взаимодействием.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bak, P. Theory of helical magnetic structures and phase transitions in MnSi and FeGe / P. Bak, M.H. Jensen // J. Phys. C: Solid St. Phys. – 1980. – V. 13. – P. L881- L885.

2. Janoschek, M. Fluctuation-induced first-order phase transition in Dzyaloshinskii-Moriya helimagnets / M. Janoschek, M. Garst, A. Bauer, P. Krautscheid, R. Georgii, P. Boni, C. Pfleiderer // Phys. Rev. B. – 2013. – V. 87. – P. 134407 1-16.

3. Bauer, A. History dependence of the magnetic properties of single-crystal $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ / A. Bauer, M. Garst, C. Pfleiderer // *Phys. Rev. B.* – 2016. – V. 93. – P. 235144 1-13.
4. Brazovskii, S. A. Phase transition of an isotropic system to a nonuniform state / S. A. Brazovskii // *Sov. Phys. JETP.* – 1975. – V. 41. – P. 85-89.
5. Shanavas, K. V. Electronic structure and the origin of the Dzyaloshinskii-Moriya interaction in MnSi / K. V. Shanavas, S. Satpathy // *Phys. Rev. B.* – 2016. – V. 93. – P. 195101 1-8.
6. Collyer, R.D. Correlation and the magnetic moment of MnSi / R.D. Collyer, D.A. Browne // *Physica B.* – 2008. – V. 405. – P. 1420-1422.
7. Stishov, S.M. Magnetic phase transition in the itinerant helimagnet MnSi: Thermodynamic and transport properties / S.M. Stishov, A.E. Petrova, S. Khasanov, G.Kh. Panova, A.A. Shikov, J.C. Lashley, D. Wu, T.A. Lograsso // *Phys. Rev. B.* – 2007. – V. 76. – P. 052405 1-4.
8. Grigoriev, S.V. Crossover behavior of critical helix fluctuations in MnSi / S.V. Grigoriev, S.V. Maleyev, E.V. Moskvina, V. A. Dyadkin, P. Fouquet, H. Eckerlebe // *Phys. Rev. B.* – 2010. – V. 81. – P. 144413 1-9.
9. Geld, P.V. Itinerant magnetism of $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ solid-solutions / P.V. Geld, A.A. Povzner, S.V. Kortov, V.N. Safonov // *Docl. Akad. Nauk SSSR.* – 1986. – V. 289. – P. 351-354.
10. Ou-Yang, T. Y. Dynamic susceptibility study on the skyrmion phase stability of $\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{Si}$ / T. Y. Ou-Yang, G. J. Shu, C. D. Hu, F. C. Chou // *Journal of applied physics.* – 2015. – V. 117. – P. 123903 1-5.
11. Delaire, O. Phonon softening and metallization of a narrow-gap semiconductor by thermal disorder / O. Delaire, K. Marty, M. B. Stone, P. R. C. Kent, M. S. Lucas, D. L. Abernathy, D. Mandrus, B. C. Sales // *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* – 2011. – V. 108. – P. 4725-4730.
12. Heine, V. s– d Interaction in Transition Metals / V. Heine // *Phys. Rev.* – 1967. – V. 153. – P. 673-682.
13. Гельд, П.В. Силициды переходных металлов четвертого периода / П. В. Гельд, Ф. А. Сидоренко. – М.: Металлургия, 1973. – 584 с.

14. Vočadlo, L. Thermal expansion and crystal structure of FeSi between 4 and 1173 K determined by time-of-flight neutron powder diffraction / L. Vočadlo, K. S. Knight, G. D. Price, I. G. Wood // *Phys. Chem. Miner.* – 2002. – V. 29. – P. 132-139.

15. Гельд, П.В. Тепловое расширение и слабый зонный магнетизм твердых растворов $Fe_{1-y}Mn_ySi$ и $Fe_{1-x}Co_xSi$ / П.В. Гельд, А.А. Повзнер, С.В. Кортов, Р.П. Кренцис // *ДАН СССР.* – 1987. – Т. 297. – С. 1359-1363.

Список публикаций по теме диссертационной работы

Статьи в рецензируемых научных журналах, определенных ВАК:

1. Повзнер, А.А. Решеточный ангармонизм и тепловые свойства сильно коррелированных сплавов $Fe_{1-x}Co_xSi$ / А.А. Повзнер, **Т.А. Ноговицына**, А.Н. Филанович // *Физика твердого тела.* – 2015. – Т. 57. – В. 10. – С. 1883-1887 (0,31 п.л. / 0,1 п.л).

2. Повзнер, А.А. Термодинамическое моделирование упругих и тепловых свойств моносилцида кобальта / А.А. Повзнер, А.Н. Филанович, **Т.А. Ноговицына** // *Журнал технической физики.* – 2016. – Т. 86. – В. 6. – С. 71-74 (0,25 п.л. / 0,08 п.л).

3. Повзнер, А.А. Аномальное влияние спиновых флуктуаций на теплоемкость и энтропию в геликоидальном сильно коррелированном ферромагнетике MnSi / А.А. Повзнер, А.Г. Волков, **Т.А. Ноговицына** // *Физика твердого тела.* – 2017. – Т. 59. – В. 2. – С. – 211-216 (0,375 п.л. / 0,125 п.л).

4. Повзнер, А.А. Электронная структура и магнитный фазовый переход в MnSi / А.А. Повзнер, А.Г. Волков, **Т.А. Ноговицына** // *Физика твердого тела.* – 2017. – Т. 59. – В. 7. – С. – 1261-1266 (0,375 п.л. / 0,125 п.л).

5. Povzner, A. A. Phonon Anharmonicity and Thermodynamic Properties of Strongly Correlated Iron Monosilicide / A. A. Povzner, A. N. Filanovich, **T. A. Nogovitsyna** // *Solid State Phenomena.* – 2017. – V. 257. – P. 203-210 (0,5 п.л. / 0,16 п.л).

6. Povzner, A. A. Numerical simulation of the lattice properties of $Fe_{1-x}Co_xSi$ – strongly correlated electron systems / А.А. Povzner, А.Н. Filanovich, **Т.А. Nogovitsyna** // *Phys. Status Solidi B.* – 2017. – V. 254. – No. 9. – P. 1700034 1-8 (0,5 п.л. / 0,16 п.л).

7. Повзнер, А.А. Аномальная электронная теплоемкость сильно коррелированного FeSi / А.А. Повзнер, А.Г. Волков, **Т.А. Ноговицына** // *Известия высших учебных заведений. Физика.* – 2017. – Т. 60. – В. 12. – С. 71-75 (0,31 п.л. / 0,1 п.л).

8. Повзнер, А.А. Электронная структура и магнитный фазовый переход в геликоидальных ферромагнетиках $Fe_{1-x}Co_xSi$ / А.А. Повзнер, А.Г. Волков, **Т.А. Ноговицына** // Физика твердого тела. – 2018. – Т. 60. – В. 2. – С. – 227-233 (0,44 п.л. / 0,14 п.л).

9. Povzner, A. A. Electronic structure and quantum spin fluctuations at the magnetic phase transition in MnSi / А.А. Povzner, А.Г. Volkov, **Т.А. Nogovitsyna** // Physica B: Condensed Matter. – 2018. – V. 536. – P. 408-412 (0,31 п.л. / 0,1 п.л).

Другие публикации:

10. Filanovich, A.N. Phonon anharmonicity and thermodynamic properties of strongly correlated iron monosilicide / А.Н. Filanovich, А.А. Povzner, **Т.А. Nogovitsyna** // Abstract book of the international conference “20th international conference on solid compounds of transition elements”: April 2016. – Spain, 2016. – P. 30 (0,06 п.л. / 0,02 п.л).

11. **Ноговицына, Т.А.** Влияние фононного ангармонизма на тепловые свойства $Fe_{1-x}Co_xSi$ / **Т.А. Ноговицына**, А.А. Повзнер, А.Н. Филанович // Сборник тезисов Первого Российского кристаллографического конгресса: ноябрь, 2016 г. – Москва, 2016. – С. 97 (0,06 п.л. / 0,02 п.л).

12. Povzner, A.A. Spin fluctuations of the electron density and features of the magnetic phase transition in MnSi / А.А. Povzner, А. G. Volkov, **Т. А. Nogovitsyna** // Quantum Criticality & Novel Phases 2017: Abstract book: February - March, 2017. – Germany, 2017. – P. TP 35 (0,06 п.л. / 0,02 п.л).

13. Povzner, A.A. Electronic structure and quantum spin fluctuation at the magnetic phase transition in MnSi / А.А. Povzner, А. G. Volkov, **Т. А. Nogovitsyna** // The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, SCES 2017: Abstract book: July, 2017. – Czech Republic, 2017. – P. We-4-41 (0,06 п.л. / 0,02 п.л).

14. **Ноговицына, Т.А.** Спиновый ближний порядок и киральные флуктуации в MnSi / **Т.А. Ноговицына**, А.А. Повзнер, А.Г. Волков // Доклады V Конференции по малоугловому рассеянию нейтронов "МУРомец 2017": сентябрь, 2017. – Гатчина, 2017. – С. 25 (0,06 п.л. / 0,02 п.л).

15. Povzner, A.A. Magnetic phase transition in MnSi based on the first principle calculations of electronic structure and spin fluctuation theory / А.А. Povzner, **Т.А. Nogovitsyna**, А.Г. Volkov, Т.М. Nuretdinov // The 21st International Conference on Solid Compounds of Transition Elements: Abstract book: March, 2018. – Austria, 2018. – P. 31 (0,06 п.л. / 0,015 п.л).