




**НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»**

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
«Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»
(НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ)**

мкр. Орлова роша, д. 1, г. Гатчина, Ленинградская область, 188300
Телефон: (81371) 4-60-25, факс: (81371) 3-60-25. E-mail: dir@pnpi.nrcki.ru
ОКПО 02698654, ОГРН 1034701242443, ИНН 4705001850, КПП 470501001

УТВЕРЖДАЮ

№ 12 Заместитель директора по научной работе
НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
«10» ноября 2018 г.  д.ф.-м.н. **В.В. Воронин**



ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» на диссертацию **НОГОВИЦЫНОЙ Татьяны Андреевны «Электронная структура и фазовые переходы в геликоидальных ферромагнетиках $MnSi$ и $Fe_{1-x}Co_xSi$ с нецентросимметричной кристаллической решеткой**», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Актуальность темы диссертационного исследования.

Диссертационная работа Ноговицыной Т.А. посвящена развитию теоретических методов описания экспериментально наблюдаемых магнитных и тепловых свойств моносилицида марганца и сплавов $Fe_{1-x}Co_xSi$. Рассматриваемые системы являются перспективными материалами для спинтроники, поскольку в них были обнаружены топологически стабильные структуры – скирмионные решетки, представляющие большой интерес не только для фундаментальной физики конденсированного состояния, но и ввиду своего инновационного

потенциала. Фазовые диаграммы показывают, что область скирмионных состояний, или А-фаза, находится в непосредственной близости к магнитному фазовому переходу, но несмотря на интенсивные исследования на протяжении очень длительного времени, до сих пор нет четкой картины магнитного фазового перехода.

Первопринципные расчеты электронной структуры для MnSi , $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ описывают возникновение в непосредственной энергетической окрестности химического потенциала разделенных энергетической щелью d-подзон, и в связи с этим их можно рассматривать как два альтернативных случая: в MnSi химический потенциал расположен в нижней энергетической зоне, а в сплавах $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ – в верхней. Однако в первопринципных расчетах до сих пор открытым остается вопрос о параметрах межэлектронных взаимодействий и, следовательно, о кулоновских корреляциях в исследуемых системах. Последнее затрудняет развитие спин-флуктуационной теории фазовых переходов.

Таким образом актуальным представляется развитие спин-флуктуационной теории, основанной на результатах первопринципных расчетов, которая бы с одной стороны описывала экспериментальные данные о фазовых магнитных и квантовых переходах, в киральных магнетиках, а с другой стороны уточняла бы представления об их электронной структуре.

Структура и объем диссертации.

Диссертационная работа Ноговицыной Т.А. 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 наименований. В конце каждой главы сформулированы выводы. Содержание диссертации изложено ясно, грамотно и последовательно, выводы логичны.

Во введении обоснована актуальность темы диссертационного исследования, сформулированы цель и задачи работы, научная новизна, а также теоретическая и практическая значимость, приведены методы исследования и положения, выносимые на защиту, указаны личный вклад автора, степень достоверности, апробация результатов и структура работы.

В первой главе проводится обзор особенностей электронных, магнитных и тепловых свойств, сильно коррелированных моносилицидов 3d-переходных металлов и сплавов на их основе. Рассмотрены предложенные ранее спин-флуктуационные теории для описания геликоидального ферромагнетизма, а также аномалии, возникающие при магнитном фазовом переходе в MnSi и

сплавах $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$. Указано на проблемы, возникающие при описании магнитного фазового перехода в рассматриваемых системах. В конце главы предложена самосогласованная схема, объединяющая в себе первопринципные расчеты электронной структуры, спин-флуктуационную теорию и самосогласованное термодинамическое моделирование. Можно утверждать, что в первой главе хорошо раскрыта актуальность темы представленной работы и из этой главы вытекает четкая постановка задачи диссертационного исследования.

Вторая и третья главы посвящены развитию спин-флуктуационного подхода, для описания фазовых переходов в MnSi и сплавах $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$. Показано, что рассматриваемые системы отличаются положением уровня Ферми на плотности электронных состояний, что обуславливает различие в поведении магнитных и тепловых свойств. В MnSi необходимо учитывать большие по амплитуде нулевые спиновые флуктуации, а также сильное хундовское взаимодействие, возникающее в нижней энергетической зоне. В сплавах $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ нулевые флуктуации пренебрежимо малы, однако необходим учет флуктуаций, возникающих из-за различия кулоновских потенциалов железа и кобальта на узлах. В рамках данной теории, на основе рассчитанной плотности электронных состояний, получены уравнения для определения температурных зависимостей магнитной восприимчивости, амплитуд спиновых флуктуаций, локальной намагниченности, теплоемкости и объемного коэффициента теплового расширения. Результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными.

Четвертая глава посвящена описанию решеточного ангармонизма и магнитно-объемных эффектов в тепловом расширении в MnSi и сплавах $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$. Развита самосогласованная термодинамическая модель, учитывающая ангармонизм как акустических, так и оптических фононных мод в широком диапазоне температур. В рамках модели соответственных состояний, проведен расчет магнито-электронного вклада в тепловое расширение, а также теплоемкости при постоянном давлении. Получено, что совместно самосогласованная термодинамическая модель и спин-флуктуационная теория описывают наблюдаемые при фазовом переходе аномалии теплоемкости и теплового расширения MnSi и сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$.

В заключении приводятся обоснованные выводы по всем результатам работы, также показана перспектива дальнейшей разработки темы.

Научная новизна представленной Ноговицыной Т.А. диссертационной работы не вызывает сомнений. В качестве наиболее важных новых результатов можно указать следующие:

1. Предложена спин-флуктуационная теория, учитывающая результаты проведенных диссертантом первопринципных расчетов электронной структуры. В рамках развитой модели получены выражения, позволяющие выполнять самосогласованные расчеты плотности электронных состояний, магнитной восприимчивости, электронной теплоемкости, теплового расширения и радиуса спиновых корреляций.

2. Показана важная роль учета взаимодействия между спиновыми флуктуациями при магнитном фазовом переходе, что приводит к смене знака параметра межмодового взаимодействия, обуславливая температурный максимум магнитной восприимчивости.

3. Впервые с теоретической точки зрения дано объяснение наблюдаемым на эксперименте лямбда-подобным аномалиям теплоемкости и теплового расширения $MnSi$. Показано, что они возникают вследствие скачкообразного исчезновения нулевых спиновых флуктуаций при фазовом переходе. Также впервые получено, что «плечо» на зависимостях теплоемкости и теплового расширения от температуры является проявлением области флуктуаций спиновой спирали, вследствие сохранения локальной намагниченности выше точки T_c .

4. Показано, что для сплавов $Fe_{1-x}Co_xSi$ необходим учет флуктуаций, возникающих из-за различия кулоновских потенциалов железа и кобальта на узлах.

Эти флуктуации обуславливают значительный геликоидальный ближний порядок выше температуры магнитного перехода.

Надежность и достоверность результатов диссертационного исследования обеспечены развитием апробированных теоретических методик, использованием стандартных современных программных пакетов и согласием с экспериментальными работами. Основные результаты диссертации опубликованы в научных журналах, индексируемых в базах Web of Science и Scopus и доложены на крупных Международных и Российских конференциях.

Научная и практическая значимость результатов заключается в развитии теории спиновых флуктуаций для описания геликоидальных ферромагнетиков с обменным взаимодействием Дзялошинского – Мории, основываясь на знании электронной структуры конкретного соединения. Развитая феноменологическая

теория вносит значительный вклад в современные сведения о природе магнитных фазовых переходов в рассматриваемых сплавах, а также позволяет описать наблюдаемые экспериментальные данные. Данная теория в будущем может быть применима для широкого класса веществ, в которых отсутствует инверсионная симметрия.

Кроме того, исследуемые системы имеют важное практическое значение для будущего электроники и спинтроники. И знание о поведении систем при нормальных условиях позволит в будущем построить теории для описания влияния давления, внешнего магнитного поля на магнитные, электронные и тепловые свойства.

Заключение. В целом диссертационная работа Ноговицыной Т.А. содержит ряд новых теоретических положений и представляет собой законченное исследование на актуальную тему, выполненное на высоком научном уровне. Результаты работы могут быть использованы, в первую очередь, на предприятиях, специализирующихся на изучении систем со спиновой киральностью, со структурным типом B20, а также для создания новых функциональных материалов для различных отраслей промышленности.

Результаты работы могут быть рекомендованы для использования в МГУ (физический факультет), НИЯУ «МИФИ», НИЦ «Курчатовский институт», ИФМ УрО РАН, ИТФ УрО РАН и др. организациях. Автореферат с достаточной полнотой отражает основное содержание диссертационной работы.

Диссертационное исследование Ноговицыной Т.А. соответствует паспорту научной специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния. Соответствие работы указанной научной специальности следует из сопоставления целей, задач, методов и результатов диссертационного исследования с паспортом указанной научной специальности. Содержание диссертации соответствует следующим пунктам паспорта специальности: пункту 1 – Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы свойств металлов и их сплавов в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления; пункту 3 – Изучение экспериментального состояния конденсированных веществ (сильное сжатие, ударные воздействия, изменение гравитационных полей, низкие температуры), фазовых переходов в них и их фазовые диаграммы состояния; пункту 5 – Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения.

Диссертационная работа Ноговицыной Т.А. не лишена некоторых недостатков:

1. В работе можно найти некоторое количество опечаток, отсутствие запятых, там, где этого требуют правила пунктуации русского языка, или, наоборот их появление там, где они не нужны. Тем не менее, их совсем немного и они не мешают чтению.

2. В работе обсуждается инварный эффект в температурной зависимости объемного коэффициента теплового расширения для некоторых концентраций сплавов $Fe_{1-x}Co_xSi$. Интересно, что хотя автору и удается описать экспериментальные данные с помощью расчетов (Рис.4.11, Рис.4.12), тем не менее глубокого анализа природы инварного эффекта в магнитных системах не представлено. Было бы интересно сравнить эффект, наблюдаемый в $Fe_{1-x}Co_xSi$, с инварным эффектом в классических инварных $Fe_{1-x}Ni_x$ сплавах. Полагаю, что природа эффекта в обоих случаях одна и та же и связана она с объемной и спиновой нестабильностью атома Fe в сплавах.

3. В этой связи представляется сомнительным вывод 2 к главе 4 о том, что «отсутствие инварного эффекта в тепловом расширении $Fe_{0.9}Co_{0.1}Si$ и его наличие в $Fe_{0.7}Co_{0.3}Si$ и $Fe_{0.5}Co_{0.5}Si$ коррелирует с различной кристаллографической киральностью этих сплавов...» Как показано в работе [20] списка литературы, кристаллографическая киральность сплавов может быть, как левой, так и правой для любой концентрации элементов Fe и Co. Она не может повлиять на инварный эффект. Более реалистичной выглядит гипотеза о появлении инварного эффекта коррелирующего с величиной среднего магнитного момента сплавов $Fe_{1-x}Co_xSi$: то есть с ростом намагниченности сплавов при росте концентрации Co в области $x = 0.1 - 0.4$ и с уменьшением намагниченности в области $x = 0.4 - 0.8$. Однако, доказательство такой гипотезы требует новых теоретических и экспериментальных исследований.

Указанные недостатки не уменьшают достоверности и важности полученных результатов, выводов, и высокой оценки диссертации в целом. Результаты проведенных исследований опубликованы в 9 научных работах, в журналах перечня ВАК, и обсуждались на многих международных и всероссийских научных конференциях и семинарах. Также не вызывает сомнений и большой личный вклад соискателя.

Диссертация Ноговицыной Т.А. на тему «Электронная структура и фазовые переходы в геликоидальных ферромагнетиках $MnSi$ и $Fe_{1-x}Co_xSi$ с нецентросимметричной кристаллической решеткой» полностью отвечает

требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, а ее автор, Ноговицына Татьяна Андреевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Диссертация и отзыв на нее заслушаны на заседании отдела исследований конденсированного состояния и поддержаны на заседании проблемного совета по физике конденсированного состояния НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ от 25.10.2018.

И.о. заведующего отдела исследований конденсированного состояния,
НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ,

заместитель директора НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

по международной деятельности

д-р физ.-мат. наук



Григорьев Сергей Валентинович

Ученый секретарь НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

канд. физ.-мат. наук



Воробьев Сергей Иванович

Контакты ведущей организации:

ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова

Национального исследовательского центра «Курчатовский институт».

188300, Ленинградская область, г. Гатчина, мкр. Орлова роща, д. 1.

Тел.: +7 (81371) 460-25, E-mail: dir@pnpi.nrcki.ru.