

ОТЗЫВ
официального оппонента

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 ученой степени
кандидата физико-математических наук по специальности
01.04.07 - Физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Ноговицыной Т.А. посвящена теоретическому исследованию фазовых переходов, магнитной восприимчивости, теплоемкости и теплового расширения в геликоидальных ферромагнетиках $MnSi$ и $Fe_{1-x}Co_xSi$ с сильно коррелированными электронными подсистемами.

Актуальность работы. Силициды марганца, железа и кобальта представляют собой интересный класс материалов, относящихся к структурному типу B20, для которого характерно отсутствие центра инверсии. Такая симметрия приводит к антисимметричному релятивистскому обмену Дзялошинского–Мория (ДМ), что приводит к наблюдаемому в эксперименте геликоидальному ферромагнетизму. Основной особенностью этих соединений, не позволяющей описывать их свойства в рамках обычной модели ферми-жидкости, является сильная связь между электронами проводимости и локализованными 3d электронами, отвечающими за магнитные свойства. В таких материалах оптические, магнитные и транспортные свойства тесно связаны, что делает их весьма перспективными для использования в спинтронике. Например, в сплавах системы $Fe_{1-x}Co_xSi$ был обнаружен аномально большой эффект Холла.

В связи с этим развитие спин-флуктуационной теории, объясняющей особенности фазовых переходов геликоидальных ферромагнетиках $MnSi$ и $Fe_{1-x}Co_xSi$ в рамках диссертационного исследования Ноговицыной Т.А. представляется весьма актуальным и может обеспечить новую микроскопическую основу для понимания их свойств.

Общая характеристика работы. Диссертационная работа состоит из введения, в котором представлены положения, выносимые на защиту, четырех глав, заключения, в котором формулируются основные выводы, и списка литературы.

В первой главе обсуждаются особенности кристаллической структуры (отсутствие инверсионной симметрии, магнитная хиральность) и свойств силицидов переходных металлов. В разделе выполнен обзор существующих теоретических подходов к описанию электронных и магнитных свойств сильно коррелированных систем. Отмечено, что предложенные ранее теории не учитывали некоторые особенности зонной структуры, а также возможность межмодового взаимодействия спиновых флуктуаций в системах MnSi , $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$.

Вторая глава содержит большой объем выполненных аналитических и численных расчетов, с использованием спин-флуктуационной теории для описания фазового перехода в однокомпонентном геликоидальном ферромагнетике. В основе подхода лежит многоорбитальный (U-J) гамильтониан Хаббарда, учитывающий корреляции, связанные с хаббардовским (U) и хундовским (J) взаимодействиями, дополненный слагаемым, учитывающим внутриатомные спиновые и зарядовые корреляции. Данный многочастичный гамильтониан методом преобразования Стратоновича – Хаббарда сводится к эффективному одночастичному гамильтониану H_{eff} , который описывает одновременное движение свободных электронов во флуктуирующих зарядовых и обменных полях. Учет взаимодействия Дзялошинского-Мории, определяющего возникновение геликоидального магнитного порядка осуществляется путем включения в H_{eff} добавочного среднего поля Дзялошинского. Вычисления функциональных интегралов выполнены на основе метода перевала по величинам флуктуирующих полей. В результате получено уравнение магнитного состояния и выражение для однородной магнитной восприимчивости системы. Уравнение магнитного состояния дает два решения: первое описывает ферромагнитный геликоид с фиксированным вектором амплитуды геликоидальной структуры и соответствует модели Янсена-Бака, а второе решение для температур выше точки Кюри геликоида, но ниже некоторой критической температуры T_s , описывает

область флуктуаций спирали, где фаза φ меняется случайным образом. При этом показано, что в этой температурной области локальная намагниченность M_s сохраняет ненулевое значение. Получены выражения для температуры T_s и намагниченности M_s .

В третьей главе проведено обобщение развиваемой теории на случай неупорядоченных сплавов (на примере $Fe_{1-x}Co_xSi$). Расчеты показывают, что для этой системы нулевыми флуктуациями можно пренебречь, зато появляется вклад от стохастических флуктуаций кулоновских потенциалов различных атомов d-металла.

Четвёртая глава посвящена описанию объемного коэффициента теплового расширения (ОКТР) указанных систем. Отмечено наличие магнито-электронного вклада в тепловое расширение, рассматривается взаимосвязь ширины энергетической зоны с объемом кристалла. Показано, что указанная связь совместно с развитой спин-флуктуационной теорией вполне удовлетворительно описывают экспериментально наблюдаемые зависимости теплового расширения и теплоемкости в температурном интервале $T < T_s$.

Таким образом, основным результатом, полученным в диссертации, является развитая теория спиновых и зарядовых флуктуаций в сильно коррелированных системах с нецентросимметричной кристаллической структурой. Развитая теория показала, что особенностью магнитных фазовых переходов в указанных системах является взаимодействие мод спиновых флуктуаций.

Научная новизна. Следует отметить новые и наиболее важные в научном отношении результаты:

1. В рамках обобщенной модели Хаббарда развита спин-флуктуационная теория 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 $T_C < T_S$ локальная намагниченность исчезает и происходит переход в парамагнитное состояние.
5. Термодинамическое моделирование в модели Дебая-Эйнштейна позволило оценить фоновые составляющие теплоемкости и теплового расширения, как для MnSi, так и для сплавов Fe_{1-x}Co_xSi. Показано, что развитый подход позволяет количественно описать экспериментально наблюдаемые зависимости теплового расширения и теплоемкости в достаточно широком температурном интервале.

Достоверность и обоснованность результатов работы обеспечивается использованием современных теоретических моделей и компьютерных пакетов программ и ясным физическим смыслом установленных закономерностей. Полученные результаты согласуются с известными экспериментальными данными и теоретическими работами других исследователей, хотя во многом их расширяют. Результаты диссертации доложены на 6 всероссийских и международных конференциях.

Замечания к диссертационной работе:

- 1) В тексте диссертации практически отсутствует описание методики и параметров, определяющих точность первопринципных вычислений (размер суперячейки, число k-точек, параметры сходимости и т.п.). Отсутствует анализ реальной погрешности результатов моделирования.

- 2) Не совсем ясна роль проведенных автором первопринципных расчетов электронной структуры. Если их цель состояла в точном определении параметра кулоновского отталкивания U , то этой цели автор явно не достиг. Действительно, на стр. 55 отмечено, что параметр $U=0.93$ эВ выбирается из условия достижения наиболее устойчивого положения системы, т.е. по положению минимума полной энергии ячейки. Однако в случае системы MnSi рисунок 2.1 показывает, что все кривые со значениями U от 0,93 до 2 эВ практически совпадают, т.е. автор был волен выбирать любое значение из этого интервала. В случае же системы $Fe_{1-x}Co_xSi$ параметр U вообще выбирался в приближении виртуального кристалла по известным параметрам для чистых железа и кобальта (стр.79). Если же автора интересовали значения плотности состояний на уровне Ферми, то такие данные можно было взять из уже опубликованных расчетов, или, что еще логичнее было, извлечь из экспериментальных данных по низкотемпературной теплоемкости.
- 3) В связи с замечанием 2 возникает естественный вопрос о том, насколько устойчивы полученные в работе результаты по отношению к выбору параметра U ?
- 4) Много замечаний вызывает изложение результатов исследования. Складывается ощущение, что диссертация просто «сложена» из текстов отдельных опубликованных работ. В результате образовалось много повторов, например в п.2.1 главы 2 и п.3.1 главы 3. Довольно много стилистических ошибок и излишне категорических формулировок. К примеру, только на одной стр.36 сталкиваемся с примерами «профессионального сленга» - «экспериментальное значение постоянной Дзялошинского – Мории», - «расчетные параметры не удается согласовать с электронной структурой». На стр.37, после странного предложения –«Вводя дополнительную степень свободы – переменную спиновую амплитуду, которая учитывает странствующий характер магнитного момента в гелимагнетиках, таких как MnSi.» диссертантка делает далеко идущий вывод- «Вопрос о применимости модели Гейзенберга остается открытым». На странице 38 после обсуждения результатов работы [62], посвященной расчету электронной структуры $Fe_{1-x}Co_xSi$ методом LDA+DMFT, делается парадоксальный вывод, что в работе «нет данных о межэлектронных взаимодействиях».

Общие выводы по работе. Отмеченные недостатки не влияют на общую положительную оценку работы. В целом диссертационная работа Ноговициной Т.А. является научно-квалификационной работой, содержащей ряд новых результатов для актуальной научной и практической задачи о влиянии сильно коррелированной электронной системы геликоидальных ферромагнетиков MnSi

и $Fe_{1-x}Co_xSi$, в с сильно коррелированными электронными подсистемами на их магнитные и тепловые характеристики. Работа выполнена на высоком научном уровне с использованием современных теоретических моделей и методик компьютерного моделирования, автором получена новая научная и практически значимая информация по характеристикам этих перспективных систем. Полученные автором результаты по большей части сопровождались сопоставлением с имеющимися экспериментальными данными прямых экспериментов, что позволило подтвердить их достоверность. Все основные результаты диссертации опубликованы в высокорейтинговых журналах и доложены на международных конференциях. Автореферат достаточно полно и правильно отражает содержание и результаты диссертации.

Заключение. Диссертационная работа Ноговицыной Татьяны Андреевны на тему «Электронная структура и фазовые переходы в геликоидальных ферромагнетиках $MnSi$ и $Fe_{1-x}Co_xSi$ с нецентросимметричной кристаллической решеткой» соответствует требованиям пункта 9 Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а сама автор достойна присуждения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент
Мирзоев Александр Аминулаевич,
доктор физико-математических
наук, старший научный сотрудник,
главный научный сотрудник
кафедры компьютерного
моделирования и нанотехнологий
ФГАОУ ВО «Южно-Уральский
государственный университет
(национальный исследовательский
университет)»,
454080, г. Челябинск, пр. В.И.
Ленина, 76, Тел.: 8-312-65-47-13
E-mail: mirzoev@physics.susu.ac.ru

12.11.2018 г.

Мирзоев А.А.

Верно
Ведущий документовед
О.В. Гришина