

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертацию Ноговицыной Татьяны Андреевны «Электронная структура и фазовые переходы в геликоидальных ферромагнетиках MnSi и $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ с нецентросимметричной кристаллической решеткой», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из Введения, четырех Глав, Заключения и Списка литературы, изложена на 138 страницах текста, включает 53 рис. и 3 табл. Библиографический список содержит 98 наименований.

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

Глава 1 содержит литературный обзор магнитных свойств, фазовых переходов и электронной структуры нецентросимметричных сильно коррелированных моносилицидов переходных металлов (киральных магнетиков с кристаллической структурой $B20$), рассмотрены особенности магнитной восприимчивости, теплоемкости и теплового расширения в MnSi и $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$. Отмечена возможность возникновения скирмионных фаз в таких магнетиках.

В Главе 2 на примере геликоидального ферромагнетика MnSi рассмотрена электронная структура и спиновые флуктуации при магнитном фазовом переходе в сильно коррелированных соединениях с взаимодействием Дзялошинского–Мории (ДМ), сформулированы основные положения модели сильно коррелированной электронной системы с учетом флуктуаций спиновой плотности. Получено уравнение магнитного состояния и его решения, выписаны выражения для свободной энергии, электронной теплоемкости и

энтропии. Теоретический анализ дополнен рассмотрением экспериментальных данных о магнитном фазовом переходе в MnSi.

Глава 3 посвящена изучению электронной структуры и спиновых флуктуаций при магнитном фазовом переходе в сильно коррелированных сплавах с ДМ-взаимодействием (на примере геликоидальных ферромагнетиков $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$). Здесь построена модель сильно коррелированной электронной системы квазибинарного сплава, получено уравнение магнитного состояния с учетом различия кулоновских потенциалов атомов $3d$ -металлов, изучены магнитная восприимчивость и радиус спиновых корреляций, выписаны выражения для свободной энергии, электронной теплоемкости и энтропии. Теоретический анализ дополнен рассмотрением экспериментальных данных о магнитном фазовом переходе в семействе сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$.

В Главе 4 исследован решеточный ангармонизм и магнито-электронный вклад в тепловое расширение в сильно коррелированных киральных магнетиках MnSi и $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$. Базовые термодинамические свойства магнетиков и решеточный ангармонизм изучены в самосогласованной термодинамической модели Дебая – Эйнштейна, а магнито-электронный вклад в тепловое расширение рассмотрен в модели соответственных состояний Хейне. В этой же Главе представлены результаты термодинамического моделирования решеточных свойств MnSi сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, выделены магнито-электронные вклады в тепловое расширение и теплоемкость MnSi и $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$.

В конце каждой главы приведены краткие выводы. Общие выводы сформулированы в Заключение.

Актуальность темы диссертации. Исследование Ноговицыной Т.А. посвящено актуальной теме – развитию 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. Киральный объект – это объект, который отличается от

своего отражения в зеркале. Примерами таких объектов являются винтовые (геликоидальные) магнитные структуры; лево- и правовинтовые структуры как раз и различаются своей киральностью.

Хотя геликоидальные магнитные структуры хорошо известны и изучены (такие структуры присущи многим магнетикам на основе редкоземельных элементов), 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 – Мориа 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. Такие системы обладают спиновой и решеточной киральностью, и являются прототипами спинтронных материалов; в таких системах были обнаружены топологически стабильные структуры – скирмионные решетки. Последние могут представлять значительный научный и практический интерес в качестве энергоэффективных носителей информации или спинтронных логических элементов.

К типичным системам, в которых возможны эффекты спинтроники, относятся гетероструктуры ферромагнетик–парамагнетик или ферромагнетик–сверхпроводник. В таких гетероструктурах источником спин-поляризованных электронов (спин-инжектором) является проводящий ферромагнетик (проводник или полупроводник), обладающий в намагниченном состоянии спонтанной спиновой упорядоченностью носителей заряда. Спинтронные системы обладают весьма многообещающими применениями. В частности:

- твердотельный аккумулятор без химических реакций, который переводит электрическую энергию в постоянное магнитное поле и обратно;
- электронные компоненты (так называемая трековая память; спиновые транзисторы, представляющие собой слоистые структуры типа ферромагнетик-кремний-ферромагнетик-кремний с примесями; логические схемы, обладающие по сравнению с современными CMOS-схемами потенциально более высоким

быстродействием, более низким тепловыделением и не подверженные воздействию ионизирующих излучений), и др.

Исходя из сказанного, **актуальность исследований** в части изучения, теоретического обоснования и дальнейшего прогнозирования свойств материалов со спиновой киральностью **несомненна**. Несомненна также **научная и практическая значимость результатов**, полученных соискателем.

Ноговицыной Т.А. четко сформулирована **научная новизна** представленных в диссертационной работе результатов. Некоторые результаты получены впервые. В частности, диссертантом:

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

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

– 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.

Диссертант четко и грамотно сформулировал необходимые формальные характеристики диссертационной работы. В частности, отмечено, что **обоснованность и достоверность** научных положений, выводов и итоговых рекомендаций, сформулированных в диссертации, обеспечивается теоретико-

методологической обоснованностью, их внутренней непротиворечивостью, согласием с результатами существующих экспериментов и предыдущих теоретических работ. Диссертантом в достаточной степени проведена апробация работы; по материалам работы опубликовано 15 научных работ, в том числе 9 статей в реферируемых научных журналах, входящих в перечень ВАК РФ. Последнее уже само по себе является независимой внешней положительной экспертной оценкой научных результатов, полученных диссертантом в соавторстве.

Вместе с тем, по работе имеются довольно многочисленные замечания и недостатки, требующие обсуждения.

1°. Замечания общего характера.

– Отсутствует критический анализ использованных соискателем первичных экспериментальных данных (как магнитных (намагниченность, магнитная восприимчивость), так и термодинамических (теплоемкость, коэффициент теплового расширения, плотность, модули упругости)).

– Отсутствует критический анализ использованного программного обеспечения. Например, требуют подтверждения правильности расчеты электронной структуры с использованием программного пакета Elk. То же касается «улучшения» компьютерной программы, реализующей самосогласованную термодинамическую модель твердого тела учетом термодинамических добавок, основанных на модели Эйнштейна. Это улучшение, если оно имеет место, необходимо предъявить и обосновать.

– Не ясно, зачем потребовалось включать в термодинамический потенциал решетки магнетика явно избыточное «оптическое» слагаемое $\Phi_{\text{опт}}$, ибо температура Кюри, вблизи которой «работает» диссертант, значительно ниже температуры Дебая изучаемых объектов: $T_C \approx 29 \text{ K} \ll \theta_0 \approx 520 \text{ K}$ (для MnSi), и, следовательно, дебаевское приближение является вполне достаточным для самосогласованного описания решеточных свойств. Если, все же, автор настаивает на существенности «оптического» слагаемого $\Phi_{\text{опт}}$, это следовало обосновать количественно.

– Не ясно обозначение $C(T)$, использованное автором для теплоемкости (стр. 25 и далее); не ясно чем теплоемкость $C(T)$ отличается от также используемых в диссертации обозначений $C_V(T)$ и $C_P(T)$ для теплоемкости.

– Не ясно, почему обоснование использования самосогласованной процедуры описания магнитных фазовых переходов и моделирования магнитной структуры размещено в разделе 1.6 диссертации «Заключение и выводы по Главе 1» (стр. 40). Причем ссылки в тексте на соответствующие рис. 1.19, 1.20 отсутствуют.

– Выражение для решеточной части термодинамического потенциала Φ_{ac} выписано неверно ибо, скажем, соединение $MnSi$ содержит два атома на формульную единицу и, следовательно, правая часть выражения в соответствии с законом Дюлонга и Пти должна содержать множитель $6R$ (R – газовая постоянная), а не $3R$, как в диссертации (стр. 92).

– Не ясно, почему автор для пересчета теплоемкости при постоянном объеме C_V в теплоемкость при постоянном давлении C_P , не пользуется известным термодинамическим соотношением, а использует формулу с поправкой, неверной по размерности (стр. 100).

– Не ясно, на чем основано суждение автора о том, что наилучшее согласие с экспериментальными данными для $MnSi$ было получено именно при указанных на стр. 101 значениях 5-ти параметров модели, поскольку в диссертации не введено количественной меры согласия расчета с экспериментом. Кроме того, на стр. 96 автор отмечает, что для замыкания процедуры самосогласования в рамках самосогласованной термодинамической модели твердого тела необходимо указание 11-ти параметров.

– Не ясен смысл суждения автора о том, что «фононная составляющая не описывает наблюдаемую на эксперименте λ -подобную аномалию» для $MnSi$ (стр. 101). Фононный (решеточный) вклад в термодинамические свойства и не должен объяснять магнитную λ -аномалию свойств.

– Из расчетов соискателя неясно, существует ли и, если да, то каков по величине, зоммерфельдовский вклад свободных электронов в полную величину

теплоемкости и теплового расширения изученных объектов. Между тем, именно эта упрощенная модель учета электронных вкладов алгоритмически «встроена» в использованную диссертантом компьютерную программу самосогласованного расчета термодинамических свойств твердых тел.

Как бы то ни было, сумма решеточного вклада и вклада электронной подсистемы должна совпадать с величиной теплоемкости и теплового расширения в достаточной далекой парамагнитной области (выше области полного исчезновения магнитного порядка). Этого, однако, не видно ни для теплоемкости (рис. 4.1), ни для ОКТР $\beta(T)$ (рис. 4.2), ни для плотности $\rho(T)$ (рис. 4.3) соединения MnSi. Если же электронный вклад в термодинамические свойства MnSi быстро убывает с температурой в парамагнитной области, как это далее получено автором для соединений $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ (второй рис. 4.5), то это тем более должно приводить к улучшению описания теплоемкости и ОКТР соответствующими «решеточными» кривыми.

– Не ясно, наблюдается ли, как следует ожидать, на плотности $\rho(T)$ (или на обратной ей величине, молярном объеме $V(T) \sim 1/\rho(T)$) аномалия, связанная с магнитным упорядочением MnSi (рис. 4.3). На этом же рис. приведена температурная зависимость характеристической температуры Дебая $\theta(T)$, однако объяснение того, как именно была получена эта зависимость, отсутствует. Отсутствует и анализ температурных зависимостей упругих модулей MnSi, необходимых для расчета $\theta(T)$.

2°. Замечания редакционного характера.

– Латинские формульные буквы, как в тексте диссертации, так и в автореферате приведены как в прямом начертании, так и курсивом, что затрудняет восприятие текста и не соответствует общепринятым нормам: формульные латинские буквы даются курсивом.

– Аналогично, греческие формульные буквы, как в тексте диссертации, так и в автореферате приведены и в прямом начертании, и курсивом, что также не соответствует общепринятым нормам: греческие буквы даются прямым шрифтом.

– Ряд используемых аббревиатур не расшифровывается, как это принято при первом упоминании (например, LDA + U + SO, HBF approx. (рис. 1.7), ZFC, SDC и ROS (рис. 1.11) и др.).

– Автор использует в тексте диссертации как русско-, так и англоязычные обозначения для единиц физических величин: Дж моль⁻¹ К⁻¹ и J mol⁻¹ K⁻¹, кг м⁻³ и kg m⁻³, эВ и eV. Это недопустимо.

– В ряде случаев подписи к рис. «перетекают» на следующие страницы (рис. 4.5, 4.7, 4.8).

– В диссертации есть два рис. с номером 3.5 (на стр. 82 и 83). То же и с рис. 4.5 – на стр. 106 и на стр. 108.

– Не ясно, почему различается число основных публикаций с участием Ноговицыной Т.А. в диссертации (5 наим.) и автореферате (9 наим.)

– Не ясно, с какой целью в Списке литературы диссертант некоторые собственные работы, опубликованные на русском языке в русскоязычных журналах, цитирует как англоязычные (напр., [89, 91]). Так, работа: Повзнер А.А., Ноговицына Т.А., Филанович А.Н. Решеточный ангармонизм и тепловые свойства сильно коррелированных сплавов Fe_{1-x}Co_xSi // ФТТ. 2015. Т. 57. Вып. 10. С. 1883–1887, процитирована в диссертации как: [89]. Povzner, A. A. Lattice anharmonicity and thermal properties of strongly correlated Fe_{1-x}Co_xSi alloys / A. A. Povzner, T. A. Nogovitsyna, A. N. Filanovich // Physics of the Solid State. – 2015. – V. 57. – P. 1932–1936.

– В списке литературы диссертации во многих случаях не указаны номера журналов, содержащих процитированные работы, хотя ГОСТ (ГОСТ Р 7.0.5–2008) требует указания полной ссылки. К тому же, в некоторых случаях диссертант все-таки указывает полные ссылки, с номерами.

Автореферат верно отражает основное содержание диссертации, хотя и ему присущи многие из замечаний, высказанных по тексту диссертации.

Несмотря на многочисленность, приведенные замечания не влияют на общую положительную характеристику работы, а ставят своей целью указать

точки дальнейшего собственного научного роста диссертанта. В целом работа выполнена на достаточно высоком научном уровне.

Заключение. Содержание диссертации соответствует следующим пунктам Паспорта специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния: п. 1 – «Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы свойств металлов и их сплавов, неорганических и органических соединений, диэлектриков и в том числе материалов световодов как в твердом, так и в аморфном состоянии в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления»; п. 5 – «Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения».

Диссертация Ноговицыной Т. А. «Электронная структура и фазовые переходы в геликоидальных ферромагнетиках $MnSi$ и $Fe_{1-x}Co_xSi$ с нецентросимметричной кристаллической решеткой» является законченной научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи, имеющей значение для развития соответствующей отрасли знаний и отвечает требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Правительством Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842, а ее автор, Ноговицына Татьяна Андреевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Доктор физико-математических наук, доцент,
ФГБОУ ВО "Уральский государственный
педагогический университет", г. Екатеринбург,
заведующий кафедрой высшей математики
и методики обучения математике


Бодряков В.Ю.
« 17 » ноября 2018 г.

П/а: 620017, г. Екатеринбург, пр. Космонавтов, 26;
тел.: 8(343)371-29-10; e-mail: Bodryakov_VYu@el.ru
Бодряков Владимир Юрьевич

Подпись заверяется начальником управления кадров и печатью организации



Подпись Бодрякова В.Ю.
Инициалы Черепанова М.Ч.
(подпись, расшифровка)
Отдел ДОУ УрГПУ
19.11 2018 г.