

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.285.02,  
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
АВТОНОМНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО  
ОБРАЗОВАНИЯ «УРАЛЬСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ  
ПЕРВОГО ПРЕЗИДЕНТА РОССИИ Б.Н. ЕЛЬЦИНА», МИНИСТЕРСТВО  
НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ,  
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ  
КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 07.12.2018 г. № 15

О присуждении Ноговицыной Татьяне Андреевне, гражданство Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Электронная структура и фазовые переходы в геликоидальных ферромагнетиках  $MnSi$  и  $Fe_{1-x}Co_xSi$  с нецентросимметричной кристаллической решеткой» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния принята к защите 01 октября 2018 (протокол заседания № 13) диссертационным советом Д 212.285.02, созданным на базе ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Минобрнауки России, 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19; созданным приказом Минобрнауки России № 105/нк от 11.04.2012 г.

Соискатель, Ноговицына Татьяна Андреевна, 1991 года рождения, в 2014 году окончила ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по специальности 010701 Физика; в 2018 году окончила очную аспирантуру ФГАОУ ВО «Уральский

федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по направлению подготовки 03.06.01 Физика и астрономия (Физика конденсированного состояния); работает в должности ассистента кафедры физики Института фундаментального образования ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Минобрнауки России.

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

**Научный руководитель** – доктор физико-математических наук, профессор, **Повзнер Александр Александрович**, ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Институт фундаментального образования, кафедра физики, заведующий кафедрой.

**Официальные оппоненты:**

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

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

дали положительные отзывы на диссертацию.

**Ведущая организация** – ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра

«Курчатовский институт», г. Гатчина, Ленинградская обл. – в своем положительном заключении, подписанном Григорьевым Сергеем Валентиновичем, доктором физико-математических наук, и.о. заведующего отдела исследований конденсированного состояния, заместителем директора НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ по международной деятельности, и Воробьевым Сергеем Ивановичем, кандидатом физико-математических наук, ученым секретарем НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, указала, что диссертационная работа Ноговицыной Т.А. содержит ряд новых теоретических положений и представляет собой законченное исследование на актуальную тему, выполненное на высоком научном уровне. Диссертационное исследование Ноговицыной Т.А. соответствует паспорту научной специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния и 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.

Соискатель имеет 15 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 15 работ, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 9 работ.

Другие публикации представлены в виде 6 тезисов, опубликованных в сборниках материалов всероссийских (2) и международных (4) научных конференций. Общий объем опубликованных работ – 3,73 п.л., авторский вклад – 1,21 п.л.

В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах.

Наиболее значительные научные работы по теме диссертации:

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) (Scopus, Web of Science).

2. Повзнер, А.А. Термодинамическое моделирование упругих и тепловых свойств моносилицида 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) (Scopus, Web of Science).

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) (Scopus, Web of Science).

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.) (Scopus, Web of Science).

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) (Scopus).

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

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) (Scopus, Web of Science).

8. Povzner, A. A. Electronic structure and quantum spin fluctuations at the magnetic phase transition in MnSi / A.A. Povzner, A.G. Volkov, **T.A. Nogovitsyna** // Physica B: Condensed Matter. – 2018. – V. 536. – P. 408-412 (0,31 п.л. / 0,1 п.л) (Scopus, Web of Science).

9. 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) (Scopus, Web of Science).

На автореферат поступили положительные отзывы от:

1. Коршунова Игоря Георгиевича, доктора физико-математических наук, профессора, заведующего кафедрой физики ФГБОУ ВО «Уральский государственный горный университет», г. Екатеринбург. Без замечаний.

2. Кудасова Юрия Бориславовича, доктора физико-математических наук, доцента, главного научного сотрудника научно-производственного центра физики ФГУП «Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики», г. Саров. Содержит замечание:

– Сравнение модельных расчетов уравнений состояния веществ с первопринципными расчетами спектров колебаний решетки и последующим определением термодинамических характеристик показывает, что использование простых моделей может приводить к значительному смещению границ на фазовых диаграммах.

3. Чубовой Надежды Михайловны, кандидата физико-математических наук, начальника Управления молодежной политики и довузовской профориентации ФГБУ «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», г. Москва. Без замечаний.

4. Упорова Сергея Александровича, кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника лаборатории статики и кинетики процессов ФГБУН Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург. Содержит замечания:

– из представленных на стр.19 результатов следует, что для моносилицида марганца так и не удалось получить количественное согласие с экспериментом ниже температуры фазового перехода. Каковы могут быть

причины столь заметного отклонения расчетной кривой от экспериментальных значений?

– следует отметить, что графический материал в автореферате представлен не лучшим образом, что затрудняет анализ представленных результатов.

5. Иваньшина Владимира Алексеевича, доктора физико-математических наук, профессора кафедры возобновляемых источников энергии ФГБОУ ВО «Казанский государственный энергетический университет», г. Казань. Содержит замечания:

– рассчитанная температурная зависимость теплоемкости  $MnSi$  (рис.2б) и сплавов  $Fe_{0.7}Co_{0.3}Si$  и  $Fe_{0.5}Co_{0.5}Si$  (рис.4) для температур  $T > 30$  К довольно плохо согласуется с данными эксперимента;

– количественного и качественного согласия при описании температурной зависимости объемного коэффициента теплового расширения в  $Fe_{1-x}Co_xSi$  удалось достичь лишь для одного из сплавов и в области температур только ниже 50 К, при этом из-за неудачных обозначений экспериментальных точек трудно различить данные для  $x=0.3$  и  $0.5$ , показанные на рис. 6(б).

– в тексте автореферата встречаются пунктуационные ошибки.

6. Гущиной Натальи Викторовны, кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника лаборатории пучковых воздействий ФГБУН Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург. Содержит замечание, касающееся недостаточного внимания автора к анализу отличий развитой в диссертации модели от уже имеющихся спин-флуктуационных теорий в отношении сути и роли этих отличий.

7. Попова Владимира Владимировича, доктора технических наук, профессора, главного научного сотрудника, заведующего лабораторией диффузии, и Блинова Ильи Викторовича, кандидата физико-математических

наук, старшего научного сотрудника лаборатории диффузии ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург. Без замечаний.

8. Устинова Владимира Васильевича, академика РАН, доктора физико-математических наук, научного руководителя ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург. Без замечаний.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их широкой известностью своими достижениями и высокой научной компетентностью в области физики конденсированного состояния, близостью тематики проводимых ими исследований и темы диссертационной работы.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

**разработаны:**

– спин-флуктуационный подход, основанный на учете взаимодействия между флуктуационными модами, для описания фазовых переходов в сильно коррелированных электронных системах со спиновой киральностью;

– компьютерные модели, дополняющие первопринципные расчеты электронной структуры расчетами магнитных и тепловых свойств на основе развитого теоретического подхода;

**установлено, что**

– близость химического потенциала к локальному минимуму на максимуме плотности электронных состояний ведет к смене знака параметра межмодовой связи в точке фазового перехода, что приводит к возникновению области ближнего геликоидального порядка, а также к формированию температурного максимума магнитной восприимчивости  $\text{MnSi}$  и  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ ;

– в моносилице марганца имеет место скачкообразное подавление нулевых спиновых флуктуаций в точке фазового перехода, приводящее к наблюдаемым на эксперименте лямбда-подобным аномалиям теплоемкости и коэффициента теплового расширения;

– в неупорядоченных сплавах  $Fe_{1-x}Co_xSi$  возникают флуктуации, связанные с различием кулоновских потенциалов железа и кобальта на разных узлах, что приводит к наблюдаемой на эксперименте широкой температурной области с отрицательными коэффициентами теплового расширения;

– на температурных зависимостях теплоемкости и теплового расширения  $MnSi$  выше температуры Кюри возникает «плечо», которое связано с формированием области флуктуаций спиновой спирали;

**определены** параметры кулоновского, межузельного обменного взаимодействия для исследуемых систем, температурные зависимости амплитуд спиновых флуктуаций, магнитной восприимчивости, теплоемкости и теплового расширения.

**Теоретическая значимость исследования обоснована** тем, что

**построены** модели, позволяющие сравнить принципиально важные положения теории с наблюдаемыми на эксперименте температурными зависимостями магнитных и тепловых свойств киральных магнетиков;

**описан** ряд наблюдаемых на эксперименте необычных магнитных и тепловых свойств сильно коррелированных систем с кристаллической структурой типа  $B20$ ;

**применительно к проблематике диссертации результативно использована** теория спиновых флуктуаций, основанная на исследовании функциональных интегралов по стохастическим обменным и зарядовым полям, теория фазовых переходов, а также методы первопринципных расчетов электронной структуры.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается** тем, что исследуемые прототипы спинтронных



материалов, в области фазового перехода характеризуются особенностями ближнего спинового порядка, важного для применения в микроэлектронике и спинтронике для создания новых твердотельных носителей памяти.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила:**

- в настоящей работе использованы апробированные методики теоретического расчета и стандартные программные пакеты;
- полученные результаты согласуются с экспериментальными данными, предыдущими теоретическими работами и не противоречат известным представлениям;
- результаты согласованы между собой и непротиворечивы.

**Личный вклад соискателя** состоит в проведении первопринципных LDA+U+SO-расчетов электронной структуры; построении компьютерной модели, объединяющей первопринципные расчеты электронной структуры и численные расчеты магнитных и тепловых свойств исследуемых систем; а также в подготовке основных публикаций по выполненной работе и апробации результатов на конференциях.

Диссертация Ноговицыной Т.А. соответствует п. 9 Положения о присуждении ученых степеней и является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи, заключающейся в развитии спин-флуктуационной теории для описания фазовых переходов в геликоидальных магнетиках, и имеющей значение для развития физики конденсированного состояния.

На заседании 07 декабря 2018 г. диссертационный совет принял решение присудить Ноговицыной Т.А. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 7 докторов наук по специальности

рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 22 человек, входящих в состав совета, проголосовали за 16, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель  
диссертационного совета



Огородников Игорь Николаевич

Ученый секретарь  
диссертационного совета



Ищенко Алексей Владимирович

07 декабря 2018 г.