XVIII Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления»

г. Троицк (Москва)

тезисы



Москва 🔶 Ижевск

2020

УДК 530.1(065) ББК 22.31я43 В76

В76 XVIII Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления» : тезисы. — М.–Ижевск : Институт компьютерных исследований, 2020. — 100 с.

ISBN 978-5-4344-0889-9

Настоящий сборник содержит тезисы докладов, заявленных на XVIII конференцию «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления». В докладах представлены оригинальные научные результаты как экспериментальных, так и теоретических исследований, охватывающих широкий круг проблем, связанных с различными актуальными аспектами физики сильно коррелированных систем и квантовых критических явлений.

В соответствии с программой конференции доклады объединены в следующие разделы: «Магнитные системы различной природы. Кондо-системы», «Сверхпроводимость и бозе-конденсация», «Теоретические аспекты сильно коррелированных систем», «Низкоразмерные системы. Пленки. Топологические изоляторы» и «Сильно коррелированные системы различной природы».

География научных учреждений, в которых работают авторы докладов, включает в себя большинство крупных научных центров и университетов Российской Федерации. Конференция организована Физическим институтом им. П. Н. Лебедева РАН, Троицким научный центром РАН при содействии администрации г. о. Троицк в г. Москве и Государственной корпорации по атомной энергии «Росатом». Конференция проводится в рамках программы научных мероприятий, посвященных празднованию 75-летия атомной промышленности Российской Федерации.

Издание представляет интерес для научных сотрудников, а также студентов и аспирантов соответствующего профиля.

> УДК 530.1(065) ББК 22.31я43

ISBN 978-5-4344-0889-9

© Федеральное государственное бюджетное учреждение «Троицкий научный центр» Российской академии наук, 2020

ОРГАНИЗАТОРЫ КОНФЕРЕНЦИИ

Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН Троицкий научный центр РАН

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ КОНФЕРЕНЦИИ

Академик РАН С. М. Стишов

ЗАМЕСТИТЕЛЬ ПРЕДСЕДАТЕЛЯ КОНФЕРЕНЦИИ

Председатель ТНЦ РАН В. Д. Лаптев

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

- С. М. Стишов (ФИАН, ИФВД РАН) председатель
- П. А. Алексеев (НИЦ «КИ»)
- П. И. Арсеев (ФИАН)
- Д. Н. Басов (Колумбийский университет, США)
- Н. Н. Сибельдин (ФИАН)
- А. И. Смирнов (ИФП РАН)
- В. Б. Тимофеев (ИФТТ РАН)
- Д. И. Хомский (Кельнский университет, Германия)
- А. В. Чубуков (Университет Миннесоты, США)

ОРГКОМИТЕТ

- В. Д. Лаптев (ТНЦ РАН) председатель
- Л. Н. Авдеева (Администрация г. о. Троицк)
- С. В. Григорьев (НИЦ «КИ»)
- А. Ю. Румянцев (Госкорпорация «Росатом»)
- В. Г. Шутяк (ФИАН)
- И. Е. Костылева (ИФВД РАН)
- А. Е. Петрова (ФИАН, ИФВД РАН)
- Д. А. Саламатин (ИФВД РАН)
- А. В. Цвященко (ИФВД РАН)

вступление

Настоящий сборник содержит тезисы докладов, представленных на XVIII конференцию «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления». Предполагалось, что конференция будет проведена 28 мая 2020 г. в наукограде Троицк (Москве), но коронавирус вмешался в наши планы, и проведение конференции было отложено до лучших времен. Мы отказались от формата онлайн конференции, поскольку спецификой нашей конференции всегда были неформальное общение и обширная постерная сессия. Мы рассчитываем, что сможем провести очную конференцию в осеннее время. Тем не менее, выполняя известные обязательства перед участниками конференции, мы публикуем тезисы с тем, чтобы последние могли бы цитироваться в тех или иных документах и статьях.

Оргкомитет

СОДЕРЖАНИЕ

Вступление
Магнитные системы различной природы. Кондо-системы
Алексеев П. А., Лазуков В. Н. Особенности спиновой щели в кондо-изоляторах10
Grigoriev P. D., Ramazashvili R., Kartsovnik M. V. Эффективный g-фактор электронов, измеряемый по магнитным квантовым осцилляциям в антиферромагнитных металлах
Петрова А. Е. Фазовая диаграмма метабората меди CuB ₂ O ₄ в магнитном поле, перпендикулярном геликоидальной оси
Пшеничный К. А., Алтынбаев А. В., Honnecker D., Menzel D., Григорьев С. В. Измерение спин-волновой жесткости в гелимагнетиках Fe _{1-x} Co _x Si методом малоуглового рассеяния нейтронов
Сканченко Д. О., Алтынбаев Е. В., Martin N., Садыков Р. А., Цвященко А. В., Григорьев С. В. Влияние давления на формирование скирмионной решетки в Mn _{1-x} Fe _x Ge
Смирнов А. И., Солдатов Т. А., Поваров К. Ю., Падуан-Фильхо А., Желудев А. И. Динамический диамагнетизм цепочечного анизотропного антиферромагнетика NiCl ₂ -4SC(NH ₂) ₂ 18
Саламатин Д. А., Martin N., Сидоров В. А., Щелкачев Н. М., Магницкая М. В., Петрова А. Е., Зибров И. П., Фомичёва Л. Н., Jing Guo, Cheng Huang, Liling Sun, Цвященко А. В. Дуализм 4f-электронов и высокотемпературный антиферромагнетизм
в тяжелофермионном соединении у всос2

Сверхпроводимость и бозе-конденсация

Горбунов А. В., Журавлев А. С., Кулик Л. В., Тимофеев В. Б.	
Термализация и транспорт циклотронных триплетных	
магнитоэкситонов	2

Дмитриенко В. Е., Чижиков В. А. Скрытый порядок в кристацие тяжедофермионного	
сверхпроводника UTe ₂	24
Жерихина Л. Н., Успенская Л. С., Нортон М. Л. Захваченный магнитный поток в монокристалле Ba _{0.6} K _{0.4} BiO ₃ , находящемся в пространственно-неоднородном состоянии	26
Каракозов А. Е., Магницкая М. В., Горшунов Б. П., Жукова Е. С. К фазовой диаграмме железосодержащих сверхпроводников	27
Кочерешко В. П., Savvidis P., Bessombes L., Mariette H. Индуцированная магнитным полем бозе-конденсация поляритонов в микрорезонаторах	30
Лукьянов А. Е., Неверов В. Д., Красавин А. В., Менушенков А. П. Оценка константы электрон-фононного взаимодействия в соединениях Ва _{1-х} K _x BiO ₃	32
Менушенков А. П., Ярославцев А. А., Кузнецов А. В., Иванов А. А., Красавин А. В. К вопросу о механизме сверхпроводимости в ВТСП на основе ВаВіО ₃	35
Мороз А. Н., Максимова А. Н., Кашурников В. А., Руднев И. А. Влияние конфигурации дефектов на импульсное намагничивание ВТСП	37
Sidorov V. A., Guo J., Ren Z., Chen G., Sun L. Interplay of magnetism and superconductivity in the system $Eu_{1-x}La_xFeAs_2$	39
Теоретические аспекты сильно коррелированных систем	
Белемук А. М., Стишов С. М. Инвариантность Вольхардта в киральных магнетиках	40
<i>Васин М. Г.</i> Критическая динамика бозонной системы вблизи квантового фазового перехода	41
Николаев А. В., Щелкачёв Н. М., Саламатин Д. А., Цвященко А. В. Теоретическое (ab initio) моделирование зависимости градиентов электрического поля в кристаллах (Zn, Cd) от температуры	43
<i>Pozdneev S. A.</i> Few-body approximation in atomic and molecular physics	45

Ремизов С. В., Елистратов А. А., Лозовик Ю. Е.
Попова-Федотова
Бражкин В. В., Суслов И. М.
О механизме универсальных флуктуации кондактанса
<i>Шагинян В. Р.</i> Асимметричная туннельная проводимость и неферми-жидкостное поведение сильно коррелированных ферми-систем
Низкоразмерные системы. Пленки. Топологические изоляторы
Кон И. А., Зыбцев С. Г., Орлов А. П., Зайцев-Зотов С. В. Вклад дислокаций волны зарядовой плотности в магнетосопротивление квазиодномерного вейлевского полуметалла (TaSe ₄) ₂ I
Минакова В. Е., Никитина А. М., Зайцев-Зотов С. В. Обычная и вынужденная диффузия скореллированных примесей серы и созданный ими новый тип пиннинга волны зарядовой плотности в кристаллах ромбического TaS ₃
<i>Могилюк Т. И., Григорьев П. Д.</i> Межслоевая проводимость в слоистых металлах в углах Ямаджи в магнитном поле
Неверов В. Д., Лукьянов А. Е., Красавин А. В. Автолокализация носителей в монослое черного фосфора
Никитин М. В., Зыбцев С. Г., Покровский В. Я. О возможности синхронизации волны зарядовой плотности в квазиодномерных проводниках механическими колебаниями
Овсянников Г. А., Шайхулов Т. А., Станкевич К. Л., Андреев Н. В., Khaidukov Yu., Демидов В. В. Спиновый ток на границе раздела гетероструктур манганита с иридатом, материала с сильным спин-орбитальным взаимодействием
Зыбцев С. Г., Никонов С. А., Покровский В. Я., Насретдинова В. Ф., Зайцев-Зотов С. В., Зупанич Э., ван Мидден М. А., Воэй Ву Пай, Старешинич Д. Особенности воли зарядовой плотности в квазиолномерном
проводнике NbS ₃ -II, обнаруженные при изучении ступенек Шапиро

<i>Рамазанов М. К., Муртазаев А. К., Магомедов М. А.</i> Исследование магнитных свойств антиферромагнетика RbFe(MoO ₄) ₂	
методами Монте-Карло	55
Сабликов В. А.	
Конфигурационное взаимодействие краевых состояний и немагнитных дефектов в 2D-топологических изоляторах	57
Галеева А. В., Казаков А. С., Артамкин А. И., Рябова Л. И., Дворецкий С. А. Михайлов Н. Н., Банников М. И., Данилов С. Н., Ганичев С. Д., Хохлов Д. Р. РТ-симметрия терагериовой фотопроволимости в структурах на основе	,
топологической фазы $Hg_{1-x}Cd_xTe$	59
Фролов А. В., Орлов А. П., Темирязев А. Г., Синченко А. А.	
Немонотонная зависимость проводимости от толщины	
в атомно-тонких пленках Bi ₂ Se ₃ 7	0

Сильно коррелированные системы различной природы

Ahmed A., Prokhorov A. S., Anzin V., Vinnik D., Bush A., Gorshunov B., Alyabyeva L. Low-energy electrodynamics of single-crystalline M-type barium hexaferrite doped with lead and aluminium nexaferrite doped with lead and aluminium 74 <i>Батурин В. С., Лепешкин С. В., Бушланова Н. А., Успенский Ю. А.</i> Структура, стабильность и ловушки заряда в нанокластерах Cd _n Se _m	Аникеева В. Е., Болдырев К. Н., Семёнова О. И., Попова М. Н. ИК-спектроскопия гибридного перовскита CH ₃ NH ₃ PbI ₃ : динамика органического катиона	72
Батурин В. С., Лепешкин С. В., Бушланова Н. А., Успенский Ю. А. Структура, стабильность и ловушки заряда в нанокластерах Cd _n Se _m	Ahmed A., Prokhorov A. S., Anzin V., Vinnik D., Bush A., Gorshunov B., Alyabyeva L. Low-energy electrodynamics of single-crystalline M-type barium hexaferrite doped with lead and aluminium	74
Боков А. В., Степанов С. В., Степанов П. С., Бяков В. М. Взаимодействие позитрония с растворенным кислородом в жидкостях78 Бурмистров С. Н., Дубовский Л. Б. Новый вид эксперимента в квантовом зародышеобразовании	Батурин В. С., Лепешкин С. В., Бушланова Н. А., Успенский Ю. А. Структура, стабильность и ловушки заряда в нанокластерах Cd _n Se _m	76
Бурмистров С. Н., Дубовский Л. Б. Новый вид эксперимента в квантовом зародышеобразовании	Боков А. В., Степанов С. В., Степанов П. С., Бяков В. М. Взаимодействие позитрония с растворенным кислородом в жидкостях	78
Классен Н. В., ПокидовА. П., Цебрук И. С. Взаимные корреляции структурных дефектов, электронных, фононных и фотонных подсистем в сильно неравновесных средах	Бурмистров С. Н., Дубовский Л. Б. Новый вид эксперимента в квантовом зародышеобразовании	80
Мирмельштейн А., Матвиенко В. Валентно-флуктуирующая природа, аномалия теплового расширения и поведение объемного модуля δ-плутония83	Классен Н. В., ПокидовА. П., Цебрук И. С. Взаимные корреляции структурных дефектов, электронных, фононных и фотонных подсистем в сильно неравновесных средах	81
	Мирмельштейн А., Матвиенко В. Валентно-флуктуирующая природа, аномалия теплового расширения и поведение объемного модуля δ-плутония	83

Даунов М. И., Мусаев А. М.	
Прогнозирование электрических свойств гранулированных композитов	~ -
методом гетерофазная структура – эффективная среда	.85
Савченков П. С., Алексеев П. А., Сидоров В. А.	
Особенности промежуточновалентного состояния Еи в интерметаллидах	~-
EuCu ₂ (S1,Ge) ₂	.87
Сайпулаева Л. А., Мельникова Н. В., Бабушкин А. Н., Тебеньков А. В.,	
Захвалинский В. С., Риль А. И., Маренкин С. Ф., Гаджиалиев М. М.	
Влияние высокого давления на электрофизические свойства дираковского	00
<i>3D</i> -полуметалла <i>Ca₃As₂</i> с наногранулами <i>MnAs</i>	.88
Норман Г. Э., Саитов И. М.	
Полуметаллические состояния молекулярного кристаллического водорода	1
при высоких давлениях	.89
Саламатин Д. А., Цвященко А. В., Клементьев К. Е., Козин М. Г.,	
Ромашкина И. Л., Сидоров В. А., Зибров И. П., Николаев А. В.,	
Фомичёва Л. Н.	0.0
Новое промежуточновалентное соединение Y bZn ₂	.90
Стишов С. М.	
Критические точки и фазовые переходы	.92
Шутикова М. И., Стегайлов В. В.	
Точечные дефекты в магнетите: расчеты в рамках теории функционала	
плотности	.93
Зибров И. П., Филоненко В. П.	
Синтез и структура нового соединения NaV ₃ O ₆	.94
Зибров И. П., Филоненко В. П.	
Новая фаза высокого давления $\text{RE}_x W_{4-x} O_{10}$ (RE = Tb – Lu, $x \approx 1$)	.96
Волчков Н. А., Жерихина Л. Н., Карузский А. Л., Кульбачинский В. А.,	
Митягин Ю. А., Пересторонин А. В., Черняев А. П.	
Поверхностный импеданс проводников без диссипации	
на постоянном токе с учетом пространственной дисперсии	.98

МАГНИТНЫЕ СИСТЕМЫ РАЗЛИЧНОЙ ПРИРОДЫ. КОНДО-СИСТЕМЫ

Особенности спиновой щели в кондо-изоляторах

П. А. Алексеев, В. Н. Лазуков

НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, 123182, Россия

Наличие зарядовой и спиновой щели с резонансной модой служит характерным признаком состояния кондо-изолятора, которое формируется в кондо-металлах, в частности на основе редкоземельных элементов церия и иттербия, при температурах ниже 50–100 К. Нейтронная спектроскопия позволяет исследовать спектр f-электронных возбуждений в широком диапазоне энергий и волновых векторов и его эволюцию при изменении температуры.

В работе приводятся и обсуждаются результаты исследования влияния на структуру спектра низкоэнергетических f-электронных возбуждений кондо-изолятора ряда физически различных типов замещения как редкоземельных так и других структурно-образующих ионов, методом неупругого магнитного рассеяния нейтронов. Это позволяет экспериментально получить информацию о движущих силах и взаимодействиях, ответственных за переход металл–изолятор.

Изучено влияние на спектр магнитных возбуждений трех видов «электронных модификаторов» для соединений на основе YbB₁₂ и CeFe₂Al₁₀:

- немагнитный изоэлектронный дефект в f-подрешетке (Lu³⁺);
- магнитный изоэлектронный дефект в f-подрешетке (Nd³⁺, Tm³⁺);
- электронный дефект в d-подрешетке (Ru, Rh).

Оказалось, что наименее существенные изменения спектра наблюдаются при замещении немагнитной изоэлектронной примесью, в Yb_{1-x}Lu_xB₁₂ спиновая щель подавляется лишь далеко за перколяционным пределом (x > 0.5). Магнитная изоэлектронная примесь влияет на характер спектра возбуждений значительно сильнее, прежде всего — на резонансную моду, существующую в спиновой щели, и на температуру, при которой спиновая щель подавляется. Оказалось, что для частичного подавления щели при $T \sim 5$ К достаточно введения примеси с концентрацией x = 0.15-0.20для каждой из рассматриваемых систем.

Электронный дефект в d-подрешетке радикально влияет как на спиновую щель, на резонансную моду, так и энергию спиновых флуктуаций. Рост концентрации неизоэлектронной d-примеси (Rh) в Fe-подрешетке $CeFe_2Al_{10}$ приводит к изменениям спектра возбуждений f-электронов, свидетельствующим о постепенном переходе от режима кондоизолятора к тяжелофермионному состоянию, что впервые удалось наблюдать для спектральной функции кондо-изолятора.

Эффективный g-фактор электронов, измеряемый по магнитным квантовым осцилляциям в антиферромагнитных металлах

P. D. Grigoriev^{1,2}, R. Ramazashvili³, M. V. Kartsovnik⁴

 ¹L. D. Landau Institute for Theoretical Physics, Chernogolovka 142432, Russia
² National University of Science and Technology "MISiS", Moscow 119049, Russia
³ Laboratoire de Physique Theorique, Universite de Toulouse, CNRS, UPS, France
⁴ Walther-Meißner-Institut,

D-85748 Garching, Germany

Используя симметрийные аргументы, мы показываем, что во многих металлах с антиферромагнитным упорядочением эффективный g-фактор носителей заряда, измеренный по магнитным квантовым осцилляциям, равен нулю. Экспериментальное исследование этого эффекта проводится в нескольких соединениях и сравнивается с предложенной теорией. Мы обнаружили, что антиферромагнитное состояние слоистого органического проводника κ -(BETS)₂FeBr₄ не проявляет спиновой модуляции осцилляций Шубникова – де Гааза, в отличие от парамагнитного состояния того же материала. Это свидетельствует о вырождении уровней Ландау по спину, предсказанное для антиферромагнитных проводников. Аналогично мы не находим спиновой модуляции в угловой зависимости медленных осцилляций Шубникова – де Гааза в оптимально легированном электронами купрате Nd_{2-x}Ce_xCuO₄. Это указывает на наличие неелевского порядка в этом сверхпроводнике даже при оптимальном легировании.

[1] Ramazashvili R., Grigoriev P. D., Helm T., Kollmannsberger F., Kunz M., Biberacher W., Kampert E., Fujiwara H., Erb A., Wosnitza J., Gross R., Kartsovnik M. V. Zeeman spin-orbit coupling and magnetic quantum oscillations in antiferromagnetic conductors. — arXiv:1908.01236 (sent to PRL).

Фазовая диаграмма метабората меди CuB₂O₄ в магнитном поле, перпендикулярном геликоидальной оси

А. Е. Петрова

Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, г. Троицк (г. Москва), 142190, Россия Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, г. Москва, 119333, Россия

В рамках исследования магнитной фазовой диаграммы мультиферроика CuB_2O_4 проведены измерения теплового расширения, модуля упругости c_{11} и теплоемкости в диапазоне температур 2–40 К и магнитных полей до 9 Тл в магнитном поле, направленном вдоль оси [100]. В указанном диапазоне обнаружен каскад магнитных фаз.

Данные, полученные из измерений теплоемкости и теплового расширения, подтверждают существование ранее обнаруженной концевой критической точки ($T \sim 4.7$ K, $H \sim 1.2$ Tл), но, по-видимому, предполагаемая критическая точка [1] ($T \sim 5.8$ K, $H \sim 0.3$ Tл) не существует. Кроме того, измерения теплоемкости и модуля c_{11} показывают, что существует еще одна магнитная фаза, не выявленная при измерениях магнитной восприимчивости в магнитных полях выше ~0.8 T и температурах ниже ~6.8 K. Стоит отметить, что впервые эта фаза определена методом упругого рассеяния нейтронов [2] как несоизмеримая геликоидальная фаза II. Соответствующий фазовый переход образует концевую критическую точку в магнитном поле ~0.8 T и температуре ~6.8 K.

- [1] Петрова А. Е., Панкрац А. И. ЖЭТФ **153**, 615 (2018).
- [2] Kousaka Y., Yano S., Nishi M., Hirota K., Akimitsu J. J. Phys. Chem. Sol. 68, 2170 (2007).

Измерение спин-волновой жесткости в гелимагнетиках Fe_{1-x}Co_xSi методом малоуглового рассеяния нейтронов

К. А. Пшеничный^{1,2}, А. В. Алтынбаев^{1,2}, D. Honnecker³, D. Menzel⁴, С. В. Григорьев^{1,2}

¹ Петербургский институт ядерной физики, НИЦ «Курчатовский институт», г. Гатчина, 188300, Россия ² Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, 198504, Россия ³ Institute Laue Langevin, Grenoble, 38042 Grenoble, Cedex 9, France ⁴ Technische Universität Braunschweig, 38106 Braunschweig, Germany

Методом малоуглового рассеяния нейтронов измерена спин-волновая жесткость в соединениях $Fe_{1-x}Co_xSi$ (с концентрациями x = 0.25; 0.30; 0.50) в состоянии, полностью намагниченном магнитным полем. Соединения Fe_{1-x}Co_xSi являются гелимагнетиками с обменным взаимодействием Дзялошинского-Мория. Дисперсия магнонов в этом состоянии, полностью намагниченной индуцированной ферромагнитной фазе, имеет анизотропный вид, поскольку картина рассеяния нейтронов представляет собой два круга для нейтронов с полученной и отданной энергией магнона. Центры окружностей смещены на величину порядка переданного импульса, ориентированного вдоль приложенного магнитного поля Н и равного волновому вектору спирали $\pm \mathbf{k}_{S}$. Радиус кругов напрямую связан с величиной спин-волновой жесткости А, но зависит от приложенного магнитного поля Н. Показано, что спин-волновая жесткость слабо изменяется с температурой для каждого соединения, но линейно возрастает с концентрацией х. Однако зависимость критической температуры перехода в парамагнитное состояние $T_C(x)$ не является линейной.

Взаимодействие Дзялошинского–Мория в соединениях $Fe_{1-x}Co_xSi$ [1, 2] и $Fe_{1-x}Co_xGe$ [3] может контролироваться содержанием кобальта. Если сравнивать магнитные свойства этих соединений, то видно, что в обогащенных кобальтам соединениях магнитные свойства очень схожи. Соединения CoGe и CoSi являются немагнитными изоляторами, упорядоченный магнетизм начинает проявляться при содержании кобальта 80 %. Знак взаимодействия Дзялошинского–Мория изменяется при концентрации x = 0.6 в Fe_{1-x}Co_xGe [3] и x = 0.65 в Fe_{1-x}Co_xSi [2], критическая температура монотонно уменьшается с увеличением x от 0.4 до 0.8.

Однако свойства соединений богатых железом различны. Соединение FeGe является гелимагнетиком с очень высокой критической температурой $T_C = 278$ K, тогда как FeSi является немагнитным полупроводником. Добавление кобальта приводит к снижению критической температуры для соединений Fe_{1-x}Co_xGe, а для соеденения Fe_{1-x}Co_xSi добавление 5–10 % кобальта приводит к появлению геликоидальной структуры. Тем не менее магнитная структура богатых железом соединений хорошо описывается моделью Бака–Йенсена, а вопрос о магнитной структуре соединений богатых кобальтом остается открытым.

Работа сделана при поддержке гранта Российского научного фонда № 17-12-01050.

- Grigoriev S. V., Maleyev S. V., Dyadkin V. A., Menzel D., Schoenes J., Eckerlebe H. *Phys. Rev. B.* 76, 092407 (2007).
- [2] Siegfried S.-A., Altynbaev E. V., Chubova N. M., Dyadkin V., Chernyshov D., Moskvin E. V., Menzel D., Heinemann A., Schreyer A., Grigoriev S. V. *Phys. Rev. B.* **91**, 184406 (2015).
- [3] Grigoriev S. V., Siegfried S.-A., Altynbayev E. V., Potapova N. M., Dyadkin V., Moskvin E. V., Menzel D., Heinemann A., Axenov S. N., Fomicheva L. N., Tsvyashchenko A. V. *Phys. Rev. B.* **90**, 174414 (2014).

Влияние давления на формирование скирмионной решетки в Mn_{1-x}Fe_xGe

Д. О. Сканченко^{1,2}, Е. В. Алтынбаев^{1,2}, N. Martin³, Р. А. Садыков^{2,4,5}, А. В. Цвященко², С. В. Григорьев^{1,2,6}

¹ Петербургский институт ядерной физики НИЦ «Курчатовский институт», г. Гатчина, 188300, Россия ² Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, г. Троицк (г. Москва), 142190, Россия ³ Laboratoire Leon Brillouin, CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France ⁴ Институт ядерных исследований РАН, г. Москва, 117312, Россия ⁵ Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва, 119049, Россия ⁶ Санкт-Петербургский государственный университет,

г. Санкт-Петербург, 198504, Россия

Соединения Mn_{1-x}Fe_xGe, синтезированные при высоком давлении, кристаллизуется в нецентросимметричную кубическую структуру типа В20 [1], в которой отсутствие центра инверсии в расположении магнитных атомов приводит к возникновению антисимметричного обменного взаимодействия Дзялошинского-Мория (ДМ) и образованию магнитной спирали [2, 3]. Анализ эволюции магнитной структуры MnSi и FeGe во внешнем магнитном поле позволил обнаружить образование скирмионной решетки (СкР) или А-фазу [4, 5]. В работе [6] показано, что ни температурный, ни полевой диапазоны области существования А-фазы в соединении MnSi практически не зависят от внешнего давления вплоть до P = 13 кбар. При этом температура магнитного упорядочения в этом соединении существенно падает. Известно, что в соединениях Mn_{1-x}Fe_xGe с x = 0.1 и 0.3 А-фаза наблюдается в широком диапазоне температур, 30 К <T < 130 К, и полей, 0.8 Тл < H < 2 Тл [7]. Данное исследование посвящено исследованию магнитной структуры Mn_{1-x}Fe_xGe c x: 0.1 и 0.3 под действием квазигидростатического давления до 10 кбар методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН). Оказалось, что давление приводит к одновременному увеличению всех критических полей: H_{c1} , H_{c1m} , H_{c2} — при низких температурах и уменьшению температуры магнитного упорядочения, Тс, как для соединений с x = 0.1, так и для соединений с x = 0.3. Также обнаружено, что в случае соединения $Mn_{0.7}Fe_{0.3}$ Ge увеличение внешнего давления приводит к уменьшению как температурного, так и полевого диапазонов существования А-фазы. Сравнение эволюции фазовой диаграммы поле–температура для соединений $Mn_{1-x}Fe_x$ Ge и MnSi позволяет подтвердить различную природу основных взаимодействий, формирующих длиннопериодную магнитную структуру в этих соединениях.

Авторы благодарят за поддержку Российский научный фонд (грант № 17-12-01050).

- [1] Tsvyashchenko A. V. J. Less-Common Met. 99, L9 (1984).
- [2] Dzyaloshinskii I. E. Zh. Eksp. Teor. Fiz. 46, 1420 (1964).
- [3] Bak P., Jensen M. H. J. Phys. C13, L881 (1980).
- [4] Чубова Н.М. и др. ЖЭТФ **152** (5), 933–943 (2017).
- [5] Wilhelm H. et al. Phys. Rev. Lett. 107, 127203 (2011).
- [6] Bannenberg L. J. et al. Phys. Rev. B 100, 054447 (2019).
- [7] Altynabev E. V. et al. arXiv:1911.12190 [cond-mat.str-el].

Динамический диамагнетизм цепочечного анизотропного антиферромагнетика NiCl₂-4SC(NH₂)₂

А. И. Смирнов¹, Т. А. Солдатов¹, К. Ю. Поваров², А. Падуан-Фильхо³, А. И. Желудев²

¹ Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, г. Москва, 119334, Россия ² ETHZürich, 8093 Zürich, Switzerland ³ University of São Paulo, BR-05315-970 São Paulo, Brazil

Изучен магнитный резонанс и высокочастотные свойства цепочечного магнетика со спином магнитного иона S = 1 и сильной одноионной анизотропией, NiCl₂-4SC(NH₂)₂ (сокращенное наименование DTN). В этом соединении энергия антиферромагнитного обмена магнитных ионов в цепочках меньше энергии одноинной анизотропии легкоплоскостного типа. Данный кристалл представляет собой редкий пример спиновой системы с спин-жидкостным основным состоянием, в которой стабилизация неупорядоченного основного состояния обусловлена не обменным взаимодействием в низкоразмерном магнетике, а анизотропией. Это отличает DTN от классических магнетиков, в которых анизотропия, наоборот, способствует упорядочению. Спектр магнитного резонанса в спин-жидкостной фазе DTN аналогичен спектру спина S = 1 в кристаллическом поле [1]. Однако, в специфической индуцированной полем антиферромагнитной фазе, которая существует при температуре ниже 1 К в интервале полей от 2 до 12 T, спектр состоит из двух ветвей необычного антиферромагнитного резонанса. Одна из ветвей имеет минимальную частоту 80 ГГц в середине интервала существования упорядоченной фазы, а вторая является голдстоуновской модой с нулевой частотой. Голдстоуновская мода, тем не менее, приобретает конечную частоту при слабом отклонении направления магнитного поля от оси симметрии четвертого порядка. В упорядоченной фазе мы наблюдаем также необычный эффект нерезонансного динамического диамагнетизма в широкой полосе частот, схематически представленной на рисунке. Величина диамагнитной восприимчивости достигает величины динамической восприимчивости парамагнитного резонанса в этом соединении. Этот сильный диамагнитный отклик отличается от обычно наблюдаемого в условиях магнитного резонанса тем, что существует в широкой полосе частот. Эта полоса частот расположена выше квази-голдстоуновской моды и имеет резкую нижнюю границу, что указывает на связь наблюдаемого эффекта с двухмагнонным поглощением на магнонах низкочастотной ветви, имеющих дисперсию в диапазоне наблюдения динамического диамагнетизма.



Рис. 1. Схема частотно-полевого диапазона динамической нерезонансной восприимчивости, обусловленной двухмагнонным поглощением. Линия С обозначает частоту верхней моды антиферромагнитного резонанса, линия D — частоту квазиголдстоуновской моды. Н_{c1} и H_{c2} — магнитные поля, ограничивающие область антиферромагнитной фазы

 Soldatov T. A., Smirnov A. I., Povarov K. Yu., Paduan-Filho A., Zheludev A. *Phys. Rev. B* 101, 104410 (2020).

Дуализм 4*f*-электронов и высокотемпературный антиферромагнетизм в тяжелофермионном соединении YbCoC₂

Д. А. Саламатин^{1,2}, N. Martin³, В. А. Сидоров¹, Н. М. Щелкачев^{1,4,5}, М. В. Магницкая^{1,6}, А. Е. Петрова^{1,6}, И. П. Зибров¹, Л. Н. Фомичёва¹, Jing Guo⁷, Cheng Huang⁷, Liling Sun⁷, А. В. Цвященко¹

¹ Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, г. Троицк (г. Москва), 142190, Россия

> ² Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Московская обл., 141980, Россия

³ Laboratoire Leon Brillouin, CEA, CNRS, Universite Paris-Saclay, CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France

⁴ Московский физико-технический институт (НИУ), г. Долгопрудный, Московская обл., 141700, Россия

> ⁵ Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, 620075, Россия

 ⁶ Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, г. Москва, 119333, Россия
⁷ Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences,

100190 Beijing, P. R. China

Данная работа посвящена первому изучению физических свойств нецентросимметричного тернарного дикарбида Yb — YbCoC₂ с орторомбической структурой типа CeNiC₂. Измерения намагниченности, магнитной восприимчивости, теплоемкости, электрического сопротивления и дифракции нейтронов указывают на тяжелофермионное поведение в данном соединении с синусоидальным антиферромагнитным упорядочением магнитных моментов Yb ниже температуры Нееля $T_N = 33$ K при P = 13 GPa (см. рис. 1). Такое рекордно высокое значение температуры Нееля для соединений на основе Yb было объяснено с помощью *abinitio* расчетов зонной структуры YbCoC₂. Расчеты показали дуальную (двойственную) природу 4*f*-электронных состояний Yb. То есть 4*f*-электроны обладают одновременно зонным и локализованным характером из-за сильной гибридизации с 3*d*-электронами Co [1].



Рис. 1. Магнитная структура YbCoC₂ в соизмеримой области (для ясности на рисунке изображены только ионы Yb и их магнитные моменты)

Работы была поддержана грантом РНФ № 17-12-01050 и № 18-12-00438. Результаты численных расчетов были получены с использованием MCCNRC `KurchatovInstitute` (http://computing.nrcki.ru/) и суперкомпьютера в Joint Supercomputer Center of RAS (JSCCRAS). Мы также благодарны команде суперкомпьютера URAN в IMMUBRAS за предоставленный доступ.

Salamatin D. A., Martin N., Sidorov V. A. et al. *Phys. Rev. B* 101, 100406(R) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevB.101.100406

СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ И БОЗЕ-КОНДЕНСАЦИЯ

Термализация и транспорт циклотронных триплетных магнитоэкситонов

А. В. Горбунов, А. С. Журавлев, Л. В. Кулик, В. Б. Тимофеев

Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Московская обл., 142432, Россия

Циклотронный триплетный магнитоэкситон (ЦТМЭ) в квантовохолловском изоляторе (КХИ) при электронном факторе заполнения v = 2является нижайшим по энергии возбуждением со спином S = 1 [1]. ЦТМЭ состоит из электрона с перевернутым спином на пустом первом уровне Ландау и электронной вакансии (ферми-дырки) на полностью занятом нулевом уровне Ландау. ЦТМЭ оптически не активен в дипольном приближении. Кроме того, минимум его дисперсионной зависимости находится в области больших импульсов, порядка обратной магнитной длины, $q_{\min} \approx 1/l_B \sim 10^6$ см⁻¹ [2]. В результате время жизни ЦТМЭ τ_{ex} достигает сотен микросекунд [3]. При столь долгом времени жизни можно создать плотный ансамбль ЦТМЭ с помощью довольно слабого фотовозбуждения, избегая перегрева системы. В силу целочисленности спина ЦТМЭ является композитным бозоном. По этой причине при достаточно низких температурах, T < 1 K, и высоких концентрациях ЦТМЭ, n_{ex} до ≤ 10 % от плотности электронных состояний N_{ϕ} на уровне Ландау, в КХИ, чисто фермионной системе, образуется качественно новая фаза — магнетофермионный конденсат [3]. Это состояние является первым экспериментальным примером конденсации композитных бозонов не в обычном пространстве, как в случае электронно-дырочной жидкости в объемных полупроводниках, и не в импульсном пространстве, как в случае атомных бозе-конденсатов, а в пространстве обобщенных импульсов — величин, зависящих как от пространственных координат, так и от их градиентов [4]. Конденсат может быстро «растекаться» из области фотовозбуждения в «объем» КХИ на макроскопические расстояния. Прямые эксперименты в высокоподвижной GaAs/AlGaAs электронной

системе показывают, что транспортная длина ЦТМЭ в конденсированном состоянии увеличивается по крайней мере на три порядка величины по сравнению с длиной диффузии магнитоэкситонов в газовой фазе [5].

Термализация ЦТМЭ является нетривиальным и беспрецедентно длительным для трансляционно-инвариантных неравновесных электронных систем процессом. Одиночный ЦТМЭ с нулевым обобщенным импульсом, по-видимому, вообще не может релаксировать в нижайшее энергетическое состояние, несмотря на то, что τ_{ex} может достигать ~1 мс. Принципиально невозможно одновременно выполнить законы сохранения энергии и импульса в процессе испускания акустических фононов одиночным ЦТМЭ. Ансамбль ЦТМЭ состоит из надконденсатных экситонов с малыми обобщенными импульсами, $q \approx 0$, и ЦТМЭ в энергетическом минимуме, с импульсами порядка обратной магнитной длины, $q_{\min} \sim 1/l_B$. Только по достижении некоторой критической плотности $n_{\rm ex}$ релаксация в нижайшее состояние становится возможной за счет экситон-экситонного рассеяния. Показано экспериментально, что перенос магнитоэкситонной плотности на макрорасстояния осуществляется не всеми ЦТМЭ, а только теми, импульс которых близок к q_{\min} , и магнетофермионный конденсат формируется именно из этих магнитоэкситонов.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 16-12-10075.

- Kulik L. V., Kukushkin I. V., Dickmann S., Kirpichev V. E., Van'kov A. B., Parakhonsky A. L., Smet J. H., vonKlitzing K., Wegscheider W. *Phys. Rev. B* 72, 073304 (2005).
- [2] Kallin C., Halperin B. I. Phys. Rev. B 30, 5655 (1984).
- [3] Kulik L. V., Zhuravlev A. S., Dickmann S., Gorbunov A. V., Timofeev V. B., Kukushkin I. V., Schmult S. *Nature Comm.* 7, 13499 (2016).
- [4] Avron J. E., Herbst I. W., Simon B. Ann. Physics 114, 431 (1978).
- [5] Kulik L. V., Kuznetsov V. A., Zhuravlev A. S., Gorbunov A. V., Solovyev V. V., Timofeev V. B., Kukushkin I. V., Schmult S. *Scientific Reports* 8, 10948 (2018).

Скрытый порядок в кристалле тяжелофермионного сверхпроводника UTe₂

В. Е. Дмитриенко, В. А. Чижиков

Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова, ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, г. Москва, 119333, Россия

Сверхпроводимость и магнетизм тесно связаны в кристаллах актинидов и, в частности, в новом необычном сверхпроводнике UTe₂ [1-3]. Однако ни нейтронная дифракция, ни мюонная спектроскопия не обнаруживают в нем дальнего магнитного упорядочения. Недавно мы показали, что загадочный «скрытый порядок» в кристаллах URu₂Si₂ может быть высокосимметричным неколлинеарным распределением магнитного момента внутри атомов урана [4], труднодоступным для обычных методов исследования. Такая нетривиальная картина магнитного упорядочения (магнитные вихри атомного размера) появляется из-за сильного спин-орбитального взаимодействия, типичного для тяжелых атомов с d- и f-оболочками. Возникает естественный вопрос: не может ли похожий скрытый порядок возникать и в кристалле UTe₂? Мы рассчитали распределения магнитного момента M(r) в этом кристалле для различных ориентаций и знаков магнитных вихрей в предположении, что, в согласии с экспериментом, кристаллическая симметрия Іттт не нарушается и полный магнитный момент на атомах урана равен нулю. Был использован пакет QUANTUMESPRESSO, включающий спин-орбитальные взаимодействия. Результаты расчетов показывают, что, как и в кристалле URu₂Si₂, интегральное значение модуля магнитного момента $\int |\mathbf{M}(\mathbf{r})| d\mathbf{r}$ довольно велико и может достигать нескольких магнетонов Бора на атом урана. В зависимости от использованного в расчетах псевдопотенциала, структуры со скрытым порядком могут оказаться как более, так и менее энергетически выгодными в сравнении с ферромагнитными и антиферромагнитными структурами. Мы также рассчитали картины магнитного рассеяния нейтронов, которые позволят экспериментально различать вихревые структуры с разной магнитной симметрией.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования РФ в рамках Государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН и Программой фундаментальных исследований РАН «Физика конденсированных сред и материалы нового поколения».

- [1] Aoki D. et al. J. Phys. Soc. Jpn. 88, 043702 (2019).
- [2] Ran S. et al. Science 365, 684 (2019).
- [3] Sundar S. et al. Phys. Rev. B 100, 140502 (2019).
- [4] Dmitrienko V. E., Chizhikov V. A. Phys. Rev. B 98, 165118 (2018).

Захваченный магнитный поток в монокристалле Ва_{0.6}К_{0.4}ВіО₃, находящемся в пространственно-неоднородном состоянии

Л. Н. Жерихина¹, Л. С. Успенская², М. Л. Нортон³

 Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, г. Москва, 119333, Россия
Институт физики твердого тела РАН,
Черноголовка, Московская обл., 142432, Россия
³ Университет Маршалла, США

Из гальваномагнитных исследований известно, что при $T^* \approx 17-20$ К ВТСП Ва_{0,6}К_{0,4}ВіО₃ ($T_c = 30$ К) переходит из однородного сверхпроводник-диэлектрик [1, 2]. Магнитооптические исследования проникновения магнитного поля в Ва_{0,6}К_{0,4}ВіО₃ показали, что характер проникновения резко меняется при T^* : выше 17 К магнитный поток беспрепятственно входит и выходит из образца, ниже 17 К наблюдается неоднородное распределение проникающего магнитного потока в виде локальных максимумов магнитного поля, напоминающих вихри, и сильный пиннинг этих неоднородностей. Возможно, распределение магнитного поля связано с образованием в джозефсоновской среде гигантских одиночных вихрей. Размер захваченных вихрей меняется с температурой: с понижением температуры диаметр вихря увеличивается. Такое поведение согласуется с моделью пространственно-неоднородного состояния сверхпроводник-диэлектрик, предложенной в [3].

- Аншукова Н. В., Гинодман В. Б., Головашкин А. И., Жерихина Л. Н., Иванова Л. И., Русаков А. П., Цховребов А. М. ЖЭТФ 97 (5), 1635–1643 (1990).
- [2] Головашкин А. И., Жерихина Л. Н., Кулешова Г. В., Цховребов А. М., Нортон М. Л. ЖЭТФ **129** (4), 684–699 (2006).
- [3] Zherikhina L. N., Tskhovrebov A. M., Klinkova L. A., Balaev D. A., Popkov S. I., Shaikhutdinov K. A., Velikanov D. A. *International J. of Superconductivity* 2014, Article ID 317974, 9 p. (2014). DOI:10.1155/2014/317974

К фазовой диаграмме железосодержащих сверхпроводников

А. Е. Каракозов¹, М. В. Магницкая¹, Б. П. Горшунов², Е. С. Жукова²

¹ Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, г. Троицк (г. Москва), 142190, Россия

² Московский физико-технический институт (НИУ), г. Долгопрудный, 141701, Россия

Коррелированные железосодержащие сверхпроводники (СП) со спин-флуктуационным (СФ) взаимодействием электронных (е) и дырочных (h) зон (далее для краткости ферропниктиды (ФП)) характеризуются универсальной фазовой диаграммой (ФД). Область оптимального (с максимальной T_c) допирования x_{opt} примерно совпадает с областью антиферромагнитного (АФМ) перехода и наиболее сильных межзонных АФМ флуктуаций, взаимодействие с которыми в нефононной теории СП считается доминирующим. Плотность состояний $\gamma_n(x)$ и связанное с ней внутризонное (фононное) спаривание также достигает максимума при хор, поэтому роль фононного и нефононного механизмов в увеличении T_c остается неясной. Построение более полной ФД структуры СП состояния ФП затрудняется большим разбросом данных вследствие того, что в ФП щели 4-5 взаимодействующих СП конденсатов заполняют сравнительно небольшой интервал энергий, сопоставимый с погрешность большинства экспериментальных методик. По нашему мнению для построения такой ФД пригодны только две достоверно установленные универсальные для $\Phi\Pi$ характеристики: трансформация электронной теплоемкости $c_s(x, t)$ увеличение при промежуточных температурах и соответствующее сохранению энтропии уменьшение $c_s(x, t)$ вблизи T_c по мере удаления от АФМ перехода (как на рис. 1 [1]) и сильное отклонение зависимости доминирующей СП щели $\Delta_{\rm L}(x_{out}t)$ от модели БКШ в оптимально допированных ФП (как на рис. 2 [2]). Нами показано, что отмеченные универсальные свойства имеют место в модели двух *h*-зон, взаимодействующих с е-зоной с наименьшей плотностью состояний уе посредством СФ взаимодействия $\lambda_{eh}(x)$ [3]. В этом случае корреляционные эффекты (обратно пропорциональные отношению плотностей состояний взаимодействующих зон: $\lambda_{\rm eh}(x)/\lambda_{\rm he}(x) \sim \gamma_{\rm h}(x)/\gamma_{\rm e}(x))$ максимальны в е-зоне, вследствие чего СП

в h-зонах в основном связана с внутризонным спариванием и изменением $\lambda_h(x) \sim \gamma_h(x)$, а «наведенная» СП в е-зоне — с $\lambda_{eh}(x)$. Поведение $c_s(x, t)$ на рис. 1 объясняется в этой модели сближением е-щели $\Delta_{e}(x, t)$ с доминирующей (L) h-щелью $\Delta_{Lh}(x, t)$ из-за усиления $\lambda_{eLh}(x)$ вблизи АФМ перехода. Показанные на рис. 2 зависимости $\Delta_L(x_{opt}, t) \gg \Delta_S(x_{opt}, t)$ со слабым прямым межзонным взаимодействием λ_{SL} и сильным λ_{LS} (т. е. с $\gamma_S \gg \gamma_L$) не могут быть объяснены в двухзонной модели, так как соотношения щелей и плотностей состояний в зонах L и S противоречат друг другу. В рассматриваемой нами модели «Δ_L(x_{opt}, t)» представляет собой кластер из «слипшихся» $\Delta_{Lh}(x_{opt}, t)$ и $\Delta_{e}(x_{opt}, t)$ щелей $\gg \Delta_{Sh}(x_{opt}, t)$. При этом прямое взаимодействие е- и Sh-зон с $\gamma_{\rm Sh} \gg \gamma_{\rm e}$ полностью соответствует необходимому условию $\lambda_{eSh} \gg \lambda_{She}$. Таким образом, наблюдаемая в ФП аномальная зависимость $\Delta_L(x_{opt}, t)$ и $\Delta_{Sh}(x_{opt}, t)$ на рис. 2 объясняется не прямым, а «косвенным» взаимодействием двух дырочных зон посредством СФ взаимодействия с электронной зоной. Приведенные результаты показывают, что полученная нами на основании анализа экспериментальных данных модель СП состояния семейства Ba(Fe_{1-r}Co_r)₂As₂ с доминирующим внутризонным спариванием [3] и кратко описанная выше возможно применима и для всех ферропниктидов.



- Campanini A. D., Diao Z., Fang L., Kwok W.-K., Welp U., Rydh A. *Phys. Rev. B* 91, 054504 (2015).
- [2] Kuzmichev S. A., Kuzmicheva T. E., Tchesnokov S. N. et al. J. Supercond. Novel Magn. 29, 1111 (2016).
- [3] Karakozov A. E., Magnitskaya M. V., Kadyrov L. S., Gorshunov B. P. *Phys. Rev. B* **99**, 054504 (2019).

Индуцированная магнитным полем бозе-конденсация поляритонов в микрорезонаторах

В. П. Кочерешко¹, Р. Savvidis², L. Bessombes², H. Mariette³

¹ Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, г. Санкт-Петербург, 194021, Россия ² Department of Materials Science & Technology, University of Crete, Heraklion, Greece ³ Inelitut Neel, CNRS, 25 Avenue des Martyrs, 38042, Grenoble, France

E-mail: Vladimir.Kochereshko@mail.ioffe.ru

Спектры циркулярно поляризованной фотолюминесценции (ФЛ) изучались в микрорезонаторах на основе GaAs/AlGaAs во внешних магнитных полях до 11 Тл. Активная область микрорезонатора толщиной $5/2\lambda$ содержала три квантовые ямы GaAs, расположенные в пучностях электромагнитного поля. Из этих микрорезонаторов были изготовлены круглые мезы диаметром от 1 до 40 мкм. Добротность структуры достигла 20 000. Фотолюминесценция возбуждалась импульсами Ті: Sa-лазера с энергией кванта 1.62 эВ, с длительностью импульса 2 пикосекунды. Энергия возбуждения выбиралась так, чтобы и брэгтовские зеркала, и барьерные слои AlGaAs были прозрачными, что обеспечивало эффективное создание экситонов в квантовых ямах.

В спектрах фотолюминесценции всех мез наблюдался набор линий ФЛ с полушириной ~0.5 мэВ, связанных с квантованием экситонных поляритонов в плоскости структуры. Количество линий и энергетическое расстояние между ними определялись диаметром мезы. В магнитных полях, приложенных в геометрии Фарадея, наблюдалось зеемановское расщепление уровней латерального квантования. При относительно слабом уровне оптического возбуждения отношение интенсивностей зеемановских компонент хорошо описывалось больцмановским распределением экситонов на зеемановских подуровнях при температуре эксперимента (5 K).

Для самого низкого энергетического уровня латерального квантования пляритонов увеличение интенсивности оптического возбуждения выше порога при фиксированном магнитном поле (>5 Тл) приводило к резкому перераспределению интенсивности фотолюминесценции в пользу нижнего по энергии зеемановского подуровня. В этом случае величина самого зеемановского расщепления не зависела от интенсивности возбуждения. В результате соотношение интенсивностей ФЛ зеемановских компонент оказывалось существенно не больцмановским. Степень поляризации ФЛ в этих условиях была близка к 100 %.

Подобное небольцмановское распределение можно было получить и при фиксированном оптическом возбуждении в зависимости от магнитного поля. При некотором пороговом значении магнитного поля резкое перераспределение интенсивностей зеемановских компонентов также происходило в пользу более низкой энергетической компоненты со степенью поляризации ~100 %.

Таким образом, при увеличении концентрации экситонов при фиксированном магнитном поле или при увеличении магнитного поля при фиксированной концентрации экситонов все экситоны собирались на самом низком энергетическом уровне, т. е. происходит бозе-эйнштейновская конденсация экситонов. При этом распределение экситонных поляритонов на высших уровнях квантования оставалось Больцманом.

Построенная зависимость химического потенциала ансамбля экситонных поляритонов от магнитного поля показывает, что при достаточно высокой интенсивности возбуждения с увеличением магнитного поля химический потенциал стремится к нулю, что характерно для бозеэйнштейновской конденсации.

Оценка константы электрон-фононного взаимодействия в соединениях Ва_{1-х}К_xBiO₃

А. Е. Лукьянов, В. Д. Неверов, А. В. Красавин, А. П. Менушенков

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», г. Москва, 115409, Россия

Перовскитные соединения на основе BaBiO₃ (BBO), допированные калием (BKBO), являются высокотемпературными сверхпроводниками с критической температурой 34 К в диапазоне допирования $x \in [0.37, 0.5]$. Несмотря на то, что сверхпроводимость в этих соединениях была открыта уже более 30 лет назад, на сегодняшний день все еще нет единого мнения о природе этого явления. В [1] было высказано предположение о существовании в соединениях на основе BaBiO₃ пространственно-разделенной жидкости Бозе–Ферми; согласно этой теории, в системе сосуществуют два типа пространственно-разделенных носителей заряда: локальные электронные пары, ответственные как за перенос заряда в BBO, так и за сверхпроводящие свойства BKBO, и свободные электроны, отвечающие за фазовый переход металл–изолятор. Важной частью этого предположения является наличие в BKBO сильного электрон-фононного взаимодействия. Расчет значения константы электрон-фононного взаимодействия является целью настоящей работы.

Для расчета данной величины необходима модель, способная учесть электрон-фононное взаимодействие. Простейшей моделью для решения такой задачи является модель Холстейна, гамильтониан которой, определенный на простой кубической решетке, имеет вид:

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} c_{i,\sigma}^{+} c_{j,\sigma} + g \sum_{i} (b_{i}^{+} + b_{i}) (n_{i} - 1) + \omega_{0} \sum_{i} b_{i}^{+} b_{i} + \mu \sum_{i} n_{i}, \qquad (1)$$

где $c_{i,\sigma}^+(c_{i,\sigma})$ — операторы рождения (уничтожения) электрона со спином σ на узле i; $n_i = n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}$ — оператор числа частиц; $b_i^+(b_i)$ — операторы рождения (уничтожения) фонона; $t_{i,j}$ определяет амплитуду перескоков между решеточными узлами i и j; g задает величину константы электрон-фононного взаимодействия; ω_0 — фононная частота.

Напрямую решить задачу (1) довольно трудоемко. Задача может быть решена с использованием метода DMFT, основанного на открытии [2], что в случае большой размерности пространства собственно энергетическая часть электрона не зависит от импульса k, но только от частоты іш. В основе метода DMFT лежит учет локальных взаимодействий и корреляций, и исходная система может быть преобразована к совокупности небольшой системы (в простейшем случае одного узла), для которой все виды взаимодействия учитываются точно, и «ванны», определяемой самосогласованно в цикле DMFT и представляющей остальную часть системы в виде некоторого эффективного внешнего потенциала. Полученная система эквивалента однопримесной модели Андерсона [3], которая может быть решена методом точной диагонализации. Результатом выполнения цикла DMFT являются собственно энергетическая составляющая и функция Грина модели (1), которые могут быть использованы для определения фазового состояния системы, а также для расчета эффективной константы электрон-фононного взаимодействия:

$$\lambda_{\rm eff} = \frac{-\partial \Sigma(\omega)}{\partial \omega} \bigg|_{\omega=0}.$$
 (2)

На рис. 1 показана фазовая диаграмма соединения ВКВО в координатах допирование – величина электрон-фононного взаимодействия. Параметры гамильтониана (1) были взяты из [4].



Рис. 1

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 18-02-40001 мега).

- Menushenkov A. P., Kuznetsov A. V., Klementiev K. V., Kagan M. Yu. J. Supercond. Nov. Magn. 29 701 (2016).
- [2] Metzner W., Vollhardt D. Phys. Rev. Lett. 62 324 (1989).
- [3] Anderson P. W. Phys. Rev. 124, 41 (1961).
- [4] Khazraie A., Foyevtsova K., Elfimov I., Sawatzky G. A. Phys. Rev. B 97 075103 (2018).

К вопросу о механизме сверхпроводимости в ВТСП на основе ВаВіО₃

А. П. Менушенков¹, А. А. Ярославцев^{1,2}, А. В. Кузнецов¹, А. А. Иванов¹, А. В. Красавин¹

¹ Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», г. Москва, 115409, Россия ² European XFEL (X-ray free electron laser) GmbH, 22869 Schönefeld, Germany

Новое понимание механизма высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в купратах было недавно предложено в работе, опубликованной в ноябре 2019 г. С. Yang и др. [1]. Авторы наблюдали квантовые ћ/2е осцилляции и нулевое холловское сопротивление и указали на основную роль фазовой когерентности в способности электронных пар переносить сверхпроводящий ток, исключив при этом сценарии, основанные на переносе заряда одиночными электронами. Эти новые экспериментальные результаты близки к нашему пониманию механизма сверхпроводимости в другом семействе сверхпроводящих оксидов на основе кубического перовскита BaBiO₃, легированного калием или свинцом (висмутатах) [2]. Эти материалы продолжают привлекать большое внимание исследователей из-за сходства основных свойств с высокотемпературными купратами, с одной стороны, и изотропной немагнитной природой, с другой, что делает их хорошей модельной системой для установления связи зарядового упорядочения со сверхпроводящими свойствами [3]. На основании наших многолетних EXAFS исследований этих соединений мы установили, что решетка перовскита сверхпроводников Ba(K)BiO₃ и ВаВі(Рb)О3 [4,5] обеспечивает когерентность движения локальных пар носителей заряда, как в [1], и способствует появлению сверхпроводящего состояния в соответствии с предложенной нами моделью пространственно разделенной ферми-бозе смеси [2]. Позднее сценарий пространственно разделенной ферми-бозе смеси был распространен и на другие классы высокотемпературных сверхпроводников [6].

Основное состояние BaBiO₃ обычно связывают с волной зарядовой плотности (CDW) (см. [7] и ссылки к ней). Тем не менее простой сценарий CDW не может объяснить наблюдение двух энергетических щелей:

оптической и активационной, аномалий в спектрах комбинационного рассеяния и оптической проводимости, а также аномально высокую концентрацию носителей заряда, равную концентрации элементарных ячеек [8]. Поскольку свободных электронов в BaBiO₃ нет, то проводимость может быть обусловлена только локальными электронными парами [2, 8]. Основываясь на этих наблюдениях и результатах наших предыдущих экспериментов, мы считаем, что основное состояние BaBiO₃ — это новое квантовое состояние в виде волны парной зарядовой плотности (PDW) [2].

Для получения прямых экспериментальных доказательств правильности выводов нашей модели мы подготовили ряд уникальных экспериментов по резонансной рентгеновской спектроскопии поглощения на K-О и M_5 -Ві краях поглощения на Европейском рентгеновском лазере на свободных электронах EXFEL (Гамбург, Германия) и синхротронном источнике PETRA III DESY (Гамбург, Германия).

На основании этих экспериментальных результатов и нашего моделирования [9] мы намерены получить подтверждение основного PDW состояния в BaBiO₃ и прояснить механизм ВТСП как в висмутатах, так и в купратах [10].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 18-02-40001 мега).

- [1] Yang C., Liu Y., Wang Y. et al. *Science* **366**, 1505 (2019).
- [2] Menushenkov A. P., Kuznetsov A. V. et al. J. Supercond. Nov. Magn. 29, 701 (2016).
- [3] Harris D. T., Campbell N. G., Di C. et al. Phys. Rev. B 101, 064509 (2020).
- [4] Menushenkov A. P., Klementev K. V., Konarev P. V. et al. *JETP Lett.* 67, 1034 (1998).
- [5] Menushenkov A. P., Klementev K. V. J. Phys.: Condens. Matter 12, 3767 (2000).
- [6] Kagan M. Yu., Turlapov A. V. Physics Uspekhi 62, 215–248 (2019).
- [7] Nicoletti D., Casandruc E., Fu D. et al. PNAS 114, 9020 (2017).
- [8] Uchida S., Kitazawa K., Tanaka S. Phase Transit. 8, 95 (1987).
- [9] Zhumagulov Ya. V., Krasavin A. V. et al. JETP Lett. 110, 31 (2019).
- [10] Menushenkov A. P., Kuznetsov A. V., Chernikov R. V. et al. *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques* **7**, 407 (2013).
Влияние конфигурации дефектов на импульсное намагничивание ВТСП

А. Н. Мороз, А. Н. Максимова, В. А. Кашурников, И. А. Руднев

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», г. Москва, 115409, Россия

Континуальным методом Монте-Карло проведено моделирование динамики вихрей Абрикосова высокотемпературного сверхпроводника (ВТСП) $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+x}$ под действием серии из трех импульсов магнитного поля трех различных форм и разных амплитуд. Рассматривались двумерные образцы ВТСП с точечными дефектами, расположенными в различных периодических пространственных конфигурациях, таких как квадратная и треугольная решетки и их конформные преобразования, а также образец со случайным распределением того же количества дефектов.

Рассчитаны зависимости захваченного магнитного поля от времени, а также усредненные профили индукции магнитного поля внутри образцов. Продемонстрированы скачкообразные особенности захвата потока, характерные для образцов с периодическим распределением дефектов и связанные с поведением вихрей вблизи границы сверхпроводника, а именно формированием потенциального барьера из закрепленных дефектами вихрей и разрушением этого барьера при определенной пороговой величине внешнего поля. Получены мгновенные распределения вихрей в различные моменты времени действия импульса, выявлены отличия в захвате потока образцами с разными распределениями дефектов.

Получены выходящие на насыщение зависимости захваченного поля от амплитуды импульсов, определены величины полей насыщения образцов. Показано, что данные поля растут с увеличением концентрации дефектов в пределах рассмотренных значений. На основании полученных зависимостей, а также сравнения профилей индукции захваченного поля образцов с различными распределениями дефектов определены образцы с наиболее оптимальными свойствами для применения в качестве магнитов в захваченным потоком. Так, конформные отображения треугольной и квадратной решеток показали почти двукратное преимущество перед прямыми решетками, в то время как треугольная решетка дефектов показала наименьший захват потока.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 18-02-00278-а и 19-32-90279).

Interplay of magnetism and superconductivity in the system Eu_{1-x}La_xFeAs₂

V. A. Sidorov¹, J. Guo², Z. Ren², G. Chen², L. Sun²

 ¹ Vereshchagin Institute of High Pressure Physics, Russian Academy of Sciences, 108840 Troitsk, Moscow, Russia
 ² Institute of Physics, National laboratory for Condensed matter Physics, Chinese Academy of Sciences, 100190 Beijing, China

Among iron pnictides EuFeAs₂ has a unique monoclinic crystal structure and the low temperature magnetism of Eu and Fe-sublattices which develops below $T_N = 40$ K and $T_m = 110$ K respectively. Through the La-doping the Eu and Fe-based magnetism weakens, T_N and T_m decrease and superconductivity appears in $Eu_{1-x}La_xFeAs_2$ system with T_c up to 10 K [1]. We have studied the effect of high pressure on the superconductivity and magnetism of $Eu_{1-x}La_xFeAs_2$ compounds with x = 0, 0.1 and 0.15. The P-T diagrams of these compounds were built based on the electrical resistivity and heat capacity measurements in the temperature range 2-300 K and up to 5 GPa. High pressure produces opposite effect on the T_N and T_m . While T_m decreases up to the maximum pressure of present experiment, T_N increases at high pressure. Superconductivity with $T_c = 8$ K for x = 0.1 and $T_c = 10$ K for x = 0.15 is completely suppressed above 3 GPa (x = 0.1) and 5 GPa (x = 0.15). Thus the Eubased magnetism and superconductivity compete under pressure. Superconductivity was not found up to 5 GPa for EuFeAs₂ and most probably it will not appear at higher pressure based on our experimental evidence of the increase of T_N with pressure. It is interesting that the characteristic energy scales of the competing ground states in Eu_{1-x}La_xFeAs₂ system are very close to each other. At the critical pressures where T_c of the samples with x = 0.1 and x = 0.15is completely suppressed the magnetic transition temperature T_N increases by ΔT_N which is nearly equal to T_c for corresponding compound at ambient pressure.

 Yu J., Liu T., Pan B.-J., Ruan B.-B., Wang X.-C., Mu Q.-G., Zhao K., Chen G.-F., Ren Z.-A. *Science Bulletin* 62, 218 (2017).

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ

Инвариантность Вольхардта в киральных магнетиках.

А. М. Белемук¹, С. М. Стишов^{1,2}

Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, г. Троицк (г. Москва), 142190, Россия Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, г. Москва, 119333, Россия

Исследованы условия возникновения инвариантности Вольхардта в киральных магнетиках на основе классического метода моделирования Монте-Карло. Рассматривалась спин-решеточная модель, учитывающая обменное взаимодействие и взаимодействие Дзялошинского-Мории (ДМ) для спинов во внешнем магнитном поле. Показано, что существует точка пересечения температурных зависимостей теплоемкостей при вариации магнитного поля. Точка пересечения существует в ограниченном диапазоне магнитных полей и при достаточно большой величине параметра взаимодействия ДМ, когда киральные флуктуации доминируют над ферромагнитными. Анализ профиля брэгговской интенсивности не показывает никакой особенности в поведении спиновых конфигураций в этой точке, распределение спинов близко к спин-поляризованному состоянию. Для меньших значений параметра взаимодействия ДМ единой точки пресечения кривых теплоемкости не существует, при этом пологий максимум в зависимости теплоемкости от температуры может быть интерпретирован как размытый фазовый переход второго рода.

Критическая динамика бозонной системы вблизи квантового фазового перехода

М. Г. Васин

Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, г. Троицк (г. Москва), 142190, Россия

E-mail: dr_vasin@mail.ru

Известно, что квантовые фазовые переходы по своей природе являются динамическими [1]. Однако в настоящее время подробно описана лишь недиссипативная квантовая динамика, применение которой, в случае сложной многочастичной системы, ограниченно временем когерентности. При этом остается открытым вопрос, каким образом диссипация влияет на критическое поведение вблизи квантовой критической точки (ККТ). А такое влияние существует. На это, например, указывает экспериментально обнаруженное непрерывное изменение критических индексов, претерпевающих фазовый переход квантовых систем при приближении к T = 0 [2–5].

В данной работе предлагается общий подход, позволяющий рассматривать как адиабатические, так и диссипативные процессы в многочастичных системах, подчиняющихся статистике Бозе–Эйнштейна, посредством единой теории, основанной на технике Келдыша–Швингера. Используя этот подход в критической динамике вблизи ККТ можно выявить три различные критические моды: адиабатическую квантовую моду (релятивистская квантовая механика), диссипативную классическую моду (классическая критическая динамика) и диссипативную квантовую критическую моду [6]. Показано, что при переходе от высокотемпературного режима, в котором преобладают тепловые флуктуации, к квантовому режиму, в котором остаются только квантовые флуктуации, система приобретает эффективную размерность $d + z\Lambda(T)$, где z — динамический показатель, а $\Lambda(T)$ увеличивается от 0 до 1 при приближении температуры к нулю.

Таким образом, предложенная теория дает единую картину квантовых критических явлений, учитывающую как классическую, так и квантовую диссипацию, и позволяет описать наблюдаемый вблизи ККТ квантово-классический кроссовер критических показателей (см. рис. 1, где T/ω_0 — отношение энергии тепловых флуктуаций к энергии нулевых колебаний системы).



Рис.1

- [1] Стишов С. М. УФН 174:8, 853-860 (2004).
- [2] Erkelens W. A. et al. Europhys. Lett. 1, 37–44 (1986).
- [3] Steijger J. J. M. et al. J. Magn. and Magn. Mat. 31-34, 1091-1092 (1983).
- [4] Stishov S. M. et al. Phys. Rev. B 91, 144416 (2015).
- [5] Carneiro F. B., Bittar E. M. et al. arXiv:1912.05669v1 (2019).
- [6] Vasin M. G., Ryzhov V. N., Vinokur V. M. Scientific Reports 5, 18600 (2015).

Теоретическое (*ab initio*) моделирование зависимости градиентов электрического поля в кристаллах (Zn, Cd) от температуры

А. В. Николаев^{1,3}, Н. М. Щелкачёв^{2,3,5}, Д. А. Саламатин^{2,4}, А. В. Цвященко²

¹ Научно-исследовательский институт ядерной физики МГУ, г. Москва, 119991, Россия

² Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, г. Троицк (г. Москва), 142190, Россия

³ Московский физико-технический институт (НИУ), г. Долгопрудный, 141701, Россия

 ⁴ Лаборатория ядерных проблем им. В. П. Джелепова, Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Московская обл., 141980, Россия
 ⁵ Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, 620075, Россия

На основе abinitio расчетов зонной структуры, сформулирован общий теоретический метод для описания температурной зависимости градиента электрического поля в кристаллах. В методе используется процедура усреднения мультипольной компоненты электронной плотности $(l \neq 0)$, находящейся внутри сферы, по ее колебаниям вместе с находящимся в ее центре ядром. В результате усреднения каждая фурье-компонента ($K \neq 0$) на поверхности сферы уменьшается на величину фактора Дебая-Воллера [exp(-W)]. Градиент электрического поля, выраженный через сумму Фурье компонент, в большинстве случаев уменьшается с ростом температуры (Т), но при некоторых условиях, вследствие изменения баланса между вкладами с разным знаком, может также возрастать с Т. Метод применялся для расчетов температурной зависимости градиентов электрического поля цинка и кадмия, кристаллизованных в гексагональную решетку. Для расчетов по данной схеме очень важной является температурная зависимость среднеквадратичных отклонений (СКО) ядра. Среднеквадратичные отклонения можно получить экспериментальным образом или теоретическим — с помощью фононных мод в гармоническом приближении. Для Zn данные по СКО брались из дифракционных экспериментов с монокристаллическим образцом. Для обоих металлов (Zn, Cd) среднеквадратичные отклонения также были рассчитаны в рамках процедуры возмущения пакета программ Quantum Espresso. Используя экспериментальные данные для среднеквадратичных отклонений Zn, мы получили очень хорошее соответствие с известной экспериментальной температурной зависимостью его градиента. В рамках гармонического приближения с данными по среднеквадратичным отклонениям, полученными с помощью Quantum Espresso, убывание градиентов с температурой Zn и Cd оказывается завышенным. Наши расчеты показывают, что в температурной зависимости градиентов большую роль играют эффекты ангармонизма.

 Nikolaev A. V., Chtchelkatchev N. M., Salamatin D. A., Tsvyashchenko A. V. Phys. Rev. B 101, 064310 (2020).

Few-body approximation in atomic and molecular physics

S. A. Pozdneev

P. N. Lebedev Physical Institute, Department Quantum Radiophysics, Laboratory of Photochemical Processes, Moscow 119924, Russia

E-mail: pozdneev@sci.lebedev.ru

Synopsis. Electron scattering by atoms and molecules, multiple scattering approximation, Faddeev–Yakubovsky equations

The main difficulties in the research of fewbody problems are bounded with the really many-channels and multidimensional nature of the these problem, impossible applied many well known theories such as adiabatic, impulse, coupled channels, etc.

For this reason we proposed new method for the investigation of the different few-body processes used the mathematically rigorous formalism based on the treatment of collision processes as many body processes, using Faddeev–Yakubovsky equations [1] (FYE) in integral and differential forms. In particular techniques based on FYE have been used successfully in studies of the dynamics of few-particle systems (boundstate properties and elastic, reactive and breakup scattering) [2]. That is why we applied this formalism for the theoretical investigation of the dynamics of the different processes in atomic and chemical physics. The following results are presented and discussed [2].

Calculation of low-energy characteristics in scattering processes like scattering length, effective range parameter, amplitude, cross section etc. in processes p + d, n + d, p + He, electron + molecule etc. for the verification of the fundamental principal of the atomic and chemical interaction.

The theoretical investigation of the quasibound, virtual and resonances states in few-body systems such as p + d, n + d, e + H, e + He, p + H, p + He.

Scattering the electrons, protons on the fewcenters targets (atoms, molecules etc.) and the estimation the role of many center scattering in these cases.

The calculations of the excitation, rearrangement and ionization H and He atoms and its ions by the electrons and protons impact.

The investigation of the influence of the long range part of pair-wise potentials in FYE on the scattering in few-body systems.

The study on the correlation between lowenergy characteristic in fewbody scattering.

Scattering electrons by two atomic (H₂, HD, D₂, N₂, Cl₂, F₂, Br₂, J₂, HF, DF, HJ, DJ, HCl, DCl, HBr, DBr,RbCl, RbBr, CsCl, CsBr, KI) and few atomic molecules (CO₂, O₃, NF₃).

The investigation the theory of quasimolecule (electron + molecule), the ionization mechanism in quasimolecule and the main characteristics of quasimolecule autoionization states, determination of the bound between these states, the resonance states, potential energy surface (PES) and dynamics of the chemical reaction.

The scattering atoms with two (O + CS, H + H₂, O + N₂, O + O₂) and few atomic (O + CF₃J, O + CS₂, O + OSC, HCl + HCl) molecules, the many particles interactions, orientations of the reacting molecules etc. on the reactions dynamic, the confection between the interactions in FYE and PES, the investigation of the resonances, virtual states and threshold phenomena in chemical reactions.

The studding the unusual dynamical threshold phenomena in chemical reactions such as Efimov states based on FYE. This research may be obtain the information of the reaction mechanism, PES etc. and may have a strong influence on the scattering observable. Hence the careful studding of these states may be provide better understanding of the control and management of the chemical reaction processes.

The investigations of the possibility of the analytical solution of FYE in the different approximations, the construction of the solvable model in FYE approach are presented.

- Faddeev L. D., Merkuriev S. P. Quantum scattering theory for several particles systems. Kluwer, London (1983).
- [2] Pozdneev S. A. Application on the quantum theory of few-body scattering to the calculation of the different processes in nuclear, atomic and molecular physics. Moscow, Janus-K. (2001).

Исследование немарковской спиновой динамики на основе подхода Попова–Федотова

С. В. Ремизов^{1,2}, А. А. Елистратов¹, Ю. Е. Лозовик^{1,3}

¹ Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова (ВНИИА), г. Москва, 127055, Россия

² Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, г. Москва, 125009, Россия

> ³ Институт спектроскопии РАН (ИСАН), г. Троицк, 108840, Россия

Неабелева природа спиновых операторов сильно осложняет использование квантово-полевого подхода к описанию квантовых двухуровневых систем. Для преодоления этой трудности различными авторами был предложен ряд подходов. В данной работе мы предлагаем дальнейшее развитие метода, основывающегося на формализме Попова-Федотова [1], идея которого состоит в замене спиновых операторов двумя фермионными для реализации правильных спиновых коммутационных соотношений и последующем введении мнимого электрохимического потенциала для компенсации вклада в статсумму из-за изменения размерности фоковского базиса. В результате этого функция распределения фермионов формально становится комплексной. Следующий шаг в развитии этого подхода предложили Киселев и Опперманн на основе формализма Швингера-Келдыша [2]. Мы предлагаем дальнейшее развитие этой техники путем введения двухвременных комплексных квантовых полей, чьи средние играют роль функций Грина для спиновых переменных. В качестве естественного пути для построения такого объекта мы используем метод континуального интеграла и преобразование Хаббарда-Стратоновича. Это позволяет использовать стандартную диаграммную технику и производить суммирование диаграммных рядов. В качестве тестовой задачи для предлагаемого подхода мы рассмотрели спин-бозонную модель, в рамках которой мы вычислили в низшем порядке по взаимодействию поправку к среднему спину и кумулянту спин-спин за счет взаимодействия спина и бозонного окружения произвольного вида. Для наиболее типичного случая омического окружения мы показали, что в пределе высоких температур, больших, чем энергия спина, в частотном представлении поправка к кумулянту спин-спин δ -коррелирована. В противоположном предельном случае низких температур эта тепловая поправка становится экспоненциально малой и появляется другой вклад. Он имеет максимум на частоте, близкой к энергии спина, что приводит к немарковскому поведению кумулянта, которое в временном представлении имеет вид затухающих колебаний, как это показано на рис. 1. Учет этого эффекта может быть важен при симуляции быстрых процессов, например, гейтов при выполнении вычислении на квантовых компьютерах.



Рис. 1. Поправка к кумулянту спин-спин, нормированная на константу взаимодействия в пределе низких температур во временном представлении. На вклейке в частотном представлении показан переход к квантовому случаю

- [1] Popov V. N., Fedotov S. A. Zh. Eksp. Teor. Fiz. 94, 183 (1988).
- [2] Kiselev M. N., Feldmann H., Oppermann R. Eur. Phys. J. B. 22, 53 (2001).

О механизме универсальных флуктуаций кондактанса

В. В. Бражкин¹, И. М. Суслов²

¹ Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, г. Троицк (г. Москва), 142190, Россия ² Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, г. Москва, 119334, Россия

Универсальные флуктуации кондактанса обычно наблюдаются в виде апериодических осцилляций в магнетосопротивлении тонких проволочек при изменении магнитного поля В. Если такие осцилляции являются полностью случайными на масштабах больших ζ_B , то их фурье-анализ должен обнаруживать спектр белого шума на частотах, меньших $1/\zeta_B$. Альтернативный сценарий возникает при сопоставлении с результатами для одномерных систем: согласно ему, такие осцилляции определяются суперпозицией несоизмеримых гармоник, и их спектр должен содержать дискретные частоты. Аккуратный фурье-анализ классического эксперимента Вебба и Вашбурна обнаруживает чисто дискретный спектр в согласии со второй концепцией. Однако в целом его форма близка к спектру дискретного белого шума, который по свойствам близок к непрерывному.

Асимметричная туннельная проводимость и неферми-жидкостное поведение сильно коррелированных ферми-систем

В. Р. Шагинян

Петербургский институт ядерной физики, НИЦ «Курчатовский институт», г. Гатчина, 188300, Россия

Туннельная дифференциальная проводимость является чувствительным инструментом для экспериментальной проверки неферми-жидкостного поведения сильно коррелированных ферми-систем. В случае обычных металлов из теории Ландау ферми-жидкости следует, что дифференциальная проводимость является симметричной функцией приложенного напряжения V. Это связано с тем, что симметрия между частицами и дырками сохраняется в состоянии ферми-жидкости Ландау. Когда сильно коррелированная ферми-система оказывается вблизи топологического ферми-конденсатного квантового фазового перехода, ее свойства ферми-жидкости Ландау исчезают, так что симметрия дырка-частица и инвариантность относительно обращения времени нарушаются, делая дифференциальную туннельную проводимость асимметричной функцией приложенного напряжения И. Эта асимметрия может наблюдаться, когда сильно коррелированный металл находится в своем нормальном, сверхпроводящем или псевдощелевом состояниях. При наложении магнитного поля металл переходит в состояние ферми-жидкости Ландау, и дифференциальная туннельная проводимость становится симметричной функцией приложенного напряжения V. Такое поведение было предсказано в 2005 году. И хорошо согласуется с недавними экспериментальными наблюдениями [1-3].

- [1] Shaginyan V. R. JETP Lett. 81, 222 (2005).
- [2] Shaginyan V. R., Amusia M. Ya., Msezane A. Z., Popov K. G. *Phys. Rep.* 492, 31 (2010).
- [3] Shaginyan V. R., Msezane A. Z., Stephanovich V. A., Japaridze G. S., Kirichenko E. *Physica Scripta* 94, 065801 (2019).

НИЗКОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ. ПЛЕНКИ. ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ИЗОЛЯТОРЫ

Вклад дислокаций волны зарядовой плотности в магнетосопротивление квазиодномерного вейлевского полуметалла (TaSe₄),I

И. А. Кон, С. Г. Зыбцев, А. П. Орлов, С. В. Зайцев-Зотов

ИРЭ им. В. А. Котельникова РАН, г. Москва, 125009, Россия

Исследовано влияние магнитного поля на линейную и нелинейную проводимость квазиодномерного полуметалла Вейля с волной зарядовой плотности (ВЗП) (TaSe₄)₂I. Магнетосопротивление во всех известных режимах движения ВЗП (линейная проводимость, крип, скольжение, «сверхпроводимость Фрёлиха») положительно, квадратично, мало и не превышает долей процента, в отличие от данных работы [1]. Аналогичные измерения были также проведены на образцах, профилированных сфокусированными ионными пучками таким образом, чтобы движение ВЗП в них сопровождалось зарождением и движением дислокаций ВЗП. В таких образцах в магнитных полях $B \le 4$ Тл на фоне положительного квадратичного магнетосопротивления возникло отрицательное. Это отрицательное магнетосопротивление возникает только в режиме нелинейной проводимости и исчезает в режиме линейной проводимости, т. е. оно связано с движением ВЗП. Мы предполагаем, что отрицательное магнетосопротивление связано с эффектами слабой локализации на петлях дислокаций, обеспечивающих проскальзывание фазы при скольжении ВЗП, так как в ядре дислокаций ВЗП за счет подавления щели Пайерлса происходит восстановление полуметаллического состояния. Полученные результаты стравят вопрос об условиях наблюдения аксионной аномалии в полуметаллах Вейля в состоянии Пайерлса [1].

Работа поддержана грантом РНФ № 16-12-10335.

[1] Gooth J., Bradlyn B., Honnali S. et al. *Nature* **575**, 315 (2019).

Обычная и вынужденная диффузия скореллированных примесей серы и созданный ими новый тип пиннинга волны зарядовой плотности в кристаллах ромбического TaS₃

В. Е. Минакова, А. М. Никитина, С. В. Зайцев-Зотов

Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, г. Москва, 125009, Россия

Обнаружено, что в кристаллах ромбического TaS₃ (o-TaS₃), подвергшихся закалке во время синтеза, может наблюдаться новый тип пиннинга волны зарядовой плотности (ВЗП) [1]. Прежде всего этот пиннинг характеризуется своей нестабильностью — он может быть почти полностью устранен с помощью многократных низкотемпературных термоциклирований образца в области температур, ниже температуры пайерлсовского перехода T < T_P, что связано с выходом дефектов закалки из кристалла. При этом уменьшение концентрации дефектов закалки *п* проявляется в коррелированном изменении основных характеристик качества кристалла — величин *T_P* и порогового поля начала скольжения ВЗП *E_T* с ростом числа низкотемпературных термоциклирований *N*. Установлено, что удаление дефектов из кристалла происходит вследствие их вынужденной диффузии, вызванной сильным взаимодействием с ВЗП. А сам процесс вынужденной диффузии наиболее интенсивен в те моменты, когда меняется состояние ВЗП — при термоциклировании в области пайерлсовского перехода, где ВЗП формируется [2], и особенно в области низких Т, где из-за изменения волнового вектора [3] и условий экранировки [4] сильно меняются конфигурация ВЗП и ее упругие свойства.

Благодаря изучению вызванной вынужденной диффузией эволюции T_P и E_T с ростом N определены законы, описывающие новый тип пиннинга ВЗП: сдвиг T_P при внесении дефектов $\Delta T_P \propto n$ и $E_T \propto n$, а значит $\Delta T_P \propto E_T$. Эти законы отличаются от законов, характерных для обычного локального пиннинга ВЗП, осуществляемого одиночными неупорядоченными центрами как сильного ($\Delta T_P \propto \sqrt{n}$ и $E_T \propto n$), так и слабого ($\Delta T_P \propto n$ и $E_T \propto n^2$) пиннинга [5], и закона $T_P \propto \sqrt{E_T}$, справедливого для обоих случаев локального пиннинга. Наблюдение обычной (без термоциклирования) диффузии дефектов закалки при T = 300 К и оценка ее коэффициента диффузии $D \sim 10^{-12}$ см²/с и высоты энергетического барьера диффузии ~0.5 эВ позволили прояснить природу нового типа пиннинга ВЗП. Этот пиннинг осуществляется скоррелированными с ВЗП атомами избыточной (по сравнению со стехиометрическим составом) серы, которые находятся в ван-дер-ваальсовской щели. Корреляция примесей серы происходит благодаря фриделевским осцилляциям, возникающим в квазиодномерных проводниках, и сильному взаимодействию с ВЗП. В результате чего примеси серы перераспределяются вдоль кристалла для минимизации энергии взаимодействия с ВЗП.

Такое скоррелированное с ВЗП расположение примесей серы объясняет обнаруженные ранее особенности нового пиннинга [1]: слабое размытие пайерлсовского перехода при сильном изменении величин Т_Р и E_T , а также линейную взаимосвязь ΔT_P и E_T . А именно: оно приводит к более сильному повышению значений E_T , чем при случайном расположении примесей, поскольку создаваемая ими упорядоченная «структура» соизмерима с ВЗП. А значит, пиннинг тем сильнее, чем больше концентрация таких примесей, то есть $E_T \propto n$, как в случае сильного пиннинга. С другой стороны, скоррелированное расположение примесей с ростом их концентрации приводит лишь к понижению Т_Р без существенного размытия пайерлсовского перехода, поскольку (вследствие все той же соизмеримости) не влечет существенное ослабление когерентности ВЗП, являющееся причиной сглаживания перехода [6]. Поэтому зависимость $\Delta T_P(n)$ ближе к случаю слабого, а не сильного пиннинга, т. е. $\Delta T_P \propto n$. В результате, взаимодействию скоррелированных примесей с ВЗП соответствует закон $\Delta T_P \propto E_T$.

Следует отметить, что низкая высота энергетического барьера диффузии, способствующая большой эффективности диффузии, обусловлена цепочечной структурой квазиодномерных проводников. Это позволяет предположить, что обнаруженные эффекты могут быть присущи широкому классу соединений, имеющих кристаллическую структуру, в которой слои или цепочки соединены взаимодействием Ван-дер-Ваальса.

- [1] Минакова В. Е., Никитина А. М., Зайцев-Зотов С. В. *ZhETP Lett.* **110**, № 1, 62 (2019).
- [2] Monceau P. Adv. Phys. 61, 325 (2012).

- [3] Inagaki K., Tsubota M., Higashiyama K., Ichimua K., Tanda S., Yamamoto K., Hanasaki N., Ikeda N., Nogami Y., Ito T., Toyokawa H. J. Phys. Sos. Jpn 77, 093708 (2008).
- [4] Артеменко С. Н., Покровский В. Я., Зайцев-Зотов С. В. ЖЭТФ 110, 1069 (1996).
- [5] Lee H. A., Rice T. M., Anderson P. W. Solid State Comm. 14, 703 (1974).
- [6] Mutka H., Bouffard S., Mihály G., Mihály L. J. Physique Lett. 45, L1-13 (1984).

Межслоевая проводимость в слоистых металлах в углах Ямаджи в магнитном поле

Т. И. Могилюк¹, П. Д. Григорьев²

¹ НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, 123182, Россия ² Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау, г. Черноголовка, 142432, Россия

Угловые колебания межслоевого магнетосопротивления — характерная черта сильно анизотропных слоистых проводников, дающие ценные сведения об их электронных свойствах. Угловые осцилляции магнетосопротивления часто используются для изучения таких слоистых материалов, как органические металлы [1–7], высокотемпературные сверхпроводники [8–12], гетероструктуры [13], интеркалированный графит и т. д.

Угловые осцилляции магнетосопротивления впервые были обнаружены [14] в квазидвумерном сильно анизотропном органическом металле. Первое объяснение [15] таких осцилляций основывалось на геометрических особенностях поверхности Ферми гофрированного цилиндра, соответствующего сильно анизотропной электронной дисперсии.

Амплитуда осцилляций квантового магнитосопротивления уменьшается в так называемых углах Ямаджи, т. е. в максимумах угловых осцилляций магнитосопротивления. Для квадратичной изотропной внутрислоевой дисперсии электронов Ямаджи обнаружил, что минимумы межслоевой проводимости относятся к нулям функции Бесселя $J_0(k_F d \lg \theta)$, k_F — внутрислоевой импульс Ферми, d — межслоевое расстояние, θ угол между приложенным магнитным полем и нормалью к проводящим плоскостям. Имея данные о минимумах межслоевой проводимости, можно оценить импульс Ферми слоистых металлов. В рамках самосогласованного борновского приближения нами найдены значения межслоевой проводимости в углах Ямаджи на основе результатов работы [16].

Работа осуществлена при поддержке грантов РФФИ №№ 18-02-01022, 18-02-00280, 19-02-01000, 21-52-12027.

- [1] Kartsovnik M. V. Chem. Rev. 104, 5737 (2004).
- [2] Singleton J. Rep. Prog. Phys. 63, 1111 (2000).
- [3] Kartsovnik M. V., Peschansky V. G. Low Temp. Phys. 31, 185 (2005) [Fiz. Nizk. Temp. 31, 249 (2005)].
- [4] Ishiguro T., Yamaji K., Saito G. Organic Superconductors, 2nd ed. (Springer-Verlag, Berlin, 1998).
- [5] Wosnitza J. Fermi Surfaces of Low-Dimensional Organic Metals and Superconductors (Springer-Verlag, Berlin, 1996).
- [6] Brooks J. S., Williams V., Choil E., Graf D., Tokumoto M., Uji S., Zuo F., Wosnitza J., Schlueter J. A., Davis H., Winter R. W., Gard G. L., Storr K. New J. Phys. 8, 255 (2006).
- [7] The Physics of Organic Superconductors and Conductors. Edited by A. G. Lebed. Springer Series in Materials Science, Vol. 110 (Springer-Verlag, Berlin, 2008).
- [8] Hussey N. E., Abdel-Jawad M., Carrington A., Mackenzie A. P., Balicas L. Nature (London) 425, 814 (2003).
- [9] Abdel-Jawad M., Kennett M. P., Balicas L., Carrington A., Mackenzie A. P., McKenzie R. H., Hussey N. E. Nat. Phys. 2, 821 (2006).
- [10] Abdel-Jawad M., Analytis J. G., Balicas L., Carrington A., Charmant J. P. H., French M. M. J., Hussey N. E. *Phys. Rev. Lett.* **99**, 107002 (2007).
- [11] Kennett M. P., McKenzie R. H. Phys. Rev. B 76, 054515 (2007).
- [12] Helm T., Kartsovnik M. V., Sheikin I. et al. Phys. Rev. Lett. 105, 247002 (2010).
- [13] Kuraguchi M., Ohmichi E., Osada T., Shiraki Y. Synthetic Met. 133–134, 113 (2003).
- [14] Kartsovnik M. V., Kononovich P. A., Laukhin V. N., Shchegolev I. F. JETP Lett. 48, 541 (1988).
- [15] Yamaji K. J. Phys. Soc. Jpn. 58, 1520 (1989).
- [16] Grigorev P. D., Mogilyuk T. I. Phys. Rev B 90, 115138 (2014).

Автолокализация носителей в монослое черного фосфора

В. Д. Неверов, А. Е. Лукьянов, А. В. Красавин

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», г. Москва, 115409, Россия

В последнее десятилетие двумерные материалы, такие как графен, дисульфид молибдена, германен и другие, находятся в центре научного внимания. К таким материалам относится и фосфорен — монослой черного фосфора, обладающий высокой подвижностью носителей, высоким оптическим поглощением, значительной шириной запрещенной зоны и другими уникальными свойствами, которые представляют интерес для оптоэлектроники. Несмотря на серьезные теоретические и экспериментальные исследования фосфорена [1, 2], на сегодняшний день слабо изучено влияние поляронных эффектов на свойства данного материала, кроме того, остается открытым вопрос о возможности автолокализации носителей заряда в нем за счет электрон-фононного взаимодействия. Возможность возникновения автолокализации носителей была предсказана еще Ландау для объяснения свойств F-центров в галогенидах щелочных металлов. Экспериментально же автолокализация дырок была доказана Кастнером и Кенцигом с помощью спинового резонанса в 1957 [3].

Для изучения поляронных эффектов в геометрии фосфорена в работе использована микроскопическая модель, учитывающая движение электрона проводимости в потенциале решетки монослоя черного фосфора — модель Су–Шриффера–Хигера [4].

В работе рассмотрено адиабатическое приближение — малые смещения ионов от их равновесного положения являлись входными параметрами гамильтониана модели. Возможность существования автолокализованных состояний исследована путем минимизации энергии электрона проводимости и решетки как функции положений ионов при помощи алгоритма дифференциальной эволюции [5], который хорошо зарекомендовал себя в решении задач поиска глобального минимума многомерных функций.

Показана возможность реализации в модели автолокализованных поляронов малого радиуса при константах электрон-решеточного взаимодействия, значения которых больше критического значения $\lambda_c = 2.5$.

Величина электрон-фононного взаимодействия в самом монослое черного фосфора оказалась меньше этой величины, на основе чего был сделан вывод об отсутствии в нем автолокализованных носителей.

- Liu H., Neal A. T., Zhu Z., Tomanek D., Ye P. D. ACS Nano 4133, 4033–4041 (2014).
- [2] Trushkov Yu., Perebeinos V. Phys. Rev. B 95, 075436 (2017).
- [3] Castner T. G., Känzig W. Phys. Chem. Solids 3, 178 (1957).
- [4] Su W. P., Schrieffer J. R., Heeger A. J. Phys. Rev. Lett. 42, 1698 (1979).
- [5] Price K., Storm R. M., Lampinen J. A. Differential evolution: a practical approach to global optimization. Springer, 2005.

О возможности синхронизации волны зарядовой плотности в квазиодномерных проводниках механическими колебаниями

М. В. Никитин, С. Г. Зыбцев, В. Я. Покровский

ИРЭ им. В. А. Котельникова РАН, г. Москва, 125009, Россия

В докладе будут представлены результаты исследований влияния механических вибраций на транспортные свойства квазиодномерных проводников (КвОП) с волной зарядовой плотности (ВЗП). Ранее сообщалось о сильной электромеханической связи между ВЗП и кристаллической решеткой в КвОП. Было показано, что в КвОП при приложении электрического поля выше порогового возникает огромная механическая деформация. Наиболее детально были исследованы нитевидные образцы TaS₃ ромбической фазы, на которых наблюдалась статическая деформация кручения [1]. Обнаружены также периодические [2] и шумовые [1] флуктуации угла кручения при протекании постоянного тока ВЗП.

При синхронизации скольжения ВЗП полем СВЧ диапазона на ВАХ наблюдаются особенности, называемые ступеньками Шапиро. На зависимостях угла кручения от тока также наблюдались особенности, аналогичные ступенькам Шапиро, свидетельствующие об уменьшении угла кручения образца при синхронизаци ВЗП [3]. Кроме того, наблюдалась значительная модуляция тока ВЗП при одноосной [4] и крутильной [1] деформации образцов, что означает высокую чувствительность движущейся ВЗП к деформации образцов. Учитывая это, мы можем ожидать возникновения ступенек Шапиро под действием механических колебаний образца.

Для поиска «механической синхронизации» ВЗП была разработана методика возбуждения ВЧ механических колебаний частотой до 10 МГц. Вискеры TaS_3 были закреплены между двумя пьедесталами, изготовленными из пьезокерамики ЦТС, в которых создавалась сдвиговая деформация. Для наблюдения эффекта выбирались частоты механических резонансов образца. Исследования на двух образцах показали сходные результаты. При подаче на пьезоподложки переменного напряжения в диапазоне частот 0.1–5 МГц на ВАХ наблюдались особенности, похожие на

ступеньки Шапиро. Амплитуда этих ступенек зависела от подаваемой частоты и достигала максимума на частотах механических резонансов образца. Таким образом, особенности нельзя объяснить электромагнитными наводками. При этом ток ВЗП в области этих особенностей несколько отличается от тока ВЗП обычных ступенек Шапиро. Причину отличия может прояснить моделирование поведения ВЗП в потенциале решетки при высокочастотной механической вибрации кристалла.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 18-02-00931. Исследование синхронизации скольжения ВЗП в квазиодномерном проводнике TaS₃ проводилось в рамках проекта РНФ № 17-19-01748.

- [1] Покровский В. Я. и др. *УФН* **183**, 33 (2013).
- [2] Зыбцев С. Г., Никитин М. В., Покровский В. Я. Письма в ЖЭТФ 92, 448– 453 (2010).
- [3] Nikitin M. V., Zybtsev S. G., Pokrovskii V. Ya. Phys. Rev. B 86, 045104 (2012).
- [4] Lear R. S., Skove M. J., Stillwell E. P., Brill J. W. Phys. Rev. B 29, 5656 (1984).

Спиновый ток на границе раздела гетероструктур манганита с иридатом, материала с сильным спин-орбитальным взаимодействием

Г. А. Овсянников¹, Т. А. Шайхулов¹, К. Л. Станкевич¹, Н. В. Андреев², Yu. Khaidukov³, В. В. Демидов¹

> ¹ ИРЭ им. В. А. Котельникова РАН, г. Москва, 125009, Россия

 ² Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва, 119049, Россия
 ³ Max Planck Institute for Solid State Research, Stuttgart, Germany

Спин-орбитальное взаимодействие привлекает внимание в последние годы из-за появления новых топологических состояний и возбуждения спинового тока. Контакт между 3d- и 5d-оксидами переходных металлов обеспечивает уникальную границу, в которой возможно существование и взаимодействие этих фундаментальных взаимодействий. Гетероструктуры ферромагнитный манганит/полуметалл иридата были получены методом магнетронном распыления на подложку из галата неодима (110)NdGaO₃ при температуре T = 820 °C и давлении кислорода 0.7 мбар для манганита La_{0.7}Sr_{0.3}MnO₃ и T = 770 °C и давлении 0.3 мбар для иридата SrIrO₃. Толщины пленок варьировались от 5 до 10 нм. Представлены результаты рентгеноструктурных, резистивных и нейтронных измерений, а также исследование спектров ферромагнитного резонанса автономных пленок и гетероструктур при уменьшении температуры. При низких температурах обнаружено новое ферромагнитное состояние гетероструктуры, не связанное с манганитом. Напряжение на верхней пленке из иридата гетероструктур в режиме ферромагнитного резонанса вызвано влиянием двух механизмов детектирования СВЧ-излучения: анизотропным магнитосопротивлением в манганите и обратным спиновым эффектом Холла при протекания спинового тока вдоль нормали к границе.

Работа выполнена при частичной поддержки РФФИ, проект № 19-07-00143а.

- Шайхулов Т. А., Овсянников Г. А., Демидов В. В., Андреев Н. В. ЖЭТФ 155, 135 (2019).
- [2] Demidov V. V., Andreev N. V., Shaikhulov T. A., Ovsyannikov G. A. J. Magn. Magn. Mat. 497, 165979 (2020).

Особенности волн зарядовой плотности в квазиодномерном проводнике NbS₃-II, обнаруженные при изучении ступенек Шапиро

С. Г. Зыбцев¹, С. А. Никонов¹,
В. Я. Покровский¹, В. Ф. Насретдинова¹,
С. В. Зайцев-Зотов¹, Э. Зупанич², М. А. ван Мидден²,
Воэй Ву Пай^{3,4}, Д. Старешинич⁵

¹ Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, г. Москва, 125009, Россия

² Jožef Stefan Institute, SI-1000 Ljubljana, Slovenia

³ Center for Condensed Matter Sciences, National Taiwan University, Taipei 106, Taiwan

⁴ Department of Physics, National Taiwan University, Taipei 106, Taiwan ⁵ Institute of Physics, HR-10000 Zagreb, Croatia

Моноклинная фаза NbS₃ (NbS₃-II) замечательна тем, что в ней наблюдаются три перехода с образованием волн зарядовой плотности (ВЗП): при $T_{\rm P1} \approx 360$ K, $T_{\rm P0} \approx 470$ K и $T_{\rm P2} \approx 150$ K. Скольжение каждой из трёх ВЗП (ВЗП-1, ВЗП-0 и ВЗП-2) в постоянном электрическом поле может быть синхронизировано внешним полем СВЧ-диапазона.

ВЗП-1 отличается исключительно высокой когерентностью при комнатной температуре и является идеальным объектом для изучения **общих** свойств ВЗП. В настоящем докладе приводятся результаты исследований ступенек Шапиро при движении ВЗП-1 при температурах вплоть до $T_{\rm P1}$. Показана возможность синхронизации флуктуаций ВЗП СВЧ-полем. Результаты свидетельствуют о коллективном механизме флуктуационной *линейной* проводимости вблизи $T_{\rm P1}$ [1].

Исследовались также осцилляции бесселевского типа на зависимостях амплитуд ступенек Шапиро от СВЧ-напряжения. Зная зависящее от времени напряжение на образце, можно установить мгновенную скорость ВЗП-1 и узнать ее перемещение за времена порядка обратной частоты СВЧ-поля. Оказалось, что осцилляции являются периодическими в зависимости от перемещения ВЗП-1 за каждый полупериод СВЧ-поля. Период осцилляций равен длине волны λ [2]. Показано, что синхронизацию можно рассматривать как асимметричные колебания частицы в периодическом потенциале.

Другая часть доклада посвящена индивидуальным свойствам волн зарядовой плотности в NbS₃-II. В больших полях проводимость каждой из трех ВЗП становится практически линейной, и им можно приписать подвижность (в пересчете на элементарный заряд). Наблюдение ступенек Шапиро позволяет определить подвижности ВЗП, подвижности соответствующих зарядов в нормальном состоянии и плотности зарядов ВЗП. Будут представлены следующие результаты [3]:

 Для всех трех ВЗП подвижности в сильных полях близки к подвижностям соответствующих квазичастиц и показывают соотношение *µ*₂ : *µ*₁ : *µ*₀ = 3 : 0.6 : 0.05 (значения даны в см²/Вс). Таким образом, хотя плотность заряда ВЗП-0 превышает плотность заряда ВЗП-1, ее вклад в проводимость относительно мал. Чрезвычайно низкая подвижность квазичастиц, образующих ВЗП-0, характерна для прыжковой проводимости. Этим можно объяснить необычный, ди-электрический, температурный ход проводимости NbS₃-II выше *T*_{P0}.

Авторы благодарны РФФИ (грант № 20-02-00827). Исследования ступенек Шапиро были поддержаны РНФ (грант № 17-19-01748).

- Nikonov S. A., Zybtsev S. G., Pokrovskii V. Ya., Pavlovskiy V. V. "Shapiro steps in NbS₃-II at the temperatures of the charge-density wave transition", 2019 IEEE International Conference on Manipulation, Manufacturing and Measurement on the Nanoscale (3M-NANO), Zhenjiang, China, 2019, pp. 82–85 (DOI: 10.1109/3M-NANO46308.2019.8947359).
- [2] Zybtsev S. G., Nikonov S. A., Pokrovskii V. Ya., Pavlovskiy V. V., Starešinić D. Phys. Rev. B 101, 115425 (2020).
- [3] Zybtsev S. G., Pokrovskii V. Ya., Nasretdinova V. F., Zaitsev-Zotov S. V., Zupanič E., van Midden M., Pai W. W. "The ultra-high-T_P charge-density wave in the monoclinic phase of NbS₃", to be published.

Исследование магнитных свойств антиферромагнетика RbFe(MoO₄)₂ методами Монте-Карло

М. К. Рамазанов^{1,2}, А. К. Муртазаев^{1,2}, М. А. Магомедов^{1,2}

¹ Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, г. Махачкала, 367003, Россия

² Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН, г. Махачкала, 367000, Россия

E-mail: sheikh77@mail.ru

Классические антиферромагнитные спиновые системы, имеющие правильную двумерную треугольную решетку, образуют 120 градусную спиновую структуру в нулевом поле. Спиновая структура, природа фазовых переходов, термодинамические и магнитные свойства таких систем зависит от внешнего магнитного поля.

Двумерные антиферромагнетики на треугольной решетке широко изучались как теоретически [1, 2], так и экспериментально [3, 4]. RbFe(MoO₄)₂ является примером квазидвумерного антиферромагнетика на треугольной решетке. Для моделирования этого соединения на основе метода Монте-Карло может быть использована модель Гейзенберга.

В данной работе мы исследуем магнитные и термодинамические свойства двумерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке в различных магнитных полях методом Монте-Карло.

Гамильтониан антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке можно записать в виде

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j) - J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (S_i \cdot S_l) - D \sum_{\langle i \rangle} (S_i^z)^2 - H \sum_{\langle i \rangle} S_i,$$
(1)

где $|\vec{S}_i|$ — трехкомпонентный единичный вектор $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$, H — величина магнитного поля (выражается в единицах $H/|J_1|$). Первый член в формуле (1) учитывает обменное взаимодействие первых ближайших соседей ($J_1 < 0$), а второй — вторых ближайших соседей ($J_2 < 0$). Известно, что для данной модели при $J_2 = 0$ основным состоянием является обычное антиферромагнитное упорядочение. Ненулевое обменное взаимодействие J_2 может нарушить данный порядок и привести к воз-

никновению фрустраций. Достаточно большое значение J_2 приводит к появлению страйповых структур. Нами рассматривается случай, когда $J_2/J_1 = 0.05$ и D = 0.57 (D — постоянная анизотропии типа легкая плоскость).

В настоящее время такие системы на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются методом Монте-Карло [5–8].

Нами получены температурные зависимости параметра порядка m и теплоемкости C при разных значениях магнитного поля H. Обнаружено, что параметр порядка и теплоемкость имеют необычное поведение.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-02-00153-а.

- [1] Kawamura H., Miyashita S. J. Phys. Soc. Jpn. 53, 4138 (1984).
- [2] Korshunov S. E. J. Phys. C 19, 5927 (1986).
- [3] Svistov L. E., Smirnov A. I., Prozorova L. A., Petrenko O. A., Demianets L. N., Shapiro A. Ya. Phys. Rev. B 74, 139901 (2006).
- [4] Svistov L. E., Smirnov A. I., Prozorova L. A., Petrenko O. A., Micheler A., Büttgen N., Shapiro A. Ya., Demianets L. N. *Phys. Rev. B* 74, 024412 (2006).
- [5] Murtazaev A. K., Ramazanov M. K., Badiev M. K. Physica A 507, 210 (2018).
- [6] Ramazanov M. K., Murtazaev A. K., Magomedov M. A. Phys. A 521, 543 (2019).
- [7] Ramazanov M. K., Murtazaev A. K. JETP Lett. 109, 589 (2019).
- [8] Ramazanov M. K., Murtazaev A. K., Magomedov M. A., Mazagaeva M. K. Phys. Solid State. 62, 449 (2020).

Конфигурационное взаимодействие краевых состояний и немагнитных дефектов в 2D-топологических изоляторах

В. А. Сабликов

Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, г. Москва, 125009, Россия

Изучены электронные состояния, образующиеся вследствие конфигурационного взаимодействия геликальных краевых состояний и связанных состояний на немагнитных точечных дефектах в двумерных топологических изоляторах и в особенности в системах с нарушенной осевой спиновой симметрией. Интерес к этой проблеме вызван с тем, что до сих пор остается невыясненным механизм рассеяния назад электронов в краевых состояниях, который, по-видимому, связан с наличием немагнитных дефектов.

Установлено, что в результате конфигурационного взаимодействия краевого состояния с одиночным дефектом образуются состояния, составленные из связанного состояния и широкого набора краевых состояний. Они образуют крамерсов дуплет право- и левобегущих состояний, связанных с дефектом, а их амплитуда вблизи дефекта имеет резонанс, энергия которого определяется энергией связанного состояния и собственной энергий, обусловленной туннельной связью краевого состояния с дефектом. Но главный вывод состоит в том, что возмущенные краевые состояния образуют вокруг дефекта обширное облако, амплитуда которого медленно спадает расстоянием. Интересно, что для каждого из крамерсовой пары краевых состояний, связанных с дефектом, облако составлено из обоих крамерсовых партнеров обычных краевых состояний. Иначе говоря, в нем имеется широкий набор состояний, бегущих в противоположном направлении. На бесконечности это облако исчезает, но на конечном расстоянии наличие обратнобегущих состояний может быть важно для электронного транспорта в образцах конечной длины с контактами.

Конфигурационное взаимодействие краевых и связанных состояний приводит к нетривальным эффектам в системе многих или нескольких дефектов. Мы выяснили, что в такой системе становится существенным *непрямое* конфигурационное взаимодействие, при котором связь между связанными состояниями на разных дефектах осуществляется посредством краевого состояния, с которым каждое из них связано туннельным образом. Таким образом, взаимодействие осуществляется на большое расстояние, которое лимитируется временем потери фазовой когерентности.

Эффект непрямого конфигурационного взаимодействия изучен для системы двух дефектов, связанных посредством краевых состояний. Наиболее яркий эффект возникает в случае, когда дефекты одинаковы. Непрямое конфигурационное взаимодействие приводит к расцеплению резонанса отдельных дефектов, даже когда расстояние между ними значительно превосходит длину локализации связанных состояний и прямое конфигурационное взаимодействие отсутствует. Величина расщепления реально достаточно велика, и для параметров структур типа HgTe/CdHgTe она сравнима с шириной зонной щели. Интересно, что энергия, определяющая расщепление, осциллирует в зависимости от расстояния между дефектами и стремится к постоянной величине в пределе больших расстояний. Еще один эффект непрямого конфигурационного взаимодействия состоит в асимметрии образующихся резонансов, которая описывается еще одной характерной энергией, также осциллируюшей с расстоянием, но стремящейся к нулю при большом удалении дефектов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 02-20-00216.

РТ-симметрия терагерцовой фотопроводимости в структурах на основе топологической фазы Hg_{1-x}Cd_xTe

А. В. Галеева¹, А. С. Казаков¹, А. И. Артамкин¹, Л. И. Рябова², С. А. Дворецкий³, Н. Н. Михайлов³,

М. И. Банников⁴, С. Н. Данилов⁵, С. Д. Ганичев⁵, Д. Р. Хохлов^{1,4}

¹ Физический факультет, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, г. Москва, 119991, Россия

² Химический факультет, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, г. Москва, 119991, Россия

> ³ Институт физики полупроводников СО РАН, г. Новосибирск, 630090, Россия

⁴ Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, г. Москва, 119991, Россия ⁵ University of Regensburg, Regensburg, D-93053, Germany

В работе исследована терагерцовая фотопроводимость в пленках на основе $Hg_{1-x}Cd_xTe$ с инверсной (топологическая фаза) и прямой (тривиальная фаза) структурой зонного спектра при приложении магнитного поля в фарадеевской геометрии. Показано, что в структурах на основе топологической фазы $Hg_{1-x}Cd_xTe$ сигнал фотопроводимости асимметричен по магнитному полю, что можно рассматривать как нарушение T-симметрии. Кроме того, фотопроводимость оказывается несимметричной для двух зеркально расположенных пар потенциальных контактов, что можно трактовать как нарушение P-симметрии. В то же время фотоотклик не изменяется при одновременной инверсии магнитного поля и замене пары потенциальных контактов на зеркально расположенную, демонстрируя PT-инвариантность. Важно отметить, что в равновесных условиях P- и T-симметрии сохраняются.

Продемонстрировано, что нарушение P- и T-симметрии обусловлено возникновением нелокальной краевой фотопроводимости под действием импульсов терагерцового излучения. Краевые фототоки являются киральными и нечетными по магнитному полю и по приложенному напряжению.

Обсуждаются возможные механизмы эффекта.

Немонотонная зависимость проводимости от толщины в атомно-тонких пленках Bi₂Se₃

А. В. Фролов¹, А. П. Орлов^{1,2}, А. Г. Темирязев³, А. А. Синченко^{1,4}

¹ Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, г. Москва, 125009, Россия

> ² Институт нанотехнологий и микроэлектроники РАН, г. Москва, 115487, Россия

³ Институт радиотехники и электроники им. В. А.Котельникова РАН, Фрязинский филиал, г. Фрязино, 141190, Россия

⁴ Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, г. Москва, 119991, Россия

Обнаружена необычная осциллирующая зависимость проводимости атомно-тонких пленок топологического изолятора Bi₂Se₃ от их толщины при комнатной температуре. Похожие осцилляции проводимости атомно тонких пленок впервые наблюдались в висмуте и связывались с проявлением квантового размерного эффекта [1].

Образцы представляли собой пленки толщиной 10-30 нм, полученные механическим расщеплением монокристаллов Bi₂Se₃ с помощью адгезионной ленты. Дальнейшее уменьшение их толщины осуществлялось с помощью электрохимического травления с использованием в качестве электролита ионной жидкости DEME-TFSI [2]. В последнее время ионные жидкости стали широко применяться в исследовании транспортных свойств двумерных структур для создания транзисторов с двойным электрическим слоем. В таких структурах электрохимическое травление анода обычно является паразитным эффектом, однако нам удалось с помощью подбора токов и напряжений добиться очень высокой однородности травления, не превышающей толщину одного слоя пленки Bi₂Se₃ — 1 нм. Также это позволило нам измерять проводимость пленки непосредственно во время травления. Осцилляции, упомянутые выше, наблюдались на зависимости проводимости пленки от времени травления. Скорость травления регулировалась величиной тока (Ig) и напряжения травления (V_g). В режиме постоянного напряжения V_g ток травления постепенно уменьшался, при этом пропорционально возрастал период осцилляций. В режиме Ig = const осцилляции были практически эквидистантными от времени. Из оценки толщины пленки до и после травления было получено, что одна осцилляция соответствует уменьшению толщины на ~ 1 нм, что говорит о возможной связи осцилляций со слоистой структурой пленки. В работе обсуждаются возможные причины возникновения осцилляций.

Работа выполнена в рамках государственного задания, а также поддержана программами РАН.

- [1] Ogrin Y. F. et al. Sov. Phys. JETP Lett. 3, 71 (1966).
- [2] Shiogai J. et al. Nature Physics 12.1, 42-46 (2016).

СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫЕ СИСТЕМЫ РАЗЛИЧНОЙ ПРИРОДЫ

ИК-спектроскопия гибридного перовскита CH₃NH₃PbI₃: динамика органического катиона

В. Е. Аникеева^{1,2}, К. Н. Болдырев^{1,2}, О. И. Семёнова³, М. Н. Попова^{1,2}

¹ Институт спектроскопии РАН (ИСАН), г. Троицк, 108840, Россия ² Московский физико-технический институт (НИУ), г. Долгопрудный, 141701, Россия ³ Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН, г. Новосибирск, 630090, Россия

Металлоорганический галогенидный перовскит CH₃NH₃PbI₃ (метиламмоний-йодид свинца, MAPbI₃) в настоящее время рассматривается как перспективный базовый материал для солнечных элементов нового поколения. Имеются также работы по использованию MAPbI3 в детекторах рентгеновских и гамма-лучей, в лазерах и светодиодах. Исключительная функциональность гибридных галогенидных перовскитов обусловлена такими их физическими свойствами, как оптимальная ширина запрещенной зоны (1.5 эВ для MAPbI₃), высокий коэффициент оптического поглощения, большое время жизни и высокая подвижность носителей, низкая теплопроводность. Многие из этих свойств тесно связаны с особенностями фононного спектра и электрон-фононного взаимодействия. По этой причине ведутся интенсивные исследования динамики решетки гибридных галогенидных перовскитов, в том числе MAPbI₃. Однако большинство этих работ выполнено для тонких пленок. В данной работе впервые исследованы терагерцовые спектры отражения и спектры пропускания в средней и ближней ИК-области для монокристалла MAPbI₃.

Монокристаллы перовскита CH₃NH₃PbI₃ хорошего качества были выращены в Институте физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН в Новосибирске [1, 2]. Фотографии исследуемых кристаллов пред-
ставлены на рис. 1. Спектры отражения в диапазоне частот 10–200 см⁻¹ (0.3–6 ТГц) и ИК-спектры пропускания (2500–12 000 см⁻¹) монокристалла MAPbI₃ толщиной 1.4 мм регистрировались на фурье-спектрометре Bruker 125HR сразрешением 1 см⁻¹, в области температур 5–350 К. По терагерцовым спектрам отражения определено TO-LO расщепление для наиболее сильной ИК-активной низкочастотной моды. В ИК-спектрах пропускания, соответствующих многофононной области, наблюдались выраженные особенности при температурах фазовых переходов из кубической в тетрагональную фазу (~330 K) и далее в ромбическую (~160 K). Температурное поведение многофононного спектра согласуется с замораживанием в ромбической фазе свободного вращения органического катиона и переходом к туннельной динамике при дальнейшем понижении температуры. Расщепление ~10 см⁻¹, наблюдаемое для нескольких линий, предположительно является туннельным расщеплением, связанным с характерным временем туннелирования ~3 пс.



Рис. 1

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ № 18-32-20142).

- Semenova O. I., Yudanova E. S., Yeryukov N. A., Zhivodkov Y. A., Shamirzaev T. S., Maximovskiy E. A., Gromilov S. A., Troitskaia I. B. J. Cryst. Growth 462, 45 (2017).
- [2] Yudanova E. S., Duda T. A., Tereshchenko O. E., Semenova O. I. J. Struct. Chem. 58, 1567 (2017).

Low-energy electrodynamics of single-crystalline M-type barium hexaferrite doped with lead and aluminium

A. Ahmed^{1,2}, A. S. Prokhorov^{1,3}, V. Anzin^{1,3}, D. Vinnik⁴, A. Bush⁵, B. Gorshunov¹, L. Alyabyeva¹

 ¹Laboratory of Terahertz Spectroscopy, Center for Photonics and 2D Materials, Moscow Institute of Physics and Technology (State University), 9 Institutskiy per., Dolgoprudny, Russia
²Department of Physics, Faculty of Science, Sohag University, Sohag University St, Sohag, Egypt
³ Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences, 38 Vavilov St, Moscow, Russia
⁴ South Ural State University, 76 Lenin prospect, Chelyabinsk, Russia
⁵ Research Institute of Solid State Electronics Materials, MIREA — Russian Technological University (RTU MIREA), 78 Vernadsky prospect, Moscow, Russia

M-type barium hexaferrites, $BaFe_{12}O_{19}$ (or shortly BaM), are ubiquitous in modern electronics and photonics due to its low-cost productions and effective use in microelectronics, magnetic memory storage, microwave devices, resonators etc. Its structural and functional properties have been extensively studied in last decades [1], however its low-energy (namely atterahertz frequencies) dielectric properties remain practically unexplored. Since doping can significantly tune dielectric and magnetic properties of BaM, we report here, for the first time, the results of detailed study of low-energy electrodynamics of single crystalline BaM doped with lead and aluminium $Ba_{0.2}Pb_{0.8}Al_{1.2}Fe_{10.8}O_{19}$.

Using terahertz-infrared spectroscopy, spectra of reflectivity, transmissivity, and complex dielectric permittivity are obtained for single crystalline Ba_{0.2}Pb_{0.8}Al_{1.2}Fe_{10.8}O₁₉ at frequencies 8–8000 cm⁻¹ in temperature range from 300 K down to 6 K and for two principle polarizations, namely when the electrical field vector **E** is normal to the hexagonal axis *c*, $\mathbf{E} \perp c$, and parallel to it, $\mathbf{E} \parallel c$. A rich set of absorption bandsis detected. The obtained spectra were modelled using Lorentzian expressions for the complex dielectric permittivity $\varepsilon^*(\nu)$ in order to describe the observed absorption resonances:

$$\varepsilon^*(\nu) = \varepsilon'(\nu) + i\varepsilon''(\nu) = \sum_j \frac{\Delta \varepsilon_j \nu_j^2}{\nu_j^2 - \nu^2 + i\nu\gamma_j} + \varepsilon_{\infty}, \tag{1}$$

where $\Delta \varepsilon_j$ is the dielectric contribution of the *j*-th resonance, v_j represents the resonance frequency, γ_j is the damping factor and ε_{∞} is high-frequency dielectric permittivity. Its value was measured at room temperature and assumed to be temperature independent.

In the infrared region, 80–1000 cm⁻¹, the spectra of reflectivity were obtained using standard Fourier-transform spectrometer (Bruker Vertex 80v). The absorption lines detected in this range are assigned to polar lattice vibrations. Factor group analysis [2] predicts 17 and 13 polar phonon modes for $\mathbf{E}\perp c$ and for $\mathbf{E}\parallel c$ polarizations, respectively. Experimentally, we detect 14 phonon peaks for $\mathbf{E}\perp c$ and 13 peaks for $\mathbf{E}\parallel c$.

In the terahertz region (8–80 cm⁻¹), time-domain spectrometers Tera K15, Menlo GmbH and TeraView TPS 3000 were utilized to measure the spectra of complex dielectric permittivity. We found that electronic transitions between the sublevels of the split Fe^{2+} ground state ⁵E correspond to the observed absorption lines at terahertz frequencies (8–80 cm⁻¹). Due to the crystal field trigonal distortions induced by double-cationic substitution (Ba²⁺ with Pb²⁺ and Fe³⁺ with Al³⁺), the symmetry of tetrahedrally coordinated Fe sitepositions lowers. We propose the model that clarify the origin and the temperature behavior of the low-energy (terahertz) resonances observed in the single crystalline Ba_{0.2}Pb_{0.8}Al_{1.2}Fe_{10.8}O₁₉. The model accounts for the origin of electronic transitions within the fine-structured ground state of four-fold coordinated Fe²⁺ basing on the analysis of trigonal distortions of the crystal field [3].

This work was financially supported by the Russian Science Foundation, grant 19-72-00055.

- [1] Pullar R. C. Prog. Mater. Sci. 57 (7), 1191–1334 (2012).
- [2] Mikheykin A. S. et al. Eur. Phys. J. B 87 (10), 232 (2014).
- [3] Mahoney J. P., Lin C. C., Brumage W. H., Dorman F. J. Chem. Phys. 53 (11), 4286–4290 (1970).

Структура, стабильность и ловушки заряда в нанокластерах Cd_nSe_m

В. С. Батурин^{1,2}, С. В. Лепешкин^{1,2}, Н. А. Бушланова², Ю. А. Успенский²

 Сколковский институт науки и технологий, ул. Нобеля, д. 3, г. Москва, 143026, Россия
Физический институт им. П. Н. Лебедева, Ленинский пр., д. 53, г. Москва, 119991, Россия

Нанокластеры (НК) и квантовые точки активно исследуются в связи с их применением в фотовольтаике, оптоэлектронике, биомедицине и других областях. Их эффективность в качестве оптоэлектронных устройств критически зависит от концентрации электронных ловушек, которые приводят к безызлучательной рекомбинации, низкому квантовому выходу и замедлению зарядового транспорта. Наличие ловушек во многом обусловлено структурными дефектами и определенными группами атомов на поверхности НК. Пассивация поверхности лигандами или диэлектрической оболочкой устраняет ловушки и улучшает свойства НК, повышая квантовый выход от нескольких процентов (чистый CdSe) до 90 % в случае двухслойной CdSe-CdS частицы. Однако для многих применений важно оставлять частицу проводящей. Для таких случаев допирование должно производиться более прицельно, что приводит к необходимости более глубокого понимания механизмов работы электронных ловушек.

В настоящей работе мы произвели систематическую глобальную структурную оптимизацию для 225 кластеров Cd_nSe_m с $1 \le n, m \le 15$. Полученные результаты позволили провести масштабное исследование условий формирования ловушек. Обнаружено, что стабилизация атомной структуры существенно уменьшает число ловушек так, что только 5 % из рассчитанных кластеров имеют локализованные состояния на верхней заполненной (HOMO) и нижней незаполненной (LUMO) оболочках. Спектральное распределение внутрищелевых состояний показало, что в среднем ловушки отстоят на 0.5 эВ от краев зон, что согласуется с экспериментальными работами [1]. Кроме того, ловушки присутствуют и внутри зон, что невозможно в твердых телах и связано с большой долей поверхностных атомов. Нами была разработана классификация, система-

тизирующая множество найденных ловушечных состояний. Эта классификация тесно связана с тремя обнаруженными механизмами локализации, существенно расширающими известную ранее картину [2]: (а) известный механизм, связанный с симметрией орбиталей, (b) механизм, связанный с разностью энергий π - и σ -связи и (c) пространственная изоляция атома Cd в полости HK. Кроме того, было исследовано влияние ловушек на ширину HOMO-LUMO щели. Оказалось, внутрищелевое расположение ловушек почти в точности компенсирует увеличение щели за счет кулоновского взаимодействия, обусловленного локализацией.

- [1] Boehme S. C. et al. Nano Letters 15 (5), 3056–3066 (2015).
- [2] Houtepen A. J. et al. Chem. Mater. 29, 752-761 (2017).

Взаимодействие позитрония с растворенным кислородом в жидкостях

А. В. Боков^{1,2}, С. В. Степанов², П. С. Степанов³, В. М. Бяков²

 ¹ Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, г. Троицк (г. Москва), 142190, Россия
² НИЩ «Курчатовский институт» — ИТЭФ, г. Москва, 117218, Россия
³ Center for Photochemical Sciences, Bowling Green State University,

OH 43403 USA

E-mail: av.bokov@yandex.ru

В последнее время обращает на себя внимание явление укорочения времени жизни ортопозитрония («тушения») в различных жидкостях за счет его взаимодействия с растворенным кислородом (O₂). Этот эффект проявляется при использовании позитронно-аннигиляционной спектроскопии (ПАС) для изучения здоровых и раковых тканей живых организмов, поскольку содержание O₂ в этих тканях заметно отличается [1]. Такие исследования также стимулируются разработкой нового типа позитронно-аннигиляционного томографа, предназначенного для выявления онкологических заболеваний, в Ягеллонском университете в Кракове [2].

Здесь мы представляем результаты экспериментов ПАС в органических жидкостях (циклогексан, изооктан, изопропанол) и воде. Нашей целью было экспериментально определить константы скорости взаимодействия молекулярного кислорода, растворенного в жидкостях, с атомом Ps. Paзработана программа для фитирования временных аннигиляционных спектров в жидких средах, использующая в качестве подгоночных параметров величины, имеющие ясный физический смысл: константы скорости реакций с участием Ps, скорости аннигиляции различных позитронных состояний, вероятность образования квазисвободного позитрония, скорость его локализации в нанопузырьке. С ее помощью показано, что в исследованных органических жидкостях взаимодействие атома Ps с растворенным кислородом в основном сводится к орто-пара-конверсии Ps, а не к окислению. Определены значения констант скорости реакций спиновой конверсии (ortho-Ps \leftrightarrow para-Ps) и окисления (Ps + O₂ \rightarrow e⁺ + O₂⁻).

- Jasinska B., Zgardzinska B., Cholubek G. et al. Acta Physica Polonica A 132 (5), 1556 (2017).
- [2] Moskal P., Niedzwiecki Sz., Bednarski T. et al. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*. **764**, 317 (2014).

Новый вид эксперимента в квантовом зародышеобразовании

С. Н. Бурмистров, Л. Б. Дубовский

НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, 123182, Россия

Предлагается новый вид эксперимента для прямого наблюдения формирования твердого зародыша при переходе жидкость – твердое тело в сверхтекучем ⁴Не при низких температурах. Рост твердого зародыша возмущает однородное состояние метастабильной жидкости и приводит к появлению потоков метастабильной жидкости за счет отличия ее плотности от плотности твердой фазы, что также сопровождается излучением звуковых волн, т. е. фононов. Вследствие того, что длина затухания звука достаточно мала в сверхтекучем ⁴Не при низких температурах, звуковые волны могут достигать стенок экспериментального контейнера и фононы могут быть зарегистрированы на эксперименте. Величина $\omega_{\rm ph} \sim s \, / \, R_c$ является характерной частотой излученного фонона, R_c является радиусом критического зародыша в твердой фазе, а *s* — скоростью звука. Число излученных зародышем стабильной фазы фононов с характерной энергией приблизительно равно числу частиц N_c в критическом зародыше. Обычно в эксперименте N_c оказывается порядка сотни. Регистрация этих фононов позволяет детектировать критический зародыш размером 10-20 ангстрем. Это резко отличается от имеющихся экспериментов, в которых зародыш твердой фазы наблюдался лишь в далекой закритической области, когда зародыш вырастает до макроскопического размера. Рассматриваемая звуковая волна может быть зарегистрирована, если ее энергия превышает величину флуктуаций в окружающей среде. В этом случае можно легко оценить область температур ($T < T_0$), где энергия излучения звука критическим зародышем превышает величину флуктуаций:

$$T_0 = 0.5\hbar\omega_{\rm ph} / \ln \left[\hbar\omega_{\rm ph} (L/R_c)^{3/2} / (4\pi^2 \rho R_c^3 c^2) \right]$$

При размере системы $L \sim 1$ см мы приходим к температуре порядка $T_0 \sim 10$ мК. Величина излученного звука критическим зародышем будет совершенно различна при классическом и квантовом режимах зародышеобразования. Кроссовер в поведении будет определять переход с классического на квантовый режим зародышеобразования.

Взаимные корреляции структурных дефектов, электронных, фононных и фотонных подсистем в сильно неравновесных средах

Н. В. Классен, А. П. Покидов, И. С. Цебрук

Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Московская обл., 142432, Россия

Взаимные корреляции между электронными, фононными и фотонными подсистемами кристаллов приводят к обширному ряду явлений и многие годы внимательно изучаются физиками (поляритоны, сверхпроводимость, комбинационное рассеяние и т. д.). С другой стороны, материаловеды скрупулезно исследуют разного рода структурные превращения в конденсированных средах при изменениях внешних условий (температуры, давления, деформирующих нагрузок и др.). До недавнего времени эти два направления развивались параллельными курсами без заметных пересечений. Пятьдесят лет назад в ИФТТ РАН был обнаружен фотопластический эффект — существенное изменение пластичности полупроводников при оптическом возбуждении электронной подсистемы. Затем появился магнитопластический эффект, заключающийся в изменении пластичности полупроводников и диэлектриков при наложении на кристалл магнитного поля. Оба эти явления показывают, как слабые изменения энергетики электронной подсистемы способны изменить энергетику движения атомарной подсистемы на значительно большую величину. В те же годы было установлено, что структурные дефекты, определяющие массоперенос при деформировании кристаллов, существенно изменяют электронные и фононные спектры кристаллов — прежде всего за счет формирования локализованных на дефектах электронов и фононов. Тогда же было показано, что при достаточных степенях деформации, т. е. сильных отклонениях кристаллов от равновесия, в них формируются сверхструктуры дефектов с настолько высокой степенью периодичности, что в деформированных кристаллах наблюдаются световые дифракционные явления, подобные рентгеновской дифракции на атомарных решетках кристаллов. Следовательно, в таких сверхструктурах собственные фотонные, электронные и фононные состояния дефектов за счет резонансной интерференции образуют блоховские волны, присущие системам с трансляционной симметрией. Поэтому относительно слабое внешнее воздействие на один из дефектов передается всей подсистеме и эффект воздействия интерференционным образом усиливается, что должно играть серьезную роль в фотопластическом, магнитопластическом и других явлениях с участием структурных превращений. В частности, при сильном деформировании кристаллических материалов сопротивление деформации может варьироваться в широких пределах от суперпластичности до суперупругости, когда диапазон обратимых деформаций существенно расширяется за счет резонансных передач друг другу периодически расположенными дефектами их электронных, фононных и электромагнитных возбуждений. В докладе описываются эксперименты по влиянию такого рода межсистемных корреляций не только на процессы деформирования, но и на скоростную кристаллизацию, регулирование нано- и микромасштабных периодов сверхструктур различными внешними воздействиями, поглощение и излучение света и т. д.

Валентно-флуктуирующая природа, аномалия теплового расширения и поведение объемного модуля δ-плутония

А. Мирмельштейн, В. Матвиенко

Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский НИИ технической физики им. ак. Е. И. Забабахина, г. Снежинск, Челябинская обл., 456770, Россия

E-mail: mirmelstein@mail.ru

Недавние эксперименты по неупругому рассеянию нейтронов показали, что основное состояние плутония определяется валентными флуктуациями, т. е. ГЦК δ-Ри является системой с промежуточной валентностью (ПВ) с температурой Кондо T_K = 975 К [1]. Эти результаты разрешили давнее противоречие между экспериментальными и теоретическими результатами относительно магнетизма в плутонии. Несмотря на это достижение, физика металлического Ри продолжает широко обсуждаться. В частности, недостаточно разработана проблема его упругих свойств. Давно известно, что чистый (нелегированный) Ри в области существования δ-фазы сжимается при повышении температуры. Этот эффект обычно объясняют в рамках так называемого инварного механизма [2, 3]. Однако, физическая природа двухуровневой системы инварной модели остается неясной. Необычное смягчение объемного модуля с ростом температуры также весьма необычно, поскольку этот эффект в δ-фазе Ри-Ga сплавов наблюдается в тех же температурных интервалах, в которых кристаллическая решетка или сжимается, или имеет почти нулевой коэффициент теплового расширения [4]. Скорее всего, аномальное поведение объемного модуля связано с особенностями магнитных степеней свободы, однако предлагаемые объяснения и этого свойства б-Ри вызывают серьезные сомнения [5-7]. В данной работе мы предлагаем другой подход для описания температурных зависимостей атомного объема и объемного модуля *δ*-Ри, рассматривая *δ*-Ри как ПВ систему. Такой подход позволяет, без привнесения в систему искусственных конструкций, естественным образом объяснить температурные зависимости как параметра кристаллической решетки, так и объемного модуля δ-Ри. Однако для подтверждения предлагаемого подхода необходимы дополнительные экспериментальные исследования.

- [1] Janoshek M. et al. Sci. Adv. 1:e1500188 (2015).
- [2] Lawson A. C. et al. Philos. Mag. 86, 2713 (2006).
- [3] Lee T. et al. Phys. Rev. B 89, 174114 (2014).
- [4] Lawson A. C. et al. Philos. Mag. 82, 1837 (2002).
- [5] Migliori A. et al. Proc. Natl. Acad. Sci. USA 113, 11158 (2016).
- [6] Janoshek M. et al. Proc. Natl. Acad. Sci. USA 114, E268 (2017).
- [7] Lawson A. C. Philos. Mag. 99, 1481 (2019).

Прогнозирование электрических свойств гранулированных композитов методом гетерофазная структура – эффективная среда

М. И. Даунов, А. М. Мусаев

Институт физики им. Х. И. Амирханова Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, г. Махачкала, 367003, Россия

E-mail: akhmed-musaev@yandex.ru

Для прогнозирования электрических свойств гранулированных композитов с высоко проводящими гранулами в диэлектрической матрице использована аппроксимационная модель гетерофазная структураэффективная среда (ГСЭС), являющаяся синтезом метода эффективной среды и теории протекания. Ранее модель ГСЭС была использована для описания полиморфных переходов в твердом теле при воздействии всестороннего давления [1].

В качестве конкретного примера соответствия аппроксимационной модели ГСЭС для описания зависимости удельного сопротивления гранулированных композитов ρ от диаметра d гранул, использованы экспериментальные данные для композитов La_{2/3}Sr_{1/3}MnO₃ [2], где непосредственно исследована зависимость $\rho(d)$.

Исходя из экспериментальных данных для керамических образцов композита $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ рассчитаны зависимости относительного объема и толщины гранулы приповерхностного слоя от диаметра гранулы. Также рассчитана зависимость удельного сопротивления гранулированного композита от диаметра гранул в диапазоне 0.01–10 мкм.

Исследование с использованием аппроксимационной модели гетерофазная структура – эффективная среда для гранулированных композитов показывает, что в гранулированных композитах с ростом доли объема, занимаемого сердцевиной гранулы относительно объема межгранульного пространства и поверхностного слоя, эффективная электропроводность среды возрастает.

Полученные в работе зависимости позволяет прогнозировать электрические свойства гранулированных композитов.

- Камилов И. К., Даунов М. И., Моллаев А. Ю., Габибов С. Ф. ФТТ 55 (6), 1152–1156 (2013).
- [2] Balcells L. I., Fontcuberta J., Martinez B., Obradors X. Phys. Rev. B. 58 (22), R14697-R14700 (1998).

Особенности промежуточновалентного состояния Eu в интерметаллидах EuCu₂(Si,Ge)₂

П. С. Савченков^{2,1}, П. А. Алексеев^{1,2}, В. А. Сидоров³

¹ НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, 123182, Россия

² Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», г. Москва, 115409, Россия

³ Институт физики высоких давлений им Л. Ф. Верещагина РАН, г. Троицк (г. Москва), 142190, Россия

В работе проведен совокупный анализ экспериментальных данных по неупругому магнитному рассеянию нейтронов для промежуточновалентных (ПВ) систем на основе Sm (SmB₆, Sm(Y)S) и Eu (типа EuCu₂Si₂) с точки зрения применимости обобщенного подхода на основе теоретической модели экситона конечного радиуса.

Модель экситона конечного радиуса, предложенная для описания свойств SmB₆, была развита и расширена для правильного понимания существенных деталей спектра неупругого магнитного рассеяния нейтронов в представленных системах. Основой нового подхода является представление о гибридизации как о движущей силе формирования промежуточновалентного состояния для Еu. Впервые предложен и проанализирован дырочный аналог модели экситона конечного радиуса, позволяющий адекватно описать свойства ПВ состояния Eu опираясь на единый (для Eu и Sm) подход к представлению структуры волновой функции основного состояния.

В рамках представленной модели анализируются экспериментальные данные по определению влияние высокого давления на температуру магнитного упорядочения для системы EuCu₂Ge₂ Обсуждается сосуществование магнетизма и промежуточной валентности в системах EuCu₂(Si,Ge)₂.

Влияние высокого давления на электрофизические свойства дираковского 3D-полуметалла Cd₃As₂ с наногранулами MnAs

Л. А. Сайпулаева¹, Н. В. Мельникова², А. Н. Бабушкин², А. В. Тебеньков², В. С. Захвалинский³, А. И. Риль⁴, С. Ф. Маренкин⁴, М. М. Гаджиалиев¹

¹ Институт физики им. Х. И. Амирханова ДФИЦ РАН, г. Махачкала, 367030, Россия

² Уральский федеральный университет, Институт естественных наук и математики, г. Екатеринбург, 620026, Россия

³ Белгородский государственный национальный исследовательский университет, г. Белгород, 308015, Россия

⁴ Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН, г. Москва, 119991, Россия

Представлены результаты экспериментальных исследований электро- и магнитосопротивления композитов на основе дираковского полуметалла Cd_3As_2 с содержанием наногранул MnAs [1] при давлениях до 50 ГПа. Исследованные образцы представляют собой композит, состоящий из наноразмерных ферромагнитных гранул MnAs, хаотически расположенных в объеме матрицы с характерными размерами 20–30 и 50–90 нм.

Исследования барического поведения электро- и магнитосопротивления показали существенное изменение скорости уменьшения электросопротивления при росте давления от 25 до 30 ГПа, формирование высоких значений отрицательного магнетосопротивления при увеличении давления и его малые (по модулю) значения при уменьшении давления до 16 ГПа.

Учитывая особенности поведения измеренных характеристик при увеличении и последующим уменьшении давления или при исследовании при циклическом нагружении, можно предположить, что в материалах происходят необратимые или почти необратимые изменения. Полученные результаты согласуются с поведением термоэдс материалов при давлениях до 50 ГПа [2]

- [1] Crassee I. et al. Phys. Rev. Materials 2, 92 (2018).
- [2] Melnikova N. V. et al. Solid State Physics 60 (3), 499 (2018).

Полуметаллические состояния молекулярного кристаллического водорода при высоких давлениях

Г. Э. Норман, И. М. Саитов

¹ Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», г. Москва, 101000, Россия ² Объединенный институт высоких температур РАН,

г. Москва, 125412, Россия

³ Московский физико-технический институт (НИУ), г. Долгопрудный, Московская обл., 141700, Россия

Получены полуметаллические состояния кристаллического молекулярного водорода при температуре 100 К в диапазоне давлений от 410 до 626 ГПа. Для анализа характера проводимости проводится расчет зонной структуры в рамках теории функционала плотности с использованием гибридного обменно-корреляционного функционала HSE. Рассматриваются структуры кристаллического молекулярного водорода, полученные в работе [1] при сжатии вдоль изотермы 100 К: моноклинная структура с симметрией C2/с и ромбическая структура с симметрией Cmca-4.

Одно из полуметаллических состояний возникает в моноклинной структуре с симметрией C2/с при сжатии до давления 410 ГПа, при котором происходит закрытие щели между валентной зоной и зоной проводимости. Причем валентная зона является частично незаполненной, а зона проводимости — частично заполненной, что является характерным признаком полуметалла. При давлении 302 ГПа кристаллический молекулярный водород со структурой C2/с остается изолятором.

Найдена зависимость электропроводности от давления для 300– 500 ГПа. Полученные значения удельного сопротивления кристаллического молекулярного водорода являются типичными для полуметаллов, в частности для висмута.

Второе полуметаллическое состояние наблюдается для ромбической структуры с симметрией Стса-4 при давлении 626 ГПа.

Работа выполнена при поддержке РНФ по гранту № 18-19-00734.

[1] Саитов И. М. *Письма в ЖЭТФ* **110** (3), 184–189 (2019).

Новое промежуточновалентное соединение YbZn₂

Д. А. Саламатин^{1,2}, А. В. Цвященко¹, К. Е. Клементьев³,
М. Г. Козин⁴, И. Л. Ромашкина⁴, В. А. Сидоров¹,
И. П. Зибров¹, А. В. Николаев⁴, Л. Н. Фомичёва¹

 ¹ Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, г. Троицк (г. Москва), 142190, Россия
² Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Московская обл., 141980, Россия
³ Lund University, MAX IV Laboratory, Lund, Sweden
⁴ Научно-исследовательский институт ядерной физики МГУ, г. Москва, 119991, Россия

Соединения RZn_2 с редкоземельными ионами R = Y, La-Lu (за исключением Pm) кристаллизуются в орторомбическую структуру типа CeCu₂(KHg₂) с пространственной группой *Imma*. Большинство из этих соединений упорядочиваются магнитно с температурой магнитного упорядочения в диапазоне 5–70 К. Соединения GdZn₂ и ErZn₂ имеют ферромагнитные структуры, в NdZn₂ наблюдается сосуществование ферромагнитной и антиферромагнитных фаз, а в остальных соединениях (R = Ce, Eu, Tb, Dy, Ho, Tm) структура антиферромагнитная.

С использованием техники синтеза при высоком давлении нами была получена новая гексагональная фаза соединения $YbZn_2$ со структурой типа $MgZn_2$ (C14) с кристаллографическими параметрами, приведенными в таблице 1.

YbZn ₂ (пр. гр. № 194, MgZn ₂ -тип) <i>V</i> = 238.489 А ³							
a		5.5724(1) A					
С		8.8683(1) A					
атом	x	У	Z				
Yb (4 <i>f</i>)	1/3	2/3	0.558(1)				
$Zn_1(6h)$	0.167(1)	0.334(1)	1/4				
$Zn_2(2a)$	0	0	0				

Таблица 1. Кристаллографические параметры гексагональной новой фазы высокого давления YbZn₂

Ранее в работе [1] с помощью расчетов из первых принципов было показано, что соединение YZn_2 имеет структурный фазовый переход в гексагональную фазу MgZn₂ выше давления $P_{tr} = 19.5$ GPa.

Х-гау Absorption Spectroscopy (XAS) измерения, проведенные на синхротроне MAXIV в г. Лунд (Швеция) при комнатной температуре и атмосферном давлении, показали, что Yb в гексагональной фазе YbZn₂ находится в промежуточновалентном состоянии со средним значением валентности 2.55(5). Для сравнения в изоструктурном промежуточновалентном соединении YbAg₂ средняя валентность Yb составляет 2.8 при T = 295 K, P = 0 GPa [2]. При этом Yb испытывает двухстадийный валентный переход к трехвалентному состоянию с критическими давлениями 8 и 16 GPa [3].Также нами были проведены измерения спектров возмущенных угловых гамма-гамма корреляций с использованием пробных ядер ¹¹¹In/¹¹¹Cd в TbZn₂ (в CeCu₂ фазе) и в YbZn₂ (в MgZn₂ фазе) при T = 295 K, P = 0 GPa.

Данная работа была поддержана грантом полномочного представителя республики Польша в Объединенном институте ядерных исследований (г. Дубна).

- Benabadji M. K., Faraoun H. I. *MATEC Web of Conferences* 5, 04037 (2013). DOI: 10.1051/matecconf/20130504037
- [2] Tsvyashchenko A. V., Menushenko A. P., Sidorov V. A. et al. JALCOM 640, 295–298 (2015). DOI: 10.1016/j.jallcom.2015.06.203
- [3] Tsvyashchenko A. V., Nikolaev A. V., Salamatin D. A. et al. *Phys. Rev. B* 96, 245141 (2017). DOI: 10.1103/PhysRevB.96.245141

Критические точки и фазовые переходы

С. М. Стишов

Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, г. Троицк (г. Москва), 142190, Россия Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, г. Москва, 119333, Россия

Линии фазовых переходов, как правило, не распространяются безгранично, а могут оканчиваться либо в определенной точке или пересекаясь с другими линиями. Точки окончания или пересечения являются критическими точками, где термодинамические величины имеют те или иные особенности.

Наиболее известной критической точкой является критическая точка типа жидкость-газ, которая обнаруживается при кипении простых жидкостей и изоструктурных фазовых переходах в твердых телах (церий).

Трикритические точки, где встречаются фазовые переходы первого и второго рода, обычны для фазовых переходов первого рода, близких ко второму (сегнетоэлектрики, магнитные переходы).

Гипотетические изолированные критические точки могут наблюдаться на пересечении трех фазовых переходов первого рода.

Бикритическкая точка (фазовый переход первого рода оканчивается на линии фазовых переходов первого рода) и тетракритическая точка (на пересечение двух фазовых переходов второго рода) наблюдаются в ряде магнитных фазовых переходах.

Концевая критическая точка (фазовый переход второго рода оканчивается на линии фазовых переходов первого рода) впервые обнаружена при пересечении линии свехтекучего фазового перехода и линии плавления в гелии.

И наконец, квантовая критическая точка и концевая квантовая критическая точка наблюдаются в сильно коррелированных электронных системах.

Точечные дефекты в магнетите: расчеты в рамках теории функционала плотности

М. И. Шутикова^{1,2}, В. В. Стегайлов^{1,2}

¹ Объединенный институт высоких температур РАН, г. Москва, 125412, Россия

² Московский физико-технический институт (НИУ), г. Долгопрудный, 141701, Россия

Магнетит Fe₃O₄ представляет собой сильно коррелированный магнитный оксид. Свойства этого оксида и в том числе точечных дефектов в нем важны для моделей коррозии, каталитических технологий и органической спинтроники.

В работе свойства кристаллической решетки магнетита и свойства вакансий и междоузельных атомов в ней исследуются с помощью метода теории функционала спиновой плотности. Расчеты проводятся с использованием базиса плоских волн и приближения псевдопотенциала. Рассматриваются не описанные ранее в литературе конфигурации точечных дефектов, релаксация структуры вблизи дефектов, дается оценка энергии образования дефектов, исследуется чувствительность результата к заданию начальных магнитных моментов катионов и анионов. Проводится анализ влияния на свойства дефектов учета в расчетах сильных электронных корреляций в рамках приближения DFT+U.

Синтез и структура нового соединения NaV₃O₆

И. П. Зибров, В. П. Филоненко

Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, г. Троицк (г. Москва), 142190, Россия

E-mail: zibrov@hppi.troitsk.ru

Система Na-V-O чрезвычайно богата на соединения, что связано с переменной валентностью ванадия: от +2 до +5. В данной работе представлены результаты по синтезу и расшифровке структуры новой фазы высокого давления NaV₃O₆.

Для проведения экспериментов использовались камеры «тороид». Исходный порошок α -V₂O₅ тщательно смешивался с азидом натрия NaN₃ в пропорции, соответствующей формуле Na_{0.6}V₂O₅. Синтез проводили при T = 800–900 °C, P = 5.0–6.0 ГПа в течение 2–5 мин. Все образцы были многофазными и содержали пики, не относящиеся ни к одной из известных фаз. Анализируя дифрактограммы нескольких образцов, мы выделили пики, относящиеся к одной неизвестной фазе. Образец, полученный при T = 850 °C и P = 6.0 ГПа более, чем на 90 % состоял из этого соединения, а второй фазой был оксид V_{3.047}O₇ [1]. Индицирование рентгенограммы дало моноклинную ячейку с параметрами, представленными в таблице. Анализ индексов присутствующих на дифрактограммах отражений показал, что присутствуют отражения с индексами (h0l) и (00l), для которых l = 2n, что соответствует группам симметрии *P c* и *P* 2/c. Так как чистую фазу выделить не удалось, структуру расшифровывали методом проб и ошибок. Модели структуры уточняли с использованием Rietveldrefinement. Структурные параметры для V_{3.047}O₇ взяли из [1], и для него уточняли только параметры ячейки, профильные параметры и весовую долю в смеси. Лучшая модель структуры содержала в ячейке 2 атома натрия, 6 атомов ванадия и 12 атомов кислорода. Эта модель NaV₃O₆ представлена на рисунке, где показаны октаэдры [VO6] (темные полиэдры) и четырехугольные пирамиды [VO5] (светлые полиэдры), большие сферы — атомы Na, маленькие кружки в вершинах полиэдров — атомы О. На рис. 1 показана проекция в направлении [001], на рис. 2 — в направлении [100]. В таблице представлены результаты уточнения модели структуры NaV₃O₆. Бесконечные зигзаги контактирующих

ребрами октаэдров [VO6], идущих вдоль оси *с*, перемыкаются бесконечными зигзагами из четырехугольных пирамид (ЧП) [VO5], также контактирующих ребрами.

В результате, блоки, состоящие из октаэдров и ЧП разделены плоскостями из атомов натрия. Таким образом, в результате синтеза при высоком давлении получено новое соединение NaV₃O₆ и расшифрована его структура.

Пространственная	P 2/c	
i pyinia	0.(500(4))	•
<i>a</i> (A)	9.6528(4)	
<i>b</i> (Å)	5.6794(2)	1
<i>c</i> (Å)	4.8199(2)	
β (°)	90.742(2)	•
$V(Å^3)$	264.215(8)	-
Z	2	Ì
<i>d</i> -выч. (г/см ³)	3.417	
Весовая доля	93(12)	•
в смеси, %	<i>JJ</i> (12)	
R_F	0.1681	
R_P	0.0090	
R_{WP}	0.0135	

Таблица



 Zibrov I. P., Filonenko V. P., Sidorov V. A., Lyapin S. G. Inorg. Mat. 52 (9), 902–908 (2016).

Новая фаза высокого давления $RE_xW_{4-x}O_{10}$ (RE = Tb – Lu, $x \approx 1$)

И. П. Зибров, В. П. Филоненко

Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, г. Троицк (г. Москва), 142190, Россия

E-mail: zibrov@hppi.troitsk.ru

Нами была предпринята попытка изучения систем W-RE-О при давлении до 8.0 ГПа и температуре до 1300 °С. Один из полученных результатов представлен в данной работе. Синтез соединений различного состава проводили в камерах «тороид» из смесей чистых компонентов WO₃, RE₂O₃ и W. После синтеза образцы подвергались рентгенофазовому анализу и были, как правило, многофазны. При P = 8.0 ГПа и T = 1200 °C из исходной смеси, соответствующей составу LuW₃O_{10.5}, был получен материал, состоящий из двух фаз: одна — WO₃ (29 %), а вторая — неизвестное ранее соединение (71 %). Дифракционные пики новой фазы были проиндицированы в тетрагональной ячейке (см. таблицу). На дифрактограмме присутствовали только такие отражения с индексами (hk0), для которых h + k = 2n. Данное правило отбора существует только в 4 пространственных группах тетрагональной сингонии. В результате анализа была выбрана только одна группа Р – 4 21m, в которой была построена модель структуры и проведено ее уточнение с использованием метода Ритвельда (программа GSAS). Достигнутая величина $R_F = 0.047$ свидетельствует о правильности выбранной модели. В ячейке располагается 4 катиона и 10 атомов О. Координационным полиздром Lu является пентагональная бипирамида (ПБ), с к. ч. = 7. Атомы W располагаются как в ПБ, так и в четырехугольной пирамиде (ЧП) из атомов О (к. ч. = 5). ЧП контактирует с ПБ одним ребром и пятью вершинами, а ПБ между собой соединены вершинами, образуя двумерные сетки в плоскости ху. ЧП соединяют эти сетки между собой вдоль оси с. В результате каждая ПБ окружена шестью ЧП, а каждая ЧП — шестью ПБ. Так как ПБ занимают как атомы лютеция, так и вольфрама, у данного соединения существует область гомогенности. Максимальное содержание Lu в ячейке — 1.33 атома при полностью окисленном W(+6). При уменьшении концентрации лютеция увеличивается содержание вольфрама, и, соответственно, уменьшается его валентность. Это соединение было обнаружено в системах от Tb до Lu (таблица). В таблице на примере тулия и лютеция показано, что параметры ячейки могут отличаться в разных образцах, что подтверждает наличие области гомогенности в этой фазе.



Рис. Структура Lu_xW_{4-x}O₁₀: а) вдоль [001], б) вдоль [110]. ПБ — темные, ЧП — светлые

Таблица. Параметры ячейки для	я
$RE_xW_{4-x}O_{10} (RE = Tb - Lu)$	

RE	<i>r</i> , Å	a, Å	<i>c</i> , Å	<i>V</i> , Å ³
Tb	0.923	4.709	7.554	167.51
Dy	0.912	4.707	7.514	166.48
Но	0.901	4.707	7.484	165.81
Tm	0.880	4.712	7.436	165.10
		4.696	7.446	164.20
Yb	0.868	4.701	7.414	163.84
Lu	0.861	4.725	7.358	164.27
		4.690	7.405	162.88

Поверхностный импеданс проводников без диссипации на постоянном токе с учетом пространственной дисперсии

Н. А. Волчков¹, Л. Н. Жерихина¹, А. Л. Карузский¹, В. А. Кульбачинский², Ю. А. Митягин¹, А. В. Пересторонин¹, А. П. Черняев³

¹ Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, г. Москва, 119333, Россия

² Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, г. Москва, 119991, Россия

> ³ Московский физико-технический институт (НИУ), г. Долгопрудный, Московская обл., 141700, Россия

> > E-mail: karuz@sci.lebedev.ru

В данной работе для получения общих частотных зависимостей модулей собственного значения ($\varepsilon_a(\omega)$) оператора диэлектрической проницаемости и поверхностного импеданса ($Z(\omega)$) в условиях пространственной дисперсии для проводников без диссипации на постоянном токе, т. е. сверхпроводников или идеальных проводников, применяются подходы, использованные в [1, 2]

Пространственная неоднородность поля в виде волнового числа (k'') сначала рассматривается в стационарном случае, как и в [1, 2]. При рассмотрении нестационарной задачи, учитывая отсутствие затухания постоянного тока, найдены зависимости $Z \sim \omega$ и $\varepsilon_a \sim 1/\omega^2$ — одинаковые как для сверхпроводников, так и для идеальных проводников. Это следует из поведения пондеромоторной силы Абрагама, которая достигает наибольшей величины, там, где пространственная неоднородность поля имеет наибольшее значение, т. е. на глубине проникновения Лондона. Нулевая пространственная неоднородность соответствует нулевой силе Абрагама и абсолютно неустойчивой пространственно однородной конфигурации поля. Таким образом, выводы, полученные в приближении поверхностного импеданса, свидетельствуют о том, что пространственная дисперсия приводит к появлению эффекта Мейснера в идеальных проводниках таким же образом, как и в сверхпроводниках, в отличие от более ранних соображений [3], которые не учитывали эффекты про-

странственной дисперсии. Причиной данного результата является сила Абрагама.

Временная производная пространственной плотности потока импульса $\Pi = [\mathbf{D} \times \mathbf{B}] \partial \Pi / \partial t$ определяет силу Абрагама [4, 5]. Условия пространственного силового резонанса [1, 2, 6] определяются пространственной неоднородностью поля, размер которой соответствует наибольшей возможной величине волнового вектора k'' и максимальной силе $\partial \Pi / \partial t$. Раскрытие неопределенности вида $0 \cdot \infty$ в левой части уравнения $ZD_x(0) = B_y(0)$ в пределе $\omega \to 0$ за счет подстановки Z в выражение для силы Абрагама показывает, что эффект Мейснера имеет место в идеальных проводниках так же, как и в сверхпроводниках. Здесь $D_x(0)$ и $B_y(0)$ тангенциальные компоненты электрической и магнитной индукции на поверхности проводника.

Данное исследование поддержано проектом РФФИ (18-02-00874, 17-29-10039 офи-м).

- [1] Dresvyannikov M. A., Chernyaev A. P., Karuzskii A. L., Mityagin Yu. A., Perestoronin A. V., Volchkov N. A. J. LowTemp. Phys. 185, 495–501 (2016). DOI:10.1007/s10909-016-1546-4
- [2] Dresvyannikov M. A., Chernyaev A. P., Karuzskii A. L., Kulbachinskii V. A., Mityagin Yu. A., Perestoronin A. V., Volchkov N. A. *Physical Science International Journal* 19 (3), 1–15 (2018); Article no.PSIJ.43533 DOI: 10.9734/psij/2018/43533 (https://doi.org/10.9734/psij/2018/43533)
- [3] London F. Superfluids. Vol. I: Macroscopic Theory of Superconductivity. NY: Dover Pub., 1961.
- [4] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. VIII. М.: Наука, 1992.
- [5] Силин В. П., Рухадзе А. А. Электромагнитные свойства плазмы и плазмоподобных сред. — М.: Госатомиздат, 1961.
- [6] Karuzskii A. L., Perestoronin A. V., Volchkov N. A., Zherikhina L. N., Chernyaev A. P. J. Phys.: Conf. Ser. 400, 022048/1-022048/4 (2012). DOI:10.1088/1742-6596/400/2/022048.

Научное издание

XVIII Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления»

г. Троицк (Москва)

Тезисы

Технический редактор А. В. Бакиев Компьютерный набор и верстка А. И. Ереметовой

Подписано в печать 11.08.2020. Формат 60×84¹/₁₆. Усл. печ. л. 5,81. Уч.-изд. л. 6,11. Гарнитура «Таймс». Бумага офсетная № 1. Печать цифровая. Заказ № 20-52.

АНО «Ижевский институт компьютерных исследований» 426053, г. Ижевск, ул. Ворошилова, д. 123, кв. 27. http://shop.rcd.ru E-mail: mail@rcd.ru Тел./факс: +7 (3412) 50-02-95

Отпечатано в цифровой типографии АНО «Ижевский институт компьютерных исследований».

Электронный спектр и электросопротивление в электронно-допированных купратах

Н. М. Плакида¹, Н. А. Бабушкина², А. А. Владимиров¹, К. И. Кугель³

¹ Объединённый институт ядерных исследований 141980, г. Дубна, Россия ² Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» 123182, г. Москва, Россия ³ Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, 125412, г. Москва, Россия

Проанализированы экспериментальные данные по температурной зависимости электросопротивления электронно-допированных купратов Nd_{2-x}Ce_xCuO₄ в широком интервале значений концентрации церия 0.12 < x < 0.20 [1]. Показано, что в широкой области температур выше сверхпроводящего перехода в основном наблюдается квадратичная зависимость электросопротивления от температуры, величина которой резко при концентрациях x > 0.17. Теоретический анализ на основе vменьшается микроскопической теории в рамках *t-J* модели для сильно коррелированных электронов показывает, что квадратичная зависимость электросопротивления от температуры определяется рассеянием электронов на спиновых возбуждениях [2]. Для их описания предложена модель антиферромагнитных (АФМ) спиновых флуктуаций в парамагнитной фазе, интенсивность которых зависит от АФМ корреляционной длины. Как показано на Рис. 1, полученная квадратичная зависимость электросопротивления от температуры хорошо согласуется с экспериментальными данными [1]. Сильное рассеяние электронов на спиновых возбуждениях обусловлено присутствием теневой дырочной зоной, показанной на Рис. 2 кривой с меньшей интенсивностью, смещенной на антиферомагнитный вектор относительно основной зоны, представленной кривой с большей интенсивностью.



Рис. 1. Температурная зависимость электросопротивления в логарифмическом масштабе (символы – эксперимент [1], теория - сплошные кривые [2]). **Рис. 2.** Спектральная плотность электронных возбуждений в зоне Бриллюэна.

[1] Бабушкина Н. А., Белова Л. М., Жернов А. П. и др. *ФНТ* 22, 1260 (1996).

[2] Бабушкина Н. А., Владимиров А. А., Кугель К. И., Плакида Н. М. ЖЭТФ 158 (2020).