



XIX КОНФЕРЕНЦИЯ «СКЭС-2022»

XIX КОНФЕРЕНЦИЯ «СКЭС-2022»

Сильно коррелированные электронные
системы и квантовые критические явления

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

ФИАН г. Москва
26 мая 2022 г.

ISBN 978-5-4344-0954-4



9 785434 409544

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

ФИАН, г. Москва
26 мая 2022 г.

СБОРНИК ТЕЗИСОВ



Москва ♦ Ижевск

2022

УДК 530.1(065)

ББК 22.31я43

XIX Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления» : сборник тезисов. — М.–Ижевск : Институт компьютерных исследований, 2022. — 262 с.

ISBN 978-5-4344-0954-4

Настоящий сборник содержит тезисы докладов, заявленных на XIX 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: «**Сильно коррелированные системы**», «**Системы в критической области. Фазовые переходы**», «**Топологически нетривиальные материалы**», «**Низкоразмерные, слоистые материалы и структуры. Тонкие пленки**», «**Сверхпроводимость. Сверхтекучесть. Бозе-конденсация**», «**Магнетизм. Магнитные структуры. Кондо-системы**», «**Спиновые эффекты и структуры. Спиновый транспорт и динамика**», «**Разное**».

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.

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

© Федеральное государственное бюджетное учреждение
Физический институт имени П.Н. Лебедева Российской
академии наук, 2022

ISBN 978-5-4344-0954-4

Программный комитет

- С.М. Стишов (ФИАН), председатель
- Е.И. Демихов (ФИАН), зам. председателя
- В.М. Пудалов (ФИАН), зам. председателя
- П.А. Алексеев (НИЦ «КИ»)
- П.И. Арсеев (ФИАН)
- С.И. Веденеев (ФИАН)
- М.М. Глазов (ФТИ РАН)
- В.Е. Дмитриенко (ИКАН)
- И.В. Кукушкин (ИФТТ РАН)
- С.В. Зайцев-Зотов (ИРЭ РАН)
- С.Г. Овчинников (ИФ СО РАН)
- А.И. Смирнов (ИФП РАН)
- С. В. Стрельцов (ИФМ УрО РАН)
- В.Б. Тимофеев (ИФТТ РАН)

Оргкомитет

- В.А. Степанов (ФИАН), председатель
- О.И. Акинфиева (ФИАН)
- Г.М. Елизарова (ФИАН)
- О.М. Иваненко (ФИАН)
- Н.Л. Истомина (ОФН РАН)
- Е.В. Кулебякина (ФИАН)
- А.Е. Петрова (ФИАН)
- Д.А. Саламатин (ИФВД)

Вступление

Настоящий сборник содержит тезисы докладов, представленных на XIX конференцию «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления», которая наконец состоится в очном формате в Физическом институте имени П.Н. Лебедева в Москве. Предыдущая XIX конференция, будучи объявленной в 2020 г., в явном виде не состоялась в связи с неблагоприятной эпидемиологической обстановкой, хотя представленные тезисы были изданы и разосланы всем авторам и участникам. Настоящая конференция привлекла рекордное количество участников, и организаторы конференции надеются на ее успех.

Содержание

Вступление	4
------------------	---

Сильно коррелированные системы

<i>Дьяченко А.А., Лукоянов А.В., Анисимов В.И., Оганов А.Р.</i> Электридные и корреляционные свойства в силицидах и германидах La и Ce.....	17
<i>Кулебякина Е.В., Скориков М.Л., Колобкова Е.В., Белых В.В.</i> Спектрально-временная динамика нанокристаллов перовскитов CsPb(Cl,Br) ₃ в матрице фторфосфатного стекла	19
<i>Leonov I.</i> Electronic structure and magnetic state of bulk and surfaces of strongly correlated electron compounds	20
<i>Ляхова Я.С., Рубцов А.Н.</i> Построение схемы флуктуирующего локального поля для расчета свойств низкоразмерных коррелированных систем	21
<i>Рябов А.А., Жилиев П.А.</i> Применение нейронной сети для аппроксимации обменно-корреляционного функционала.....	23
<i>Ткачѳв А.В., Гитцус А.А., Журенко С.В., Гунбин А.В., Шевельков А.В., Ли С.С.</i> Псевдощель в RuGa ₃ по данным ядерно-резонансной спектроскопии.....	26

Системы в критической области. Фазовые переходы

<i>Васин М.Г.</i> Критическая динамика вблизи квантовой критической точки.....	29
---	----

<i>Дубовский Л.Б.</i> Фазовый переход в магнитном поле при переходе из металлического состояния в изолятор: особенности поверхностного натяжения на границе «металл-изолятор»	31
<i>Dzhumanov S., Kurbanov U.T., Khudayberdiev Z.S., Karimboev E.X., Sheraliev M.U., Rashidov J.Sh.</i> Metal-insulator transitions, nanoscale phase separations and related high- T_c superconductivity in Bi-based cuprate compounds	31
<i>Мыльников В.Ю., Поташин С.О., Соколовский Г.С., Аверкиев Н.С.</i> Диссипативный фазовый переход в системах с двухфотонной накачкой и нелинейным поглощением вблизи критической точки	34
<i>Овчинников С.Г., Овчинникова Т.М.</i> Виртуальный спиновый кроссовер и переход диэлектрик-металл в NiO при высоком давлении	38
<i>Петрова А.Е., Гаврилкин С.Ю., Рыбальченко Г.В., Цветков А.Ю., Стишов С.М., Мензель Д., Зибров И.П., Белемук А.М., Хасанов С.</i> Физические свойства $(Mn_{1-x}Co_x)Si$ при $x \approx 0,060-0,17$: квантовая критичность	41
<i>Поносов Ю.С., Замятин Д.А.</i> Фазовые переходы в силваните при высоких давлениях	44
<i>Сайпулаева Л.А., Тебеньков А.В., Мельникова Н.В., Алибеков А.Г., Чехилов М.А., Бабушкин А.Н., Захвалинский В.С., Риль А.И., Маренкин С.Ф.</i> Фазовые переходы в $n-CdAs_2$ при высоком давлении	47
<i>Саламатин Д.А., Боков А.В., Сидоров В.А., Суровец З., Магницкая М.В., Щелкачёв Н.М., Виртель М., Будзинский М., Цвяценок А.В.</i> Структурные и магнитные свойства соединения $FeRhGe_2$	47
<i>Сидоров В.А., Зибров И.П., Филоненко В.П., Щелкачёв Н.М., Магницкая М.В.</i> Новая модификация VO_2 со структурой симпсонита: электронные транспортные, магнитные и термодинамические свойства и их эволюция при высоком давлении	49

<i>Tsvyashchenko A.V., Sidorov V.A., Nikolaev A.V., Seung-Ho Baek, Klimczuk T., Ronning F.</i> Probing of quadrupole-order-driven commensurate-incommensurate phase transition in B20 CoGe	51
<i>Якубеня С.М., Мищенко А.С.</i> Феноменологическая модель фотоиндуцированного фазового перехода из аморфной в кристаллическую фазу в $(GeTe)_n(Sb_2Te_3)_m$	53
Топологически нетривиальные материалы	
<i>Алисултанов З.З.</i> Исключительные линии, адиабатическая эволюция и числа Черна неэрмитовых вейлевских фермионов	55
<i>Вальков В.В.</i> Зарядовые флуктуации в проблеме энергетической структуры топологических изоляторов	57
<i>Родионов Я.И., Кугель К.И., Аронзон Б.А., Нори Ф.</i> Влияние беспорядка на поперечное магнитосопротивление в вейлевских полуметаллах	59
<i>Хачатрян А.Ш., Чарная Е.В., Марченков В.В.</i> Магнитные фазовые переходы в вейлевском полуметалле WTe_2 , легированном железом	60
<i>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.</i> Киральная нелокальная терагерцовая фотопроводимость в структурах на основе топологической фазы $Hg_{1-x}Cd_xTe$	62
<i>Дзедзисавили Д.М., Степаненко В.А., Шустин М.С.</i> Топологически нетривиальные магнитные структуры двумерных сильно коррелированных систем в неоднородном магнитном поле	63

Низкоразмерные, слоистые материалы и структуры.

Тонкие пленки

<i>Аминов А.Ф., Соколик А.А., Лозовик Ю.Е.</i> Эффект Андреева–Башкина в электрон-поляритонной системе	66
<i>Асфандиаров Н.Л., Муфтахов М.В., Сафронов А.М., Пшеничнюк С.А.</i> Нековалентные структуры отрицательных ионов, образующиеся при диссоциативном захвате электронов молекулами 1-хлорнафталина	69
<i>Воропаев Д.М., Фролов А.В., Орлов А.П., Синченко А.А., Монсо П.</i> Токово-временная и температурно-временная эволюции волны зарядовой плотности в квазидвумерных соединениях RTe_3	72
<i>Горбунов А.В., Тимофеев В.Б.</i> Пространственная когерентность магнитоэкситонного конденсата в холловском диэлектрике	73
<i>Горлова И.Г., Никонов С.А., Зыбцев С.Г., Покровский В.Я.</i> Особенности температурной зависимости фотопроводимости слоистого квазиодномерного полупроводника TiS_3	77
<i>Дмитриева О.А., Гиппиус Н.А., Тиходеев С.Г.</i> Нелинейно-оптические свойства экситон-поляритонов в киральном микрорезонаторе	79
<i>Дресвянкин Д.Н., Рожков А.В.</i> Магнитно-электронная неустойчивость графена на ферромагнитной подложке	80
<i>Загороднев И.В., Родионов Д.А.</i> Плазмон-поляритонные резонансы в проводящем диске	82
<i>Кон И.А., Зайцев-Зотов С.В.</i> Магнитосопротивление скользящей волны зарядовой плотности	84
<i>Зинин П.В., Романов Р.И., Фоминский В.Ю., Буга С., Филоненко В.П., Краснобородко С.Ю., Высоких Ю.Е., Кутуза И.Б.</i> Электрические свойства алмазоподобных пленок с большой концентрацией бора, полученных методом импульсного лазерного осаждения	86

<i>Зыбцев С. Г., Никонов С.А., Покровский В.Я.</i> Линейная и нелинейная фотопроводимость в квазиодномерном проводнике NbS_3	89
<i>Кислинский Ю.В., Константиныч К.И., Москаль И.Е., Петржик А.М., Шадрин А.В., Овсянников Г.А.</i> Тонкие пленки диэлектрического иридата стронция Sr_2IrO_4	92
<i>Кочерешко В.П., Savvidis P., Bessombes L., Mariette H.</i> Бозе-конденсация поляритонов в микрорезонаторах, индуцированная магнитным полем	94
<i>Кузьмин А.В., Хасанов С.С., Зверев В.Н.</i> Низкоразмерный органический проводник κ -BEDT-TTF $2Cu_2(CN)_3$: Cu^{2+} -примеси и их влияние на электронную структуру	95
<i>Кулик Л.В., Журавлев А.С.</i> Нейтральные возбуждения в лафлиновской жидкости	98
<i>Лозовик Ю.Е.</i> Экситоны в деформационном псевдомагнитном поле в графене: явления КЭХ	100
<i>Минакова В.Е., Зайцев-Зотов С. В.</i> Переход металл-диэлектрик, стимулированный одноосным растяжением кристаллов топологически нетривиального квазиодномерного проводника $TaSe_3$	102
<i>Mogilyuk T.I., Grigoriev P.D.,</i> Second harmonics of magnetic quantum oscillations in layered metals	105
<i>Никитин М.В., Зыбцев С.Г., Покровский В.Я.</i> Влияние ВЧ механических вибраций на проводимость волны зарядовой плотности	107
<i>Николаев А.В., Журавлёв М.Е.</i> Магнитные свойства широких уровней Ландау в окрестности седловой точки двумерной квадратной решетки	110
<i>Овешников Л.Н., Риль А.И., Стрельцов Д.Р., Каратеев И.А., Давыдов А.Б., Мехия А.Б., Аронзон Б.А.</i> Микроструктура и магнетотранспорт пленок Cd_3As_2 с различным уровнем кристалличности	111

Покровский В.Я., Зыбцев С.Г., Никитин М.В., Никонов С.А., Логинов Б.А.
Синхронизация скольжения волн зарядовой плотности электрическими и механическими колебаниями 113

Провоторов П.В., Левченко А.А., Классен Н.В.
Особенности корреляций сверхструктур при интенсивных испарениях металлов 116

Ратников П.В., Силин А.П.
Трионный газ, электронно-дырочная жидкость и переход «металл–диэлектрик» в легированных гетероструктурах на основе дихалькогенидов переходных металлов 119

Рахманов А.Л., Рожков А.В., Сбойчаков А.О.
Электронные свойства двухслойного графена со структурой AA 123

Рожков А.В., Сбойчаков А.О., Рахманов А.Л.
Электронная нематичность двухслойного подкрученного графена 126

Синченко А.А., Монсо П.
Аксионная волна зарядовой плотности в $(\text{TaSe}_4)_2\text{I}$? 127

Цебрук И.С., Винокуров С.А., Классен Н.В., Кедров В.В., Покидов А.П.
Особенности деформационно-химического формирования сверхструктур в композициях «органика–неорганика» 129

Чибирев А.О., Павлов Д.П., Леонтьев А.В., Банников М.И., Гарифьянов Н.Н., Мамин Р. Ф.
Исследование проводящих свойств интерфейсов гетероструктур сегнетоэлектрик/диэлектрик 132

Сверхпроводимость. Сверхтекучесть. Бозе-конденсация

Голубков М.В., Степанов В.А., Садаков А.В. Усольцев А.С., Морозов И.В.
Характеристики тока пар в точечных контактах Джозефсона $\text{Pb}_{0,6}\text{In}_{0,4}/\text{K}(\text{Ba})\text{Fe}_2\text{As}_2$ и $\text{K}(\text{Ba})\text{Fe}_2\text{As}_2/\text{K}(\text{Ba})\text{Fe}_2\text{As}_2$ 135

Гунбин А.В., Журенко С.В., Ярыгина Д.А., Ткачев А.В., Гунтус А.А., Верченко В.Ю., Шевельков А.В.
Исследование сверхпроводящего интерметаллида $\text{Mo}_4\text{Ga}_{20}\text{Sb}$ в нормальном и сверхпроводящем состоянии методом ЯМР-и ЯКР-спектрокопии 136

Dzhumanov S., Khidirov I., Nodirbekov M.S., Djumanov Sh.S.
Novel superconducting states and room-temperature superconductivity in doped cuprates with small Fermi energies 138

Дмитриев В.В., Кутузов М.С., Солдатов А.А., Юдин А.Н.
Сверхтекучая бета-фаза жидкого ^3He 141

Дмитриев В.В., Солдатов А.А., Юдин А.Н.
Свойства полярной фазы ^3He в нематическом аэрогеле 144

Dmitrienko V.E., Chizhikov V.A.
Multipolar spin structure in the pseudogap phase of high- T_c superconductor $\text{HgBa}_2\text{CuO}_4$: magnetic symmetry and *ab initio* simulations 145

Каракозов А.Е.
Свойства сверхпроводящего состояния в трехзонной модели 146

Кузьмичев С.А., Кузьмичева Т.Е., Морозов И.В., Болталин А.И., Шилов А.И.
Трехщелевая сверхпроводимость LiFeAs : прямое экспериментальное наблюдение методами спектроскопии многократных андреевских отражений 150

Кузьмичева Т.Е., Кузьмичев С.А., Перваков К.С., Власенко В.А., Морозов И.В., Болталин А.И., Шилов А.И.
Эволюция сверхпроводящего параметра порядка с электронным допированием в арсенидах и селенидах железа семейства 122 методами спектроскопии многократных андреевских отражений 154

Кульбачинский В.А., Ёжиков Н.С., Булычев Б.М.
Сверхпроводимость органометаллических фуллеридов $\text{M}_{(3-n)}(\text{NR}_4)_{(n)}\text{C}_{60}$, $\text{M} = \text{K}, \text{Rb}$; $\text{R} = \text{H}, \text{D}, \text{Me}, \text{Et}, \text{Bu}$; $n = 1, 2, 3$ 158

<i>Мазов Л.С.</i> О проблеме реализации комнатнотемпературной сверхпроводимости в сильно коррелированных электронных системах	161
<i>Москвин А.С., Панов Ю.Д.</i> Природа ВТСП купратов и никелатов.....	165
<i>Netesova N.P., Arakelyan S.R., Arakelyan E.A.</i> Electron plasma parameter superconducting crystals.....	167
<i>Павлов Н.С., Шеин И.Р., Перваков К.С., Некрасов И.А.</i> Исследование электронной структуры в ряде изоструктурных аналогов железных сверхпроводников.....	170
<i>Plakida N.M., Nguen Dan Tung, Vladimirov A. A.</i> Electronic spectrum and superconductivity in the extended t-J-V model.....	172
<i>Рязанов В.В., Голикова Т.Е., Вольф М.Дж., Бекманн Д., Пензяков Г.А., Батов И.Е., Бобкова И.В., Бобков А.М.</i> Влияние SF-близости и неравновесной спиновой инжекции на сверхпроводящие токи в джозефсоновских переходах «сверхпроводник (S)–нормальный металл (N)–сверхпроводник (S)».....	173
<i>Троян И.А., Любутин И.С.</i> Эксперименты по синтезу и исследованию сверхпроводимости в некоторых полигидридах металлов при мегабарных давлениях.....	174
<i>Фомин И.А.</i> Параметр порядка триплетного сверхпроводника UTe_2 согласующийся с наблюдаемой в нем аномалией верхнего критического поля	178
<i>Хлюстиков И.Н.</i> Поверхностная сверхпроводимость на примере свинца и ванадия.....	179
<i>Tsar'kov I.M., Kopasov A.A., Mel'nikov A.S.</i> Vortex phase transitions in superconductors with modulated disorder.....	180
<i>Shaginyan V.R.</i> Effect of superconductivity on the shape of flat bands	184

Магнетизм. Магнитные структуры. Кондо-системы

<i>Alekseev P.A., Lazukov V.N., Savchenkov P.S.</i> Cooperative and local features of the spin gap formation in the Kondo insulators YbB_{12} and $CeFe_2Al_{10}$	186
<i>Белемук А.М., Стужиов С.М.</i> Влияние примесей на фазовые переходы в киральных магнетиках	186
<i>Богословский Н.А., Петров П.В., Аверкиев Н.С.</i> Неупорядоченная модель Изинга: численное моделирование и аналитическое решение	187
<i>Боков А.В., Саламатин Д.А., Покатилов В.С., Саламатин А.В., Величков А., Михин М.В., Гроздов Д.С., Вергель К.Н., Сигов А.С., Макарова А.О., Будзинский М., Цвяиценко А.В.</i> Сверхтонкие взаимодействия в мультиферроиках $Bi_{1-x}La_xFeO_3$ ($x = 0,0225, 0,075, 0,9$).....	189
<i>Болобаев К.С., Козлякова Е.С., Морозов И.В., Воробьёва А.А., Васильчикова Т.М., Раганян Г.В.</i> Исследование магнитных свойств в соединении с 1D-магнитной структурой $Cu_2(CCl_3COO)_3(OH)(H_2O)_5$	192
<i>Gavrichkov V.A., Polukeev S.I.</i> Magnetic interaction in doped 2D perovskites with nanoscale inhomogeneity: lattice nonlocal effects vs. superexchange.....	194
<i>Grigoriev S.V., Utesov O.I., Chubova N.M., Azarova L.A., Siegfried S.-A., Heinemann A., Menzel D.</i> Magnetic transition from spiral to ferromagnetic structure in B20 compounds $Fe_{1-x}Co_xSi$: small angle neutron scattering study.....	197
<i>Журенко С.В., Ткачёв А.В., Гервиц Н.Е., Гунбин А.В., Силкин И.Г., Морозов И.Г., Москвин А.С., Гунтиус А.А.</i> Эволюция магнитной структуры $FeP_{1-x}As_x$ при замещении фосфора на мышьяк.....	198

<i>Крылов М.С.</i> Опрокидывание спинов ромбоэдрического кристалла FeCO_3 под действием внешнего магнитного поля	200
<i>Лис О.Н., Козленко Д.П., Кичанов С.Е., Лукин Е.В.</i> Влияние высокого давления на кристаллические и магнитные структуры ван-дер-ваальсовых магнетиков	203
<i>Моськин А.В., Козлякова Е.С., Шванская Л.В., Васильев А.Н.</i> Синтез и изучение магнитной подсистемы $\text{Cs}_2\text{Cu}_3(\text{SeO}_3)_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	204
<i>Муртазаев К.Ш., Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Магомедов М.А.</i> Влияние магнитного поля на спиновый антиферромагнетик с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей	206
<i>Радионов М.С., Климин С.А., Песчанский А.В.</i> Исследование спектра спиновых возбуждений 2D-магнетика LiNiPO_4 методом ИК-спектроскопии	210
<i>Савченков П.С., Алексеев П.А., Лазуков В.Н.</i> Особенности магнетизма в системах с синглетным основным состоянием: влияние промежуточно-валентных ионов на дальний магнитный порядок	212
<i>Сканченко Д.О., Алтынбаев Е.В., Сидоров А.В., Chaboussant G., Martin N., Петрова А.Е., Саламатин Д.А., Григорьев С.В., Цвященко А.В., Щелкачев Н.М., Магнитская М.В.</i> Расслоение магнитной и кристаллической структур в соединениях $\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Ge}$	214
<i>Утёсов О.И.</i> Магнитное дипольное взаимодействие и делокализация элементарных возбуждений в квантовых магнетиках	216
<i>Чижиков В.А., Дмитриенко В.Е.</i> Вклад антиферромагнитных спиновых скосов в закрутку магнитных спиралей в кубических хиральных гелимагнетиках	218

<i>Шутикова М.И., Стегайлов В.В.</i> Энергия образования пары Френкеля в кубической фазе магнетита в рамках DFT+U	221
Спиновые эффекты и структуры. Спиновый транспорт и динамика	
<i>Гервиц Н.Е., Ткачев А.В., Журенко С.В., Гунбин А.В., Ломанова Н.А., Данилович Д.П., Богач А.В., Гиппиус А.А.</i> Влияние размера нанокристаллитов на пространственную спин- модулированную структуру	223
<i>Glazkov V.N., Krasnikova Yu.V., Furuya S.C., Povarov K.Yu., Blosser D., Zheludev A.</i> Soliton excitations in a high-field phase of a strong-rung spin ladder	225
<i>Григорьев П.Д., Рамазаивили Р., Карцовник М.В.</i> Зеемановское спин-орбитальное взаимодействие и эффективный g-фактор электронов, наблюдаемый из квантовых осцилляций в антиферромагнитных металлах	227
<i>Овсянников Г.А., Константиан К.И., Калачев Е.А., Климов А.А., Шадрин А.В., Шмаков В.А.</i> Спиновый транспорт на границе гетероструктуры «иридат/манганит»	230
<i>Орлов Ю.С., Николаев С.В., Дудников В.А., Гавричков В.А., Овчинников С.Г.</i> Особенности спиновых кроссоверов в магнитных материалах	233
<i>Смирнов А.И., Солдатов Т.А., Поваров К.Ю., Старых О.А.</i> Взаимодействие спинов в цепочечном антиферромагнетике. Наблюдение с помощью магнитного резонанса	236
<i>Солдатов Т.А., Смирнов А.И.</i> Спиновая динамика фрустрированного квантового магнетика $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$	238

Streltsov S.V., Khomskii D.I.
Interplay between Jahn-Teller effect and spin-orbit coupling241

Сыромятников А.В.
Новые элементарные возбуждения в антиферромагнетике
со спином 1/2 на треугольной решетке242

Разное

Винокуров С.А., Классен Н.В., Орлов А.Д., Цебрук И.С.
Автоколебания кристаллизации солей металлов из водных
растворов в электрическом поле246

Классен Н.В., Провоторов П.В., Цебрук И.С.
Корреляции оптических и структурных превращений
при многофотонном возбуждении молекулярных сред249

*Новикова Н.Н., Яковлев В.А., Белов А.Г., Молодцова Е.В., Козлов Р.Ю.,
Климин С.А.*
Плазмон-фононное взаимодействие в кристаллах GaSb,
легированных теллуром253

Pozdneev S.A.
Dissociative electron attachment254

Pozdneev S.A.
Bound and scattering states in three noble gas atoms in three body
approximation256

Pozdneev S.A.
Application of the few-body quantum theory of scattering for guided
control of chemical reaction and creation of the new molecular structures...258

Pozdneev S.A.
Resonances in electron scattering by molecules259

СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫЕ СИСТЕМЫ

Электридные и корреляционные свойства в силицидах и германидах La и Ce

А.А. Дьяченко^{1,2}, А.В. Лукоянов^{1,2,3}, В.И. Анисимов^{1,2,3}, А.Р. Оганов²

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева
Уральского отделения РАН, г. Екатеринбург, Россия

²Сколковский институт науки и технологий, г. Москва, Россия

³Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

Интерметаллическое соединение лантана LaScSi известно благодаря своим электридным свойствам, возникающим в результате большого числа анионных электронов в межатомном пространстве кристалла, в результате чего LaScSi обладает сильной каталитической активностью в реакциях синтеза аммиака [1]. В данной работе электронные, спектральные и магнитные свойства редкоземельных соединений RE₂ScSi и RE₂ScGe (RE = La, Ce) [2] были впервые исследованы при помощи метода DFT + DMFT. Проведенные теоретические расчеты показали минимальный эффект учета электронных корреляций в исследуемых соединениях лантана. Однако в CeScSi и CeScGe происходит сильная ренормализация электронной плотности вследствие сильных электронных корреляций в 4f-оболочке церия, что приводит к формированию хаббардовских зон вблизи локализованных 4f-состояний. Полученные спектральные функции, а также веса электронных конфигураций 4f-состояний церия указывают на определенную схожесть с β- и γ-фазами церия.

Проведенные нами расчеты также позволили выявить сильную локализацию электронов в межатомном пространстве $REScSi$ и $REScGe$ ($RE = La, Ce$), а именно в октаэдрах RE_2Sc_4 всех четырех интерметаллидов. С помощью метода максимально локализованных функций Ванье мы установили, что в электридный анион (октаэдры RE_2Sc_4) вносят вклад редкоземельные $5d$ -состояния и $3d$ -состояния скандия. Зонная структура и плотности электронных состояний, полученные при проектировании функций Ванье, указывают на локализацию электридных состояний вблизи уровня Ферми. Как показывают частичные функции электронной локализации, другая возможная позиция формирования электридного аниона RE_4 тетраэдра, содержит только небольшое количество делокализованных электронов. С другой стороны, Ванье-проекция функций электронной локализации позволила сделать оценку степени вкладов различных атомов в электридные анионы. Для RE_2Sc_4 октаэдров $3d$ -состояния скандия дают наибольший вклад, в то время как делокализованные RE_4 тетраэдры сформированы в основном за счет редкоземельных $5d$ -состояний. Таким образом, хотя размер электридного аниона в $REScSi$ и $REScGe$ ($RE = La, Ce$) зависит от La или Ce в составе интерметаллида, наши расчеты указывают на большую схожесть электридной плотности в исследованных силицидах и германидах La и Ce.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-72-30043.

Список литературы

- [1] Wu J., Gong Y., Inoshita T., Fredrickson D.C., Wang J., Lu Y., Kitano M., Hosono H. *Adv. Mater.*, **29**, 1700924 (2017).
- [2] Dyachenko A.A., Lukoyanov A.V., Anisimov V.I., Oganov A.R. *Phys. Rev. B*, **105**, 085146 (2022).

Спектрально-временная динамика нанокристаллов перовскитов $CsPb(Cl,Br)_3$ в матрице фторфосфатного стекла

Е.В. Кулебякина^{1,*}, М.Л. Скориков¹, Е.В. Колобкова^{2,3}, В.В. Белых¹

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

²Университет ИТМО, г. Санкт-Петербург, Россия

³Политехнический университет им. Петра Великого,
г. Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: kulebyakinaev@lebedev.ru

Металлогалогенидные перовскиты представляют собой класс материалов с общей формулой ABX_3 , где А — органический (например, MA, $CH_3NH_3^+$) или неорганический (например, Cs^+) катион, В — двухвалентный катион (например, Pb^{2+}), X — анион галогенида (Cl^- , Br^- и I^- или смесь из перечисленных галогенидов). Несмотря на то что эти материалы известны уже несколько десятилетий, значительный интерес к ним возник сравнительно недавно [1, 2]. Он связан с развитием технологии и, как следствие, с возможностью применять полученные нанокристаллы (НК) в оптоэлектронных устройствах из-за превосходных свойств этих материалов. К ним относятся относительно большая длина диффузии, большая подвижность, узкополосное излучение с высоким квантовым выходом фотолюминесценции (ФЛ). За счет изменения формы и состава НК диапазон излучения таких устройств довольно велик и охватывает не только видимый диапазон, но и ультрафиолетовый и ближний инфракрасный. Оптоэлектронные устройства на основе НК перовскитов, изготовленные и протестированные в лабораторных условиях, показали довольно высокий результат, однако понимание фундаментальной физики процессов, происходящих в данных материалах, остается не до конца ясным.

В данной работе исследовались спектры и динамика ФЛ НК перовскитов $CsPb(Cl, Br)_3$ в матрице фторфосфатного стекла [3]. Для возбуждения ФЛ при измерении стационарных спектров использовался полупроводниковый лазер (405 нм), динамики ФЛ — вторая гармоника титансапфирового лазера (400 нм). Измерения проводились в широком температурном диапазоне, от 6 до 270 К. Отличительной особенностью кинетики ФЛ является наличие и быстрой, и медленной компоненты, что, ве-

роятнее всего, связано с темным и светлым экситонными состояниями. При низких температурах (6–35 К) медленная компонента затухает неэкспоненциально до микросекундных времен включительно. С дальнейшим ростом температуры вклад медленной компоненты продолжает увеличиваться, а время ее затухания уменьшается, тем самым указывая на то, что темное состояние является основным. Немонотонное поведение стационарных спектров ФЛ в области температур 100–150 К связано со структурным фазовым переходом в нанокристаллах данного состава.

Список литературы

- [1] Protesescu L., Yakunin S., Bodnarchuk M.I., Krieg F., Caputo R., Hendon C.H., Yang R.X., Walsh A., and Kovalenk M.V. *Nano Lett.*, **15**, 3692–3696 (2015).
- [2] Makarov N.S., Guo S., Isaienko O., Liu W., Robel I. and Klimov V.I., *Nano Lett.*, **16**, 2349–2362 (2016).
- [3] Kolobkova E.V., Kuznetsova M.S., Nikonorov N.V., *Journal of Non-Crystalline Solids*, **563**, 120811 (2021).

Electronic structure and magnetic state of bulk and surfaces of strongly correlated electron compounds

I. Leonov

M.N. Miheev Institute of Metal Physics, Russian Academy of Sciences,

Yekaterinburg, Russia

E-mail: ivan.v.leonov@yandex.ru

The theoretical understanding of the electronic structure and magnetic properties of strongly correlated electron systems has been among the main research topics of materials science and condensed matter physics over the past several decades [1, 2]. In such materials the complex interplay between electronic correlations and the spin, charge, orbital, and lattice degrees of freedom leads to a wealth of ordering phenomena and formation of complex quantum phases, which makes these compounds highly attractive for techno-

logical applications. In spite of intensive research over several past decades, a theoretical understanding of the electronic structure, magnetism, and phase stability of such compounds near the Mott or quantum phase transitions still remains elusive. In this talk, I will discuss an application of the novel computational scheme — DFT + dynamical mean-field theory (DFT + DMFT) to explore the interplay of electron-electron correlations, magnetism, and surface effects in the prototypical correlated insulating material, NiO [3-5]. In particular, I will present an application of DFT + DMFT to study the interplay of electron correlations and magnetic long-range order in bulk NiO under high pressure and discuss the electronic structure and surface energies of the (001), (110), and (111) NiO in the paramagnetic state.

Reference

- [1] Georges A., Kotliar G., Krauth W., Rozenberg M.J. *Rev. Mod. Phys.*, **68**, 13 (1996).
- [2] Kotliar G., Vollhardt D. *Physics Today*, **57**, 53 (2004).
- [3] Leonov I., Biermann S. *Phys. Rev. B*, **103**, 165108 (2021).
- [4] Leonov I., Shorikov A.O., Anisimov V.I., Abrikosov I.A. *Phys. Rev. B*, **101**, 245144 (2020).
- [5] Leonov I., Pourovskii L., Georges A., Abrikosov I.A. *Phys. Rev. B*, **94**, 155135 (2016).

Построение схемы флуктуирующего локального поля для расчета свойств низкоразмерных коррелированных систем

Я.С. Ляхова^{1,2}, А.Н. Рубцов^{1,3}

¹*Российский квантовый центр, Сколково, г. Москва, Россия*

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

³*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
г. Москва, Россия*

В последние десятилетия бурно развивается направление многочастичной квантовой физики, связанное с описанием коррелированных сис-

тем. В немалой степени такой интерес вызван рядом открытий: высокотемпературные сверхпроводящие купраты [1] и «нестандартные» сверхпроводники [2], спиновые жидкости [3], атомы в оптических решетках [4]. Активные исследования в этой области показали, что причиной многих важных эффектов в этих системах являются корреляции, вызывающие флуктуации коллективных степеней свободы. Построение эффективных методов описания нелокальных корреляций является одной из важнейших задач современной теоретической физики.

На сегодняшний день разработано множество вычислительных схем, позволяющих в той или иной степени подобраться к решению данной проблемы. Все они, однако, не лишены недостатков. К ним относятся, например, нефизичные численные артефакты семейства среднеполевых методов, ограничения на величину и тип флуктуаций диаграммных рядов вокруг DMFT (динамическая теория среднего поля), несоответствие геометрии моделей кластерных методов исследуемой физической системе.

В 2018 году в работе [5] был предложен качественно новый метод описания коллективных флуктуаций в многочастичных системах, получивший название метода флуктуирующего локального поля (FLF). В основу метода положено точное преобразование статистической суммы: в рассмотрение вводится ансамбль систем, отличающихся разной величиной локального поля, сопряженного с исследуемым (лидирующим) каналом флуктуаций. Метод был успешно применен для описания 2D-хаббардовских кластеров [5] и 1D-хаббардовских цепочек [6] в слабо и умеренно коррелированном режиме. К настоящему моменту авторами доклада разработана численная схема FLF, позволяющая описывать решеточные модели в сильно коррелированном режиме.

Показано, что вычисления, проводимые по методу FLF, позволяют получать результаты, близкие к точным. FLF, развитый на базе среднеполевых теорий, снимает проблему нефизичных фазовых переходов. Важно отметить, что FLF не накладывает принципиальных ограничений на количество учитываемых в расчетах флуктуирующих мод, а также на их величину и одинаково хорошо работает в широком диапазоне параметров взаимодействия. Кроме того, FLF требует небольших вычисли-

тельных затрат. Всё это делает FLF перспективным численным методом физики коррелированных систем.

Работа Я.С.Л. выполнена при поддержке программы «Приоритет-2030» НИЯУ МИФИ.

Список литературы

- [1] Bednorz J.G., Muller K.A. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, **64** (2), 189 (1986).
- [2] Mackenzie A.P., Maeno Y. *Reviews of Modern Physics*, **75** (2), 657 (2003).
- [3] Lee P.A., Nagaosa N., Wen X.G. *Reviews of Modern Physics*, **78** (1), 17 (2006).
- [4] Bakr W.S. et. al. *Nature*, **462** (7269), 74 (2009).
- [5] Rubtsov A.N., Stepanov E.A., Lichtenstein A.I. *Phys. Rev. B*, **102**, 224423 (2020).
- [6] Lyakhova Y.S., Stepanov E.A., Rubtsov A.N. *Phys. Rev. B*, **105**, 035118 (2022).

Применение нейронной сети для аппроксимации обменно-корреляционного функционала

А.А. Рябов^{1,2,*}, П.А. Жилиев¹

¹Сколковский институт науки и технологий,
г. Москва, Большой бульвар д. 30, стр. 1, Россия

²Московский физико-технический институт, Московская область,
г. Долгопрудный, Институтский переулок, д. 9, Россия

*E-mail: ryabov.alexandr@phystech.edu

Теория функционала плотности (DFT) является одним из важнейших подходов к решению уравнения Шрёдингера для многих тел. Важной частью DFT является обменно-корреляционный (XC) функционал, который не может быть получен в аналитическом виде. Соответственно, повышение точности теории функционала плотности в основном базируется на развитии приближений обменно-корреляционного функционала. Обычно эти приближения строятся с применением аналитических асимптотик низкой и высокой плотностей и являются результатом расчетов

квантовых методов Монте-Карло или пост-хартри-фоковских методов. Различные параметризации используют эвристические правила для построения определенного функционала ХС. Подход нейронной сети (NN) может дать единый путь для параметризации ХС-функционала. Кроме того, данные из многих существующих квантово-химических баз данных могут повысить точность ХС-функционала.

В данной работе мы продолжили нашу работу [1], в которой нейронная сеть успешно аппроксимировала обменно-корреляционный потенциал. В новой работе нейросетевой ХС-функционал (NN ХС) дает как потенциал, так и соответствующую плотность обменно-корреляционной энергии (функционал) [2]. Основные задачи нашего исследования: проверить, возможно ли интерполировать потенциал и функционал с помощью NN, исследовать поведение NN ХС в самосогласованном цикле, а также проверить эффективность полученных нейросетевого функционала и потенциала в расчетах на датасете IP13/03, который не применялся при обучении нейросети. Также важной задачей являлось выявление ключевых особенностей, которым должен удовлетворять нейросетевой обменно-корреляционный функционал.

Для генерации обучающей выборки использовался программный код Octopus для расчетов ТФП (real space). Для расчетов использовались такие вещества, как кремний, бензол, аммиак, по 10 расчетов на каждое, с различной деформацией. Таким образом, общий размер датасета составил 5,2 млн (локальных точек). Использовались стандартные параметризации обменной и корреляционной энергии обобщенного градиентного приближения функционала PBE [3].

Предлагаемая архитектура NN состоит из двух частей: NN-E и NN-V. NN-E предсказывала плотность обменно-корреляционной энергии, а NN-V — обменно-корреляционный потенциал. Эти части обучались двухстадийным методом, с применением пакета машинного обучения Pytorch.

Входные параметры NN-E

1. Электронная плотность n
2. $\sigma = \langle \nabla n, \nabla n \rangle$

Выходной параметр NN-E — ϵ_{xc}

Входные параметры NN-V

1. ϵ_{xc}
2. n
3. $\sigma = \langle \nabla n, \nabla n \rangle$
4. $\gamma = \langle \nabla \sigma, \nabla n \rangle$
5. Δn

Выходной параметр NN-V — V_{xc} .

Далее в таблице 1 приведены результаты на тренировочной выборке для отдельных веществ.

Таблица 1. Результаты тестирования обученной нейросети на тренировочной выборке. MSE — среднеквадратичная ошибка, MAE — средняя абсолютная ошибка

	V_{xc}^{MSE}	V_{xc}^{MAE}	ϵ_{xc}^{MSE}	ϵ_{xc}^{MAE}
Бензол	$1 \cdot 10^{-6}$	$6 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-4}$
Кремний	$1 \cdot 10^{-6}$	$4 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-3}$
Аммиак	$3 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-6}$	$4 \cdot 10^{-4}$

Мы выбрали набор данных IP13/03 для тестирования предлагаемого нейросетевого функционала. Разработанный нейросетевой функционал был внедрен в код Octopus и выполнены расчеты в самосогласованном цикле. В качестве референса использован функционал PBE, который использовался для обучения нейронной сети. Относительные ошибки полной и обменно-корреляционной энергий представлены в таблице 2.

Таким образом, разработанная нейросетевая модель даёт приемлемые результаты для случая обобщенного градиентного приближения. Нейросетевые обменно-корреляционные функционалы и потенциалы показывают приемлемую ошибку на реальных физических системах из датасета IP13/03.

Список литературы

- [1] Ryabov A., Akhatov I., and Zhilyaev P. Neural network interpolation of exchange-correlation functional. *Sci. Rep.*, **10**, 8000 (2020).

Таблица 2. Результаты тестирования NN XC на подмножестве набора данных IP13/03. E_{total} и E_{xc} обозначают полную энергию и обменно-корреляционную энергию, полученные после сходимости

	E_{total} error, %	E_{xc} error, %
C	0,052	0,287
S	0,015	0,102
SH	0,021	0,007
Cl	0,010	0,035
OH	0,554	1,036
Cl	0,001	0,035
O	1,556	4,029
P	0,008	0,071
O ₂	0,646	2,482
PH	0,014	0,050
PH ₂	0,011	0,023
S ₂	0,023	0,040
Si	0,003	0,253

- [2] Ryabov A. and Zhilyaev P. Application of neural network for exchange- correlation functional interpolation (2021). arXiv:2112.04881
- [3] Perdew J.P., Burke K., and Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 3865 (1996).

Псевдощель в RuGa₃ по данным ядерно-резонансной спектроскопии

А.В. Ткачѳв¹, А.А. Гиипиус^{1,2}, С.В. Журенко¹, А.В. Гунбин¹,
А.В. Шевельков², С.С. Лие³

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

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

³National Cheng Kung University, Taiwan

Интерметаллические соединения со структурой типа IrIn₃, образованные *p*- и *d*-элементами, известны проявлением выраженных полупро-

водниковых свойств. Также среди них часто встречаются перспективные термоэлектрические системы, что обусловлено специфической *p-d*-гибридизацией, приводящей к формированию узких пиков плотности состояний вблизи уровня Ферми [1]. При этом подробное исследование транспортных свойств отдельных представителей данного класса соединений выявило проявления внутрищелевых состояний, подтвержденных также оптической спектроскопией [2] и измерениями ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР) [3].

В работе изучался типичный представитель данного класса RuGa₃, также демонстрирующий хорошие термоэлектрические свойства и выраженные признаки псевдощелевого полупроводника [4]. Методами ядерного магнитного резонанса (ЯМР) и ЯКР были исследованы обе позиции галлия, высокосимметричный Ga1 и низкосимметричный Ga2. Узкие линии ЯКР (~ 15 кГц) свидетельствуют о высокой степени кристаллического порядка исследуемого образца в полном согласии с данными рентгеновской дифракции, однако спин-решеточная релаксация проявляет ряд необычных свойств. В частности, ниже 40 К, в характерной области температур перехода от прыжкового к активационному типу проводимости внутрищелевых состояний, обе позиции галлия демонстрируют расщепление релаксационных кривых на две компоненты. При этом медленно релаксирующая компонента доминирует сразу после расщепления, но ее удельный вес монотонно снижается вместе с температурой. Аналогичное расщепление наблюдается также для Ga2 в области температур 70–150 К, примерно соответствующей переходу к металлическому типу проводимости за счет внутрищелевых состояний.

Помимо основных Ga1,2 были также выявлены низкочастотные субпозиции Ga1' и Ga2', природа которых остается не вполне ясной. Они демонстрируют значительно более низкую степень порядка локального окружения, что может указывать на их связь с формированием внутрищелевых состояний.

Список литературы

- [1] Amagai Y., Yamamoto A., Lee C.H., Takazawa H., Noguchi T., Obara H., Iida T. & Takanashi Y., Thermoelectric properties of semiconducting intermetallic

- compounds: FeGa₃ and RuGa₃, *MRS Online Proc. Libr.* vol. 793, no. 1, pp. 359–364, May 2004, doi: 10.1557/PROC-793-S8.38.
- [2] Knyazev Y.V. and Kuz'min Y.I. The study of the structure of the electronic states of the FeGa₃ and RuGa₃ compounds by optical spectroscopy method, *Phys. Solid State* 5911, vol. 59, no. 11, pp. 2244–2247, Nov. 2017, doi: 10.1134/S1063783417110154.
- [3] Gippius A.A. et al. Interplay between localized and itinerant magnetism in Co-substituted FeGa₃, *Phys. Rev. B – Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 89, no. 10, p. 104426, Mar. 2014, doi: 10.1103/PHYSREVB.89.104426
- [4] Gamza M.B., Tomczak J.M., Brown C., Puri A., Kotliar G., and Aronson M.C. Electronic correlations in FeGa₃ and the effect of hole doping on its magnetic properties, *Phys. Rev. B – Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 89, no. 19, p. 195102, May 2014, doi: 10.1103/PHYSREVB.89.195102

СИСТЕМЫ В КРИТИЧЕСКОЙ ОБЛАСТИ. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

Критическая динамика вблизи квантовой критической точки

М.Г. Васин

Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН,

г. Москва, 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 ограничено временем когерентности этой системы. При этом остается открытым вопрос, каким образом диссипация влияет на критическое поведение вблизи квантовой критической точки. А такое влияние существует, на что, например, указывает 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 данный подход в критической динамике, 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 квантовой критической точки квантово-классический кроссовер критических показателей (см. рис. 1, где T/ω_0 — отношение энергии тепловых флуктуаций к энергии нулевых колебаний системы).

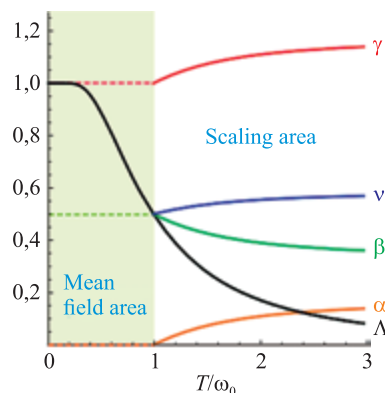


Рис. 1

Список литературы

- [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 et al. *Phys. Rev. B* **101**, 195135 (2020).
- [6] Vasin M.G., Ryzhov V.N., Vinokur V.M. *Scientific Reports*, **5**, 18600 (2015).
- [7] Vasin M.G., Vinokur V.M. *Physica A*, **575** 126035 (2021).

Фазовый переход в магнитном поле при переходе из металлического состояния в изолятор: особенности поверхностного натяжения на границе «металл–изолятор»

Л.Б. Дубовский

НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия

Переход «металл–изолятор» в кристаллическом состоянии является переходом из состояния, когда электронные зоны перекрываются к состоянию, когда перекрытия нет [1]. На основе феноменологической теории [2] рассмотрены различные особенности поверхностного натяжения в магнитном поле на границе «металл–изолятор». В том числе поверхностное натяжение демонстрирует квантовые магнитные осцилляции при низких температурах типа эффекта де Гааза – ван Альфена. При наличии корреляций в электронной системе рассмотрены особенности поверхностного натяжения при фазовом переходе в моттовский изолятор.

Список литературы

- [1] Mott N.F. *Metal-Insulator*, 2nd ed. (Taylor Francis, London, New York, Philadelphia, 1990).
- [2] Dubovskii L. *JETP Letters* **99**, No. 1, pp. 22–26 (2014); *J. Low Temp. Phys.* **182**, 192–205 (2016); *Physica B* **536**, 469–473 (2018).

Metal-insulator transitions, nanoscale phase separations and related high- T_c superconductivity in Bi-based cuprate compounds

S. Dzhumanov, U.T. Kurbanov, Z.S. Khudayberdiev, E.X. Karimboev,
M.U. Sheraliev, J.Sh. Rashidov

*Institute of Nuclear Physics, Uzbek Academy of Sciences,
Ulugbek, Tashkent, Uzbekistan*

Investigation of the mechanisms of metal-insulator transitions and nanoscale separation of insulating and metallic/superconducting phases in

high-temperature copper-oxide-based superconductors (high- T_c cuprates) is of great interest. Since these interrelated phenomena, underlie the new electronic properties of doped high- T_c cuprates. In these materials the processes of the localization, delocalization and Cooper pairing of charge carriers and subsequent condensation of Cooper pairs into a superfluid state determine their dielectric, metallic and superconducting properties. The one-electron band theory [1] and the Bardeen–Cooper–Schrieffer (BCS) theory of superconductivity [2] have been very successful in describing insulating, metallic and superconducting states in conventional metals. But these theories are turned to be inadequate for more complex systems, such as transition metal oxides (including both undoped and doped cuprates) with a partially filled d -electron band, which are insulators [3, 4]. In particular, in conventional band theory, the most important features of many-body systems, such as strong Coulomb repulsion between electrons (i.e., electron-electron correlation), disorder in atomic and electronic subsystems and electron-lattice interactions were ignored. Therefore, Mott [5] and Anderson [6] suggested the ideas of the localization of electrons and metal-insulator transitions due to the strong electron-electron correlation and structural disorder, respectively. However, the doped cuprates are much more complex systems [1, 3] than the Mott–Hubbard insulators and the nature of the relevant charge carriers, metal-insulator transitions, nanoscale phase separation and $1/8$ anomaly in these systems have not been well established yet, because all the cuprate materials in the intermediate doping regime exhibit the unusual insulating, metallic and superconducting states [1, 3, 7, 8]. The relevant mechanisms of metal-insulator transitions, nanoscale phase separation and subsequent evolution of insulating and metallic/superconducting phases and possible high- T_c superconductivity in hole doped cuprates have not yet been completely clarified.

In this work, we show that the strong electron-phonon interactions and polaronic effects are responsible for carrier localization and metal-insulator transitions, Cooper pairing of hole carriers above the superconducting transition temperature T_c and subsequent condensation of Cooper pairs into a superconducting state at T_c , multiscale phase separation and evolution of coexisting insulating and metallic/superconducting phases in hole doped cuprates. In particular, we will clarify how these interrelated phenomena in Bi -based cuprates

can occur in a wide doping range from underdoped to overdoped regime. Then we will examine thoroughly the possible effects of metal-insulator transitions, multiscale phase separation, and evolution of coexisting insulating and metallic/superconducting phases on high- T_c superconductivity.

We propose the microscopic picture of the crossover from insulating state to metallic/superconducting state accompanied by nanoscale phase separation and evolution of coexisting insulating and metallic/superconducting phases from lightly doped to overdoped cuprates (see Fig. 1).

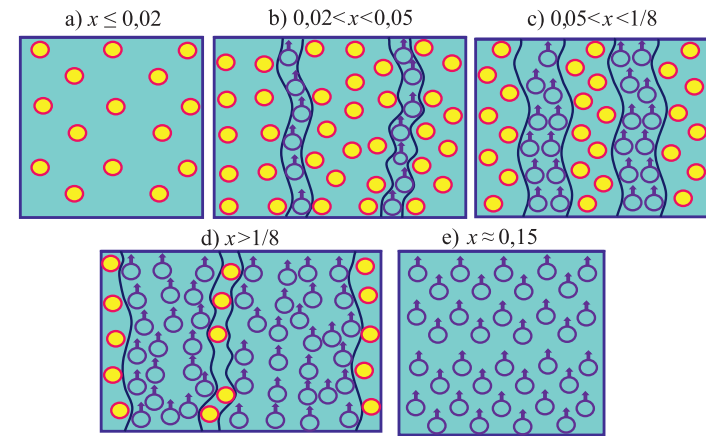


Fig. 1. Microscopic picture of the metal-insulator transitions and the crossover from insulating state to metallic/superconducting state accompanied by nanoscale phase separation and evolution of coexisting insulating and metallic/superconducting phases from lightly doped to overdoped cuprates. (a) Hole carriers (hole polarons) in the insulating phase of the lightly doped cuprates at $x \leq 0,02$ are immobile as indicated without arrows. (b) Immobile and mobile hole carriers in the lightly doped cuprates ($0,02 < x < 0,05$) are indicated accordingly in the wide insulating stripes without arrows and in the narrow metallic stripes with arrows. (c) Immobile and mobile hole carriers in the underdoped cuprates ($0,05 < x < 1/8$) are indicated accordingly without and with arrows in insulating and metallic/superconducting stripes, which have comparable sizes. (d) Immobile and mobile hole carriers in the underdoped and optimally doped cuprates ($x > 1/8$) are indicated accordingly in the narrow insulating stripes without arrows and in the wide metallic stripes with arrows. (e) Hole carriers in the metallic/superconducting phase of the optimally doped and slightly overdoped cuprates ($x \approx 0,15-0,17$) are indicated with arrows

We argue that the high- T_c superconductivity in Bi -based cuprate superconductors is well described by the theory of Bose-liquid superconductivity realizing both in the bulk and at grain boundaries and interfaces. We examine the possibility of the persistence of high- T_c superconductivity above the bulk T_c up to room-temperature at grain boundaries, interfaces and planes in these materials.

This work was supported by the Foundation of the Fundamental Research, Grant No F-FA-2021-433.

References

- [1] Dzhumanov S. Theory of conventional and unconventional superconductivity in the high- T_c cuprates and other systems (Nova Science Publishers, 2013).
- [2] Bardeen J., Cooper L.N., and Schrieffer J.R. *Phys. Rev.*, **108**, 1175 (1957).
- [3] Imada M., Fujimori A., and Tokura Y., *Rev. Mod. Phys.*, **70**, pp. 1039–1263 (1998).
- [4] Walz F. *J. Phys.: Condens. Matter.*, **14**, pp. R285–R340 (2002).
- [5] Mott N.F. *Metal-Insulator Transitions*. Taylor and Francis, London, 1990, 286 p.
- [6] Anderson P.W. *Phys. Rev.*, **109**, pp. 1492–1505 (1958).
- [7] Dzhumanov S., Karimboev E.X., Djumanov Sh.S. *Phys. Lett.* A380, 2173 (2016).
- [8] Ivanenko O. and Mitsen K. *Physica C*460-462, 1004 (2007).

Диссипативный фазовый переход в системах с двухфотонной накачкой и нелинейным поглощением вблизи критической точки

В.Ю. Мыльников, С.О. Поташин, Г.С. Соколовский, Н.С. Аверкиев

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, г. Санкт-Петербург, Россия

Исследование диссипативных фазовых переходов (ДФП) в открытых квантовых системах в настоящее время является одним из наиболее бурно развивающихся направлений квантовой оптики. Примером систе-

мы, в которой возникает ДФП, является сверхпроводящий микроволновый резонатор, в котором фотоны поглощаются и накачиваются парами со скоростями g и γ соответственно [1]. В данной системе наличие двухфотонного поглощения не разрушает, а стабилизирует квантовое состояние, также известное как состояние кота Шрёдингера. Ранее было показано, что на основе такого состояния можно создать динамически защищенный кубит [2]. Для исследования описанных квантовых систем обычно применяются численные методы, однако их использование не всегда позволяет раскрыть смысл физических явлений, которые наблюдаются в системе. В пределе большого числа фотонов качественную картину происходящего можно получить с помощью так называемого квазиклассического приближения. Тем не менее данный подход полностью игнорирует квантовые флуктуации, которые могут играть существенную роль даже в случае большого среднего числа фотонов в системе.

В данной работе мы используем формализм функций Грина–Келдыша [3], явно учитывающий эффекты, связанные с квантовыми флуктуациями. Применение этого подхода позволяет строить самосогласованные уравнения движения в приближении среднего поля, аналогичные уравнениям Горькова. Полученные уравнения можно использовать для расчета аномального среднего ψ , которое определяется как среднее значение квадрата оператора уничтожения для моды оптического резонатора. Рассчитанная зависимость ψ от параметра расстройки Δ , который определяется как разность между частотой резонатора и частотой возбуждающих фотонов, показана на рис. 1, a – c . Следует отметить, что на рис. 1, b после прохождения точки $\Delta = g$ система демонстрирует резкое уменьшение значения аномального среднего ψ . Этот факт указывает на наличие ДФП, который был изучен для этой системы ранее в работе [4]. Как видно из рис. 1, b – c , наличие квантовых флуктуаций приводит к уширению фазового перехода вблизи критической точки, которое хорошо описывается в рамках предложенных уравнений среднего поля. Однако наиболее важным результатом данной работы является степенная зависимость аномального среднего ψ от скорости движения g в критической точке, как показано на рис. 1, d , где синей пунктирной линии соответствует предсказание теории среднего поля, которая качественно согласуется с ре-

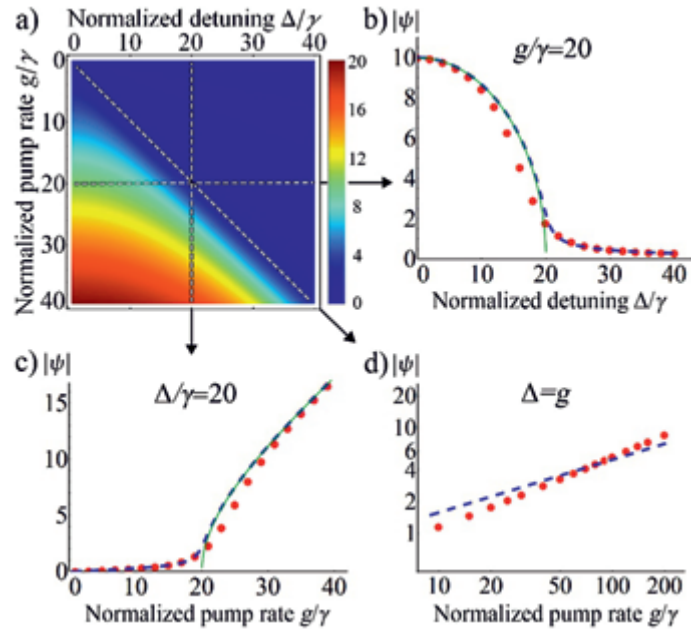


Рис. 1. (а) Фазовая диаграмма модуля аномального среднего $|\psi|$ как функция расстройки частоты Δ и скорости накачки g в единицах скорости двухфотонной диссипации γ , полученная из численного моделирования уравнения Линдблада. (b-c) Сечения фазовой диаграммы при фиксированном значении скорости накачки $g/\gamma = 20$ (b) и частотной расстройки $\Delta/\gamma = 20$ (c). (d) График зависимости модуля аномального среднего $|\psi|$ от скорости накачки g в критической точке $\Delta = g$ для $g \gg \gamma$, построенный в двойном логарифмическом масштабе. На графиках красными точками показан результат численного моделирования, синей пунктирной кривой соответствует теория среднего поля, а зеленой кривой — квазиклассическое приближение

зультатами численного моделирования. Необходимо подчеркнуть, что данный контринтуитивный эффект не может быть обнаружен в квазиклассическом приближении. Причина кроется в решающей роли квантовых флуктуаций, которые существенно влияют на поведение данной системы в критической точке и должны учитываться даже в случае большого среднего числа фотонов. Также для уточнения значения данного кри-

тического индекса мы разработали подход, использующий уравнение Фоккера–Планка, которое корректным образом описывает поведение системы в критической области. Было найдено стационарное решение данного уравнения и показано, что в области сильных флуктуаций критический индекс совпадает с численным расчетом. Кроме того, мы продемонстрировали корректность описания теории Ландау вдали от критической области.

В заключение мы разработали теорию для диссипативных фазовых переходов с двухфотонной накачкой и нелинейным поглощением, которая явно учитывает квантовые флуктуации и предсказывает степенное поведение аномального среднего в критической точке. Полученные результаты могут быть использованы для создания новых неравновесных квантовых состояний с управляемыми свойствами для практических применений в квантовой метрологии и информатике.

Список литературы

- [1] Leghtas Z., Touzard S., Pop I.M., Kou A., Vlastakis B., Petrenko A., Sliwa K.M., Narla A., Shankar S., Hatridge M.J., Reagor M., Frunzio L., Schoelkopf R.J., Mirrahimi M., and Devoret M.H. Confining the state of light to a quantum manifold by engineered two-photon loss. *Science*, **347**, 853 (2015).
- [2] Mirrahimi M., Leghtas Z., Albert V.V., Touzard S., Schoelkopf R.J., Jiang L. and Devoret M. H. Dynamically protected cat-qubits: A new paradigm for universal quantum computation. *New J. Phys.*, **16**, 045014 (2014).
- [3] Sieberer L.M., Buchhold M., and Diehl S. Keldysh field theory for driven open quantum systems. *Rep. Prog. Phys.*, **79**, 096001 (2016).
- [4] Bartolo N., Minganti F., Casteels W., and Ciuti C. Exact steady state of a Kerr resonator with one- and two-photon driving and dissipation: Controllable Wigner-function multimodality and dissipative phase transitions. *Phys. Rev. A*, **94**, 033841 (2016).

Виртуальный спиновый кроссовер и переход «диэлектрик–металл» в NiO при высоком давлении

С.Г. Овчинников¹, Т.М. Овчинникова²

¹Институт физики им. Л.В. Киренского, Федеральный исследовательский
центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения

Российской академии наук», г. Красноярск, Россия

²Институт леса им. В.Н. Сукачева, Федеральный исследовательский центр
«Красноярский научный центр Сибирского отделения

Российской академии наук», г. Красноярск, Россия

В рамках многоэлектронного метода GTB (обобщенной сильной связи) изучено влияние высокого давления на электронные свойства NiO. В этом методе развиваются идеи Хаббарда в режиме сильных корреляций для многозонной $p-d$ -модели, позволяющей рассматривать различные сильно коррелированные системы, такие как купраты, манганиты, кобальтаты и др. Параметры модели могут быть рассчитаны из *ab initio* в рамках гибридного подхода LDA + GTB [1]. Низкоэнергетический предел в GTB описывается эффективной моделью Хаббарда с параметром

$$U_{\text{eff}} = E_0(n+1) + E_0(n-1) - 2E_0(n),$$

где $E_0(n)$ — энергия основного терма кластера MeO_6 с n электронами, для NiO $n = 8$. В такой эффективной модели Хаббарда учитываются d -электроны Ni и p -электроны O в трех зарядовых секторах гильбертова пространства: нейтральных состояниях (конфигурации $d8 + d9L + d10L2$), состояниях с одной дыркой (конфигурации $d7 + d8L + d9L2$) и состояниях с одним добавленным электроном ($d9 + d10L$), где L обозначает дырку на лиганде.

При низких давлениях все термы, как нейтральный, так и с добавлением дырки и электрона, находятся в высокоспиновых состояниях. В результате для эффективного параметра Хаббарда находим

$$U_{\text{eff}} = U(8) + 10Dq - J_H,$$

где $U(8) = E_C(d^9) + E_C(d^7) - 2E_C(d^8)$ — независимый от давления вклад, определяемый независимой от спина частью кулоновского взаимодействия $E_C(d^n)$. Внутриатомный обменный параметр Хунда J_H не зависит от давления, в то время как параметр кристаллического поля $10Dq$ растет при увеличении давления. В целом параметр Хаббарда при малых давлениях возрастает.

Альтернативным процессом с ростом давления может быть спиновый кроссовер между высокоспиновыми (HS) и низкоспиновыми (LS) термами ионов, который, согласно диаграммам Танабе–Сугано, возможен для конфигураций $d^4 - d^7$. Для основного состояния $\text{Ni}^{+2} d^8$ всегда стабильно HS-состояние, спиновый кроссовер отсутствует. Однако для незаполненного дырочного терма d^7 имеет место виртуальный спиновый кроссовер с ростом давления до величины P_S при условии $10Dq(P_S) = 2J_H$. Предполагая изменения расстояния «катион–анион» малыми, можем записать линейную связь между кристаллическим полем и давлением, $10Dq(P) = 10Dq(0) + \alpha_\Delta P$. Выше точки кроссовера получаем $U_{\text{eff}} = U(8) + J_H$ [2]. В результате диэлектрическая щель $E_g = U_{\text{eff}} - W$, где W есть полуширина одноэлектронной зоны, терпит излом (рис. 1), который был ранее обнаружен при давлении 55 ГПа экспериментально [3].

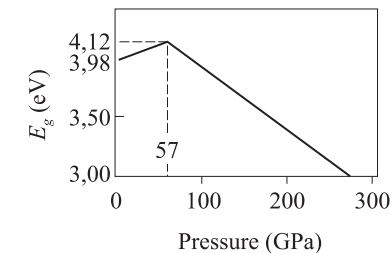


Рис. 1. Зависимость диэлектрической щели от давления в NiO с изломом в точке виртуального спинового кроссовера [2]

При дальнейшем сжатии диэлектрическая щель нелинейно зависит от давления, и для оценки критического давления перехода «изолятор–

металл» мы применили известную зависимость ширины d -зоны от межатомного расстояния:

$$W(P) = W_0(V/V_0)^{-5/3}$$

и уравнение Берча–Мурнагана, связывающее изменение объема и давление. Из условия обращения диэлектрической щели в ноль при критическом давлении P_{IMT} можно найти критическое значение объема:

$$(V/V_0)^{-5/3}(P_{IMT}) = (U + J_H)/W_0.$$

При использовании разных существующих в литературе значений модуля упругости для NiO [3–5] переход «диэлектрик–металл» ожидается в диапазоне давлений 450–600 ГПа.

Мы благодарим Российский научный фонд за финансовую поддержку в рамках проекта 18-12-00022.

Список литературы

- [1] Коршунов М.М., Гавричков В.А., Овчинников С.Г., Пчелкина З.В., Некрасов И.А., Коротин М.А., Анисимов В.И. *ЖЭТФ*, **126**, 642 (2004).
- [2] Овчинников С.Г., Овчинникова Т.М. *ЖЭТФ*, **160**, 443 (2021).
- [3] Gavriluk A.G., Trojan I.A., and Struzhkin V.V. *Phys. Rev. Lett.*, **109**, 086402 (2012).
- [4] Potapkin V., Dubrovinsky L., Sergueev I., Ekholm M., Kantor I., Bessas D., Vukova E., Prakapenka V., Hermann R.P., Rüffer R., Cerantola V., Jönsson H.J.M., Olovsson W., Mankovsky S., Ebert H., and Abrikosov I.A. *Phys. Rev. B*, **93**, 201110 (2016).
- [5] Liu L., Li X.D., Liu J., Jiang S., Li Y., Shen G.Y., Mao H., Bi Y., and Xu J. *Journ. Appl. Phys.*, **104**, 113521 (2009).

Физические свойства $(\text{Mn}_{1-x}\text{Co}_x)\text{Si}$ при $x \approx 0,060-0,17$: квантовая критичность

А.Е. Петрова¹, С.Ю. Гаврилкин¹, Г.В. Рыбальченко¹, А.Ю. Цветков¹,
С.М. Стишов^{1,*}, Д. Мензель², И.П. Зибров², А.М. Белемук², С. Хасанов³

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

²Технический университет Брауншвейга, Брауншвейг, Германия

³Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, г. Москва, Россия

⁴Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия

*E-mail: stishovsm@lebedev.ru

Как было показано во многих исследованиях, температура магнитного фазового перехода в MnSi уменьшается с давлением и достигает квантовой критической точки при давлении около 1,4 ГПа. В то же время при этом не наблюдалось эффектов квантовой критичности, что могло быть связано с негидростатическими условиями экспериментов при высоких давлениях и низких температурах. В этом случае разумно использовать так называемое «химическое» давление путем замещения некоторых атомов или ионов материала на химически эквивалентные атомы меньшего размера. Эта процедура обычно приводит к уменьшению объема, что может имитировать эффект высокого давления. Описанная идея была использована при изучении MnSi, легированного железом и кобальтом, в работах Бауэра и др. [1]. Как было показано Петровой и др. [2], легированный железом образец MnSi с номинальным составом $\text{Mn}_{0,85}\text{Fe}_{0,15}\text{Si}$ обнаруживает черты, свойственные окрестности квантовой критической точки. Однако результаты для образцов, легированных кобальтом, полученных в предыдущих работах, не давали оснований для подобных заключений. Ниже мы сообщаем результаты исследований образцов MnSi с повышенным содержанием Co [2, 3], описывающих нетривиальную ситуацию, связанную с квантовой критичностью.

Выполнены измерения намагниченности, магнитной восприимчивости, теплоемкости и удельного сопротивления пяти образцов $(\text{Mn},\text{Co})\text{Si}$. Все измерения были сделаны с использованием системы PPMS Quantum

Design, оснащенной модулем теплоемкости, вибрационным магнитометром и рефрижератором He-3. Данные об удельном сопротивлении были получены по стандартной четырехконтактной схеме. Некоторые экспериментальные данные представлены на рис. 1, 2.

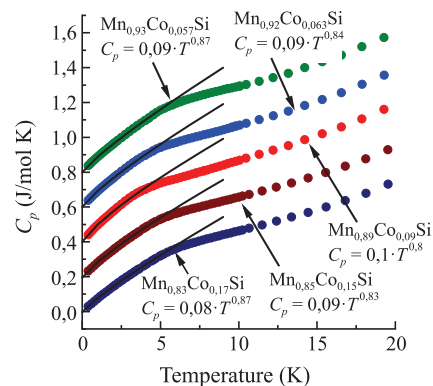


Рис. 1. Теплоемкость образцов (Mn,Co)Si с различным содержанием примеси. Низкотемпературные части теплоемкости могут быть приближены степенной функцией. Степенные показатели показаны на графике. Данные изображены со смещением для лучшего просмотра

Из данных Бауэра [1], Петровой [2] и текущих результатов следует, что примеси (Co и Fe) разрушают фазовый переход первого рода, при этом флуктуационный максимум теплоемкости уширяется так, что его низкотемпературная часть эффективно достигает нулевой температуры, где флуктуации неизбежно становятся квантовыми (см. рис. 1). Поведение низкотемпературной теплоемкости образцов свидетельствует, что постепенный переход от классических к квантовым флуктуациям может быть описан простой степенной функцией температуры с показателем меньше единицы. Эти значения показателей сразу приводят к расходящемуся отношению C_p/T и, следовательно, к расходящейся эффективной массе электрона, что является индикатором квантового критического поведения.

В итоге установлено, что при больших концентрациях легирующей примеси нет отчетливых точек фазового перехода (рис. 1). Температуры

флуктуационных максимумов практически нечувствительны к концентрации примеси (рис. 2). Моделирование влияния примеси на фазовый переход в спиновых киральных системах показывает, что подобное поведение следует ожидать в случае, когда примесный спин находится в интерстициях и является «замороженным» [4].

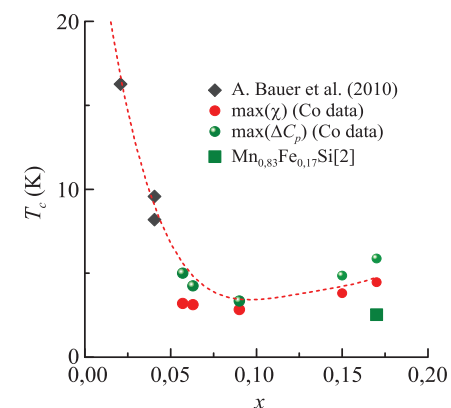


Рис. 2. Зависимость температуры флуктуационного максимума от концентрации примеси для $Mn_{1-x}Co_xSi$

Таким образом, при низких температурах и заданной концентрации примесей Co наблюдается облако геликоидальных флуктуаций, распространяющихся на значительный диапазон концентраций и температур, которые становятся квантовыми вблизи 0 К. Заметим, что при этом отсутствует выделенная квантовая критическая точка.

Список литературы

- [1] Bauer A., Neubauer A., Franz C., Münzer W., Garst M., Pfleiderer C. *Phys. Rev. B*, **82**, 064404 (2010)
- [2] Petrova A.E., Gavrilkin S.Yu., Menzel Dirk, Stishov S.M. *Phys. Rev. B*, **100**, 094403 (2019).
- [3] Petrova A.E., Gavrilkin S.Yu., Rybalchenko G.V., Menzel Dirk, Zibrov I.P., Stishov S.M. *Phys. Rev. B*, **103**, L180401 (2021).
- [4] Belemuk A.M., Stishov S.M. *Phys. Rev. B*, **104**, 0664404 (2021).

Фазовые переходы в сильваните при высоких давлениях

Ю.С. Поносов¹, Д.А. Замятин²

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Россия

²Институт геологии и геохимии имени А.Н. Заварицкого УрО РАН, Россия

Интересным объектом для изучения в системе Au–Te является соразмерная структура — сильванит AuAgTe₄, в котором Ag заменяет половину Au в исходном несоизмерном AuTe₂. Для него также характерно образование димеров Te–Te, но, в отличие от AuTe₂, он обладает регулярным соразмерным упорядочением Au и Ag в моноклинной структуре *P2/c* [1]. Аналогично AuTe₂ средняя валентность Au и Ag в сильваните 2⁺, но и Ag²⁺, и Au²⁺ нестабильны и редко встречаются на практике, особенно Au²⁺; у них обычно есть тенденция к диспропорционированию заряда на 1⁺ и 3⁺ ионных состояния. Рассмотрение детальной кристаллической структуры позволяет сделать вывод, что это действительно происходит в AuAgTe₄. Искажения октаэдров вокруг Au и Ag приводят к модификации Te подрешетки, так что в ней образуются короткие димеры Te–Te, с двумя Te в димере, принадлежащем разным плоскостям MTe₂ (M = Ag, Au). Образование таких димеров может дать достаточно сильную связь между этими слоями, так что AuAgTe₄ (и аналогично AuTe₂) не следует рассматривать как систему Ван-дер-Ваальса [1].

Недавнее теоретическое исследование [1] предсказывает, что при давлении $P \sim 5$ ГПа возможен структурный переход в структуру *P2/m*. Предполагается, что он сопровождается исчезновением димеров Te–Te и возникновением сверхпроводимости, что было подтверждено в исследованиях при высоких давлениях [2]. Цель данного исследования — подтвердить присутствие предсказанного в [1] структурного перехода в сильваните и изучить его поведение при более высоких давлениях.

Рамановский эксперимент был проведен с использованием натуральных кристаллов из месторождения Кочбулак, Кураминский хребет, Узбекистан. Их состав и структура подтверждены с использованием электронно-зондового микроанализатора Cameca SX100 и сканирующего

электронного микроскопа Jeol JSM6390LV с EDS-детектором Inca Energy 450 X-Max80. Неориентированные кристаллические сколы были загружены в ячейку высокого давления с алмазными наковальнями (DAC) с использованием KCl как передающей давление среды. Поляризованные рамановские измерения проводились в геометрии обратного рассеяния с использованием микроспектрометра RM1000 Renishaw при возбуждении твердотельным лазером (532 нм) и гелий-неоновым лазером (633 нм). Для структуры AuAgTe₄ (пространственная группа *P2/c*) теория групп предсказывает 36 фоннных мод (10A_u + 7A_g + 11B_u + 8B_g), из которых пятнадцать (7A_g + 8B_g) являются раман-активными. В измерениях на разных плоскостях кристалла при комнатной температуре наблюдаются почти все рамановские активные колебания: семь A_g-фононов на 47, 61, 95, 102, 121, 132, 158 см⁻¹ и еще 7 слабых B_g мод на 50, 58, 84, 88, 114, 134, 147 см⁻¹. Хотя все 15 рамановских мод расположены в диапазоне 100 см⁻¹, что иногда приводит к перекрытию линий, большинство из них можно точно идентифицировать.

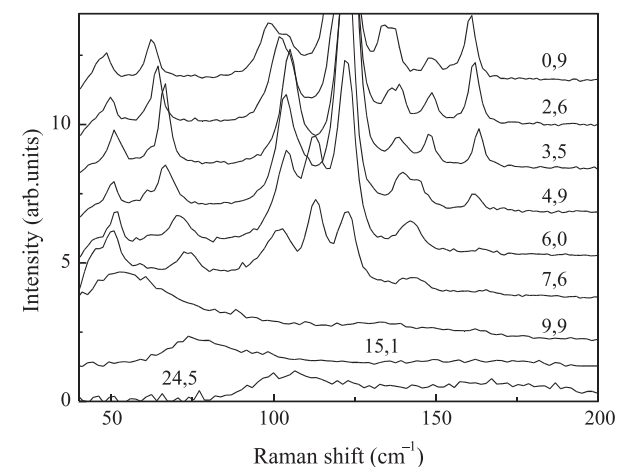


Рис. 1. Рамановские спектры AuAgTe₄ при различных давлениях (цифры)

Как можно видеть на рис. 1, изменения в спектрах проявляются после 4 ГПа. Основные изменения — появление новых линий в спектре на

113 и 142 см⁻¹ и существенные изменения интенсивности некоторых линий в поляризованных спектрах. Поляризованные спектры четко указывают на наличие структурного перехода в области 4–6 ГПа. В дополнение частоты ряда линий, после ужесточения при низких давлениях, начинают размягчаться или резко расширяться в этом диапазоне давлений. Тем не менее количество наблюдаемых после перехода линий больше, чем следует из правил выбора для предполагаемой структуры фазы высокого давления ($P2/m$) [1], где должно наблюдаться только 6 линий: $4A_g + 2B_g$, причем во всех них участвуют только колебания атомов теллура. Можно предположить, что это связано с наличием дефектов в фазе высокого давления, индуцирующих появление дополнительной линии в спектре. Действительно, при дальнейшем увеличении давления > 8–9 ГПа происходит значительное уширение большинства линий, что также указывает на возможные нарушения в структуре. При этом исчезают узкие линии, и спектр представляет собой двухпиковую структуру с широкими максимумами вблизи 50 и 150 см⁻¹. Такой спектр напоминает плотность фонных состояний и характерен для существенного беспорядка в структуре (крайний случай — аморфизация). Возможно, что этот беспорядок возникает именно в подрешетке теллура. При этом увеличение давления от 10 до 25 ГПа приводит к двукратному росту энергии низкочастотного пика, в то время как энергия высокочастотного пика растет значительно меньше. После сброса давления во всех экспериментах ($P_{\text{макс}}$ — от 10 до 25 ГПа) мы всегда получали несколько уширенный спектр исходного монокристалла, что подтверждено поляризационными измерениями. Обнаруженный второй структурный переход в AuAgTe_4 не был предсказан и требует детального изучения, как и поведение температуры сверхпроводящего перехода в обеих фазах высокого давления.

Список литературы

- [1] Ushakov A.V., Streltsov S.V. and Khomskii D.I. *J. Phys.: Condens. Matter.*, **31**, 235601 (2019).
- [2] Amiel Y., Greenberg E., Chariton S., Lavina B., Hen B., Shelukhin V., Becker-Bohatý P., Bohatý L., Palevski A., Rozenberg G. Kh., 58th EHPRG Conference booklet, Spain, p. 49 (2020).

Фазовые переходы в $n\text{-CdAs}_2$ при высоком давлении

Л.А. Сайпулаева¹, А.В. Тебеньков², Н.В. Мельникова²,
А.Г. Алибеков², М.А. Чехилов², А.Н. Бабушкин², В.С. Захвалинский⁴,
А.И. Риль³, С.Ф. Маренкин³

¹Институт физики ДФИЦ РАН, г. Махачкала, Республика Дагестан, Россия

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

³Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,
г. Москва, Россия

⁴Белгородский государственный национальный исследовательский
университет, г. Белгород, Россия

Приведены результаты исследований электро-, магнитосопротивления и термоЭДС при давлениях. Установлено, что увеличение магнитного поля приводит к уменьшению сопротивления. Обнаружен резкий рост отрицательного магнитосопротивления в областях давлений, предшествующих структурным изменениям. По значениям термоЭДС можно утверждать о наличии двух структурных изменений в диарсениде кадмия при давлениях 28–30 ГПа и 34–36 ГПа, которые полностью обратимы при снятии давления. Рассмотренный полупроводник сохраняет электронную проводимость до давлений 50 ГПа.

Структурные и магнитные свойства соединения FeRhGe_2

Д.А. Саламатин^{1,2}, А.В. Боков¹, В.А. Сидоров¹, З. Суворец³,
М.В. Магницкая^{1,4}, Н.М. Щелкачев¹, М. Виртель³, М. Будзинский³,
А.В. Цвященко¹

¹Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН,
г. Троицк, Россия

²Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия

³Institute of Physics, University Maria Curie-Skłodowska, Lublin, Poland

⁴Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, г. Москва, Россия

С помощью синтеза при высоких температурах и давлении было получено соединение FeRhGe_2 . Обработка рентгеновских дифрактограмм

данного соединения показала, что в соединении существуют две кристаллические фазы со структурами B20 с различными параметрами решетки. Для образца, изучаемого в данной работе, массовое отношение более плотной фазы (первой) с параметром решетки $a = 4,780 \text{ \AA}$ к менее плотной (второй) с параметром решетки $a = 4,800 \text{ \AA}$ составляет примерно 3:2. Дополнительное изучение других образцов состава FeRhGe_2 показало, что фазовое отношение является непостоянным.

На температурной зависимости магнитной восприимчивости FeRhGe_2 имеются две особенности, связанные с переходами при температурах 150 и 210 К. Эти температуры слабо увеличиваются с приложением внешнего давления до 5 ГПа. Температура Кюри–Вейсса составляет 225 К, что немного меньше, чем в FeGe (284 К).

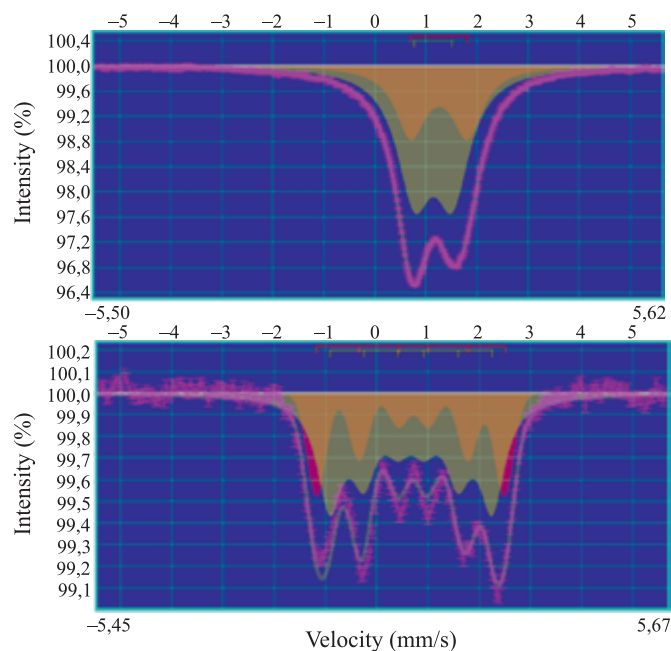


Рис. 1. Экспериментальные мессбауэровские спектры FeRhGe_2 , полученные при температурах 295 К и 4 К (розовые точки) с аппроксимацией (серая линия). Квадрупольное расщепление показано красной и желтой формами

Для изучения детальной магнитной структуры были проведены измерения мессбауэровских спектров на ядрах ^{57}Fe в температурном диапазоне 4–295 К. Спектр при 295 К может быть хорошо описан с использованием двух квадрупольных расщеплений (QS) с амплитудой 2:1, что согласуется с результатами, полученными из рентгеновской дифракции. Спектр, полученный при температуре 4 К, хорошо описан с использованием двух сверхтонких магнитных расщеплений (рис. 1).

Проведенные нами *ab initio* расчеты FeRhGe_2 в парамагнитном и ферромагнитном состояниях с использованием пакета программ Wien2k позволили определить значения магнитных моментов (1,37 и 1,58 μ_B) и сверхтонких магнитных полей B_{hf} (–107,2 и –109,7 кОе) на атомах Fe. Эти данные хорошо согласуются с экспериментом.

Работа была поддержана полномочным представительством Польши в Объединенном институте ядерных исследований (г. Дубна).

Новая модификация VO_2 со структурой симпсонита: электронные транспортные, магнитные и термодинамические свойства и их эволюция при высоком давлении

В.А. Сидоров, И.П. Зибров, В.П. Филоненко,
Н.М. Щелкачев, М.В. Магницкая

*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН,
г. Троицк, Россия*

Оксид ванадия VO_2 является типичным материалом с сильными электронными корреляциями, в котором наблюдается переход «металл–изолятор». Новая модификация VO_2 со структурой симпсонита $\text{VO}_2(\text{S})$ была получена при термобарической обработке стехиометрической смеси порошков $\text{V}_2\text{O}_3 + \text{V}_2\text{O}_5$ при $P = 2,0\text{--}7,0$ ГПа и $T = 600\text{--}900$ °С в камерах «тороид» [1]. Ее кристаллическая структура была определена с помощью рентгеновской дифракции: $a = 7,35367(3) \text{ \AA}$, $c = 4,51507(4) \text{ \AA}$, $V = 211,448(1) \text{ \AA}^3$, $Z = 7$, П.Г. Р 3. Атомы ванадия находятся в шестерной

координации из атомов кислорода в виде искаженного октаэдра [VO₆]. Строительным элементом двухслойной структуры являются три октаэдра, соединенные ребрами. В одном слое октаэдры образуют сплошную сетку, тогда как в другом располагаются отдельные «островки». При температуре $T_c = 290$ К в VO₂(S) обнаружен изоструктурный переход типа «металл–полупроводник» со скачком объема 0,26 % и небольшим гистерезисом ~2 К. Выше T_c материал является «плохим металлом» со слабой полупроводниковой зависимостью электрического сопротивления от температуры и величиной коэффициента Зеебека –50 мкВ/К, что указывает на преимущественно электронный тип носителей тока. Ниже T_c зависимость сопротивления от температуры полупроводниковая (рост сопротивления на четыре порядка при 290–120 К), а коэффициент Зеебека меняет знак, что указывает на дырочный тип проводимости. Предварительные измерения магнитной восприимчивости и теплоемкости VO₂(S) указывают на наличие антиферромагнитного перехода при температуре $T_N = 49,5$ К.

Были также проведены расчеты из первых принципов зонной структуры VO₂(S) комбинированным методом Хартри–Фока / функционала плотности и сделана оценка электронных транспортных свойств в рамках полуклассического приближения Больцмана. Расчеты с помощью программы USPEX предсказали существование антиферромагнитной фазы VO₂(S) при низкой температуре и определили ее уникальную магнитную структуру. Экспериментальные исследования электрического сопротивления и теплоемкости VO₂(S) при высоком гидростатическом давлении до 5,2 ГПа показали, что T_c быстро уменьшается при высоком давлении и полностью подавляется при $P_c \sim 2,4$ ГПа. T_N слабо растет с ростом давления в области полупроводниковой фазы (до 52,5 К при 2,1 ГПа), но выше P_c величина T_N резко уменьшается до 12,5 К, а затем продолжает постепенно увеличиваться с ростом давления в области квазиметаллической фазы (до 21,8 К при 5,2 ГПа). Измерения теплоемкости также показали существование еще одного перехода (предположительно магнитного) при давлениях выше P_c и температурах ниже 4 К. P – T -диаграмма VO₂(S) сравнивается с P – T -диаграммой V₃O₅ [2, 3].

Список литературы

- [1] Зибров И.П., Филоненко В.П. Синтез и уточнение структуры модификаций высокого давления VO₂(S) и VO₂(M2) // Сборник материалов международного симпозиума «Перспективные материалы и технологии», Витебск, Белоруссия, 2019, с. 276–278.
- [2] Sidorov V.A., Waśkowska A., Badurski D., *Solid State Communs*, **125**, 359 (2003).
- [3] Baldassarre L., Perucchi A., Arcangeletti E., Nicoletti D., Di Castro D., Postorino P., Sidorov V.A., Lupi S. *Phys. Rev. B*, **75**, 245108 (2007).

Probing of quadrupole-order-driven commensurate-incommensurate phase transition in B20 CoGe

A.V. Tsvyashchenko^{1,*}, V.A. Sidorov¹, A.V. Nikolaev², Seung-Ho Baek³,
T. Klimczuk⁴, F. Ronning⁵

¹*Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, RAS,
Moscow, Troitsk, Russia*

²*Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics MSU, Moscow, Russia*

³*Changwon National University, 20 Changwondae-ro Uichang-gu Changwon-si,
Gyeongsangnam-do 51140 Republic of Korea*

⁴*Faculty of Applied Physics and Mathematics, Gdansk University of Technology,
Gdansk, Poland*

⁵*Los Alamos National Laboratory, MPA-CMMS,
Los Alamos, New Mexico, USA*

*E-mail: tsvyash@hppi.troitsk.ru

The B20-type cobalt germanide CoGe was investigated by measuring the specific heat, resistivity, and ⁵⁹Co nuclear magnetic resonance (NMR). We observed a new phase transition at $T_Q = 13.7$ K, evidenced by a very narrow peak of the specific heat and sharp changes of the nuclear spin-spin (T_2^{-1}) and spin-lattice (T_1^{-1}) relaxation rates. The fact that the entropy release is extremely small and the Knight shift is almost independent of temperature down to low temperatures as anticipated in a paramagnetic metal indicates that the T_Q transition is of non-magnetic origin. In addition, there exists a characteristic temperature $T_0 = 30$ K below which the resistivity and the NMR linewidth increase, and T_1^{-1} is

progressively distributed in space, that is, a static and dynamical spatial inhomogeneity develops. These experimental observations are well accounted for by a group-theoretical analysis which shows that the finite electric quadrupole density arising from the low local site symmetry at cobalt sites could drive a commensurate-incommensurate structural phase transition. We conclude that precursor and long-range quadrupole ordering successively take place at T_0 and T_Q , respectively, driving the crystal symmetry lowering from the $P2_13$ symmetry that is commensurate to the $R3$ symmetry with an incommensurate wavevector. The commensurate-incommensurate phase transition driven by electric quadrupole ordering is another remarkable phenomenon arising from the structural chirality inherent in the noncentrosymmetric B20 family.

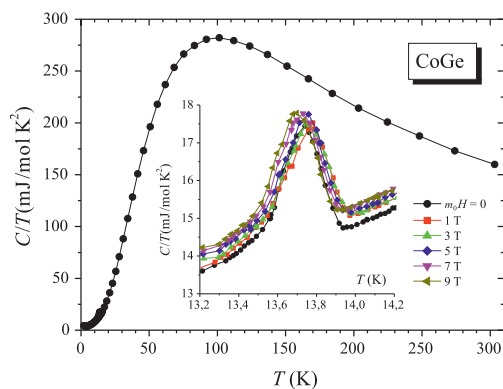


Fig. 1. The specific heat divided by temperature of CoGe between 2 K and 300 K. The inset enlarges the data near the sharp peak found at $T_Q = 13.7$ K

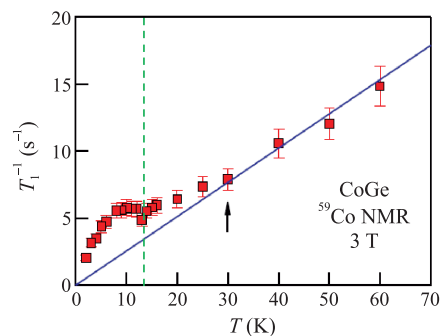


Fig. 2. Temperature dependence of spin-lattice (T_1^{-1}) relaxation rates

Феноменологическая модель фотоиндуцированного фазового перехода из аморфной в кристаллическую фазу в $(\text{GeTe})_n(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_m$

С.М. Якубеня¹, А.С. Мищенко^{2,1}

¹*NRC «Курчатовский институт», г. Москва, Россия*

²*RIKEN Center for Emergent Matter Science (CEMS), Wako, Saitama, Japan*

Предложена феноменологическая модель фотоиндуцированного фазового перехода в Ge-Sb-Te из аморфной в тетраэдрическую кристаллическую фазу. В основу модели положена концепция двойных дефектов, разработанная для кремния, легированного различными примесными ионами и в дальнейшем использованная нами для описания систем на основе арсенида галлия. Суть концепции сводится к рассмотрению различных дефектов (замещения и внедрения) с единых позиций; а именно, такие дефекты являются предельными случаями двойного дефекта, состоящего из примесного иона и вакансии кристаллической решетки, расположенными друг относительно друга на бесконечно малом и бесконечно большом расстоянии соответственно. Допускается также существование промежуточного типа дефекта, получившего название парного дефекта и состоящего из вакансии и примесного иона, занимающего по отношению к ней позицию в ближайшем междоузлии. Между ними имеет место одна насыщенная валентная связь. В большинстве случаев, несмотря на возможность существования парных дефектов с различными расстояниями между партнерами, входящими в состав парного дефекта, удается обойтись одним типом таких двойных дефектов, что, по всей видимости, связано с быстрым изменением интеграла перекрытия волновых функций электронов с расстоянием между партнерами. Применительно к данной системе представление о парных дефектах играет ключевую роль.

Предлагаемый механизм объясняет, почему требуется фотовозбуждение системы и одновременное нагревание ее до температуры > 160 °C

для перехода из аморфной фазы в метастабильную кристаллическую. Смещение химпотенциала в более высокоэнергетическую позицию при повышении температуры стабилизирует кристаллическую фазу, не стабилизируя при более низких температурах. Более того, изменение степени заполнения орбиталей дефектов в результате облучения светом приводит к аккумулярованию дырок на соседних ионах Ge и Te, в результате чего ион германия выталкивается из узла в междоузлие и кулоновская энергия расталкивания минимизируется. Наиболее вероятным при этом является представление о реализации механизма negative-U properties для ионов Ge в такой системе.

ТОПОЛОГИЧЕСКИ НЕТРИВИАЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

Исключительные линии, адиабатическая эволюция и числа Черна неэрмитовых вейлевских фермионов

З.З. Алисултанов

Институт физики ДФИЦ РАН, г. Махачкала, Россия

E-mail: zaur0102@gmail.com

В последнее время растет интерес к объединению топологической теории конденсированного состояния и неэрмитовой квантовой физики, что может привести к неожиданным физическим явлениям. Одно из перспективных направлений этой темы — изучение неэрмитовых топологических полуметаллов. Мы разработали неэрмитов гамильтонов формализм для описания фермионов Вейля типа III и IV [1], которые впервые были предложены в [2]. По сравнению с типами I и II фермионы Вейля III и IV типов имеют анизотропный спектр с комплексными и действительными сегментами в импульсном пространстве (см. рис. 1), а также исключительными линиями на границах таких сегментов. Это приводит к нетривиальной адиабатической эволюции. Мы показали, что точки Вейля типов III и IV, несмотря на их неэрмитову природу, топологически устойчивы, что является следствием некоторых симметрий гамильтониана. Фазовый переход от типов I, II к типам III, IV сопровождается сингулярностью групповой скорости, делающей такой переход невозможным. Таким образом, фазы III, IV топологически не эквивалентны хорошо известным фазам I, II. Из-за того, что на исключитель-

ной линии спектра скалярное произведение векторов состояний с любыми зонными индексами тождественно обращается в нуль, дуальный базис неэрмитовой системы оказывается ненормируемым. В рамках такого ненормированного базиса мы исследовали адиабатическую эволюцию и число Черна.

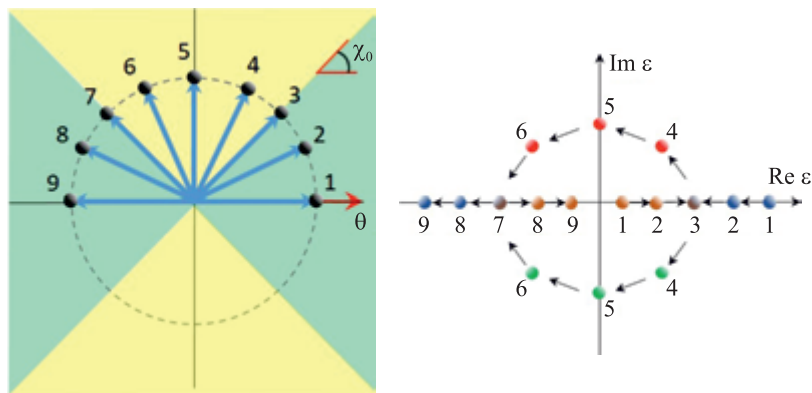


Рис. 1. Слева: показана плоскость импульсного пространства, которая разделена на сектора с действительным (зеленый) и комплексным (желтый) спектрами. Угол χ_0 соответствует направлению вектора импульса, при котором происходит переход от реального к комплексному спектру. Черные точки представляют разные направления импульса. Справа: показана эволюция (черные стрелки) действительной и мнимой частей спектра при изменении направления импульса из положения 1 в положение 9 (см. левую часть рисунка). Коричневые и синие точки соответствуют дырочным и электронным состояниям, а красные и зеленые точки соответствуют комплексному спектру с положительной и отрицательной мнимыми частями. Точки 3 и 7 соответствуют точкам перехода от реального к комплексному спектру

Список литературы

- [1] Alisultanov Z.Z., Idrisov E.G. Towards the theory of types III and IV non-Hermitian Weyl fermions, arXiv:2110.13714.
- [2] Nissinen J. and Volovik G.E. *JETP Lett.*, **105**, 442 (2017).

Зарядовые флуктуации в проблеме энергетической структуры топологических изоляторов

В.В. Вальков

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, г. Красноярск, Россия

Изучение энергетической структуры материалов с нетривиальной топологией, а также проведение их топологической классификации при учете межузельных кулоновских взаимодействий (МКВ) определяют одно из магистральных направлений теории конденсированного состояния. Наличие МКВ значительно усложняет процедуру вычисления спектра фермиевских возбуждений топологических изоляторов (ТИ) и приводит к необходимости использования современных квантово-полевых методов. Проблема адекватного описания МКВ в ТИ приобретает особенно важное значение, поскольку в этих материалах имеет место перекрытие затравочной валентной зоны и зоны проводимости. Для демонстрации важности этого обстоятельства достаточно отметить, что в условиях перекрытия зон включение МКВ, например, в полуметаллах способно кардинально изменить структуру основного состояния посредством формирования фазы экситонного диэлектрика.

В работе в рамках модели $\text{VHZ} + \text{V}$, отражающей энергетическую структуру квантовой ямы HgTe при учете МКВ, решена задача о спектре объемных и краевых состояний ТИ. При вычислении одночастичных функций Грина использовался расширенный набор базисных операторов, позволяющий корректно учесть сильные одноузельные зарядовые флуктуации. Это обеспечило возможность описания взаимосвязи фермионов зоны проводимости и валентной зоны с флуктуациями электронной плотности.

Показано, что зарядовые флуктуации приводят к качественной перестройке энергетической структуры ТИ: фермиевский спектр состоит не только из зоны проводимости и валентной зоны, но и из двух зон флуктуационных состояний (ЗФС). При этом краевые состояния располагаются между верхней и нижней ЗФС, для которых имеет место значительная ренормировка эффективных масс. Диэлектрическая щель определяется

энергетическим интервалом между дном ЗФС электронов проводимости и потолком валентной ЗФС.

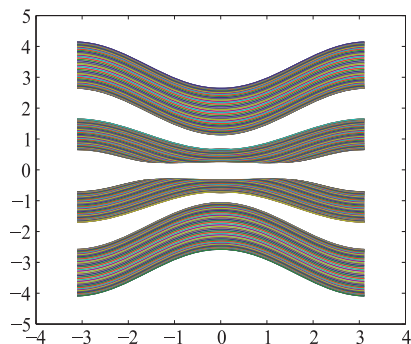


Рис. 1. Структура спектра объемных фермиевских возбуждений ТИ при учете МКВ. Зарядовые флуктуации индуцируют расщепление энергетических полос и возникновение двух зон флуктуационных состояний

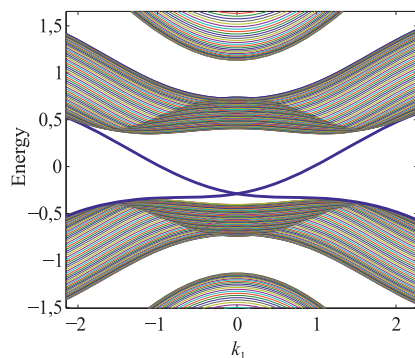


Рис. 2. Энергетический спектр объемных и краевых состояний ТИ в окрестности центра зоны Бриллюэна при учете зарядовых флуктуаций. Значения энергий краевых состояний находятся между верхней и нижней зонами флуктуационных состояний

Список литературы

- [1] Вальков В.В. Расщепление спектра фермиевских возбуждений топологического изолятора зарядовыми флуктуациями. *Письма в ЖЭТФ*, **114**, вып. 12, с. 772–777 (2021).

Влияние беспорядка на поперечное магнитосопротивление в вейлевских полуметаллах

Я.И. Родионов¹, К.И. Кугель¹, Б.А. Аронзон², Ф. Нори³

¹ИТПЭ РАН, г. Москва, Россия

²ФИАН, г. Москва, Россия

³RIKEN, Japan

Теоретически исследована зависимость поперечной магнитопроводимости вейлевского полуметалла от типа потенциала беспорядка.

Показано, что тип беспорядка сильно влияет на зависимость магнитопроводимости от магнитного поля и температуры. Детально исследованы два предельных случая: 1) ультраквантовый режим, когда магнитное поле настолько сильное, что только нулевой и первый уровни Ландау дают вклад в магнитотранспорт; 2) квазиклассический предел (слабое магнитное поле), когда основной вклад в магнитотранспорт приходит с уровней Ландау с высоким порядковым номером уровня. Строгий диаграммный подход позволил получить выражения для компонент тензора

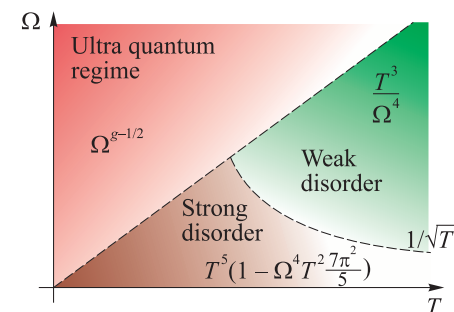


Рис. 1. Фазовая диаграмма для магнитопроводимости от магнитного поля в вейлевском полуметалле. Магнитное поле: $\Omega \sim \sqrt{H}$. Красная область: нетривиальный скейлинг магнитопроводимости от магнитного поля в ультраквантовом пределе. g — степень спада потенциала беспорядка на малых расстояниях: $U(r) = \alpha r^{-1-2g}$

электрической проводимости в обоих предельных случаях. В отличие от упрощенного случая дельта-коррелированного беспорядка длинноволновый потенциал беспорядка (включая случай кулоновских примесей) вводит дополнительный масштаб, меняя, таким образом, геометрию и физику задачи. Показано, что магнитосопротивление может отличаться от линейного как функция магнитного поля для некоторого класса примесных потенциалов в случае слабого беспорядка и для кулоновского потенциала в случае сильного беспорядка.

Список литературы

- [1] Rodionov Ya.I., Kugel K.I., Aronzon B.A., Nori F. Effect of disorder on the transverse magnetoresistance of Weyl semimetals. *Physical Review B*, **102**, no. 20, id. 205105 (2020).

Магнитные фазовые переходы в вейлевском полуметалле WTe_2 , легированном железом

А.Ш. Хачатрян¹, Е.В. Чарная², В.В. Марченков^{3,4}

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе,
г. Санкт-Петербург, Россия

²Санкт-Петербургский государственный университет,
г. Санкт-Петербург, Россия

³Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

⁴Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН,
г. Екатеринбург, Россия

В последнее время исследовались вейлевские полуметаллы (ВП) II типа WTe_2 , легированные калием [1] и хромом [2], которые продемонстрировали интересные магнитные и транспортные свойства. Небольшое легирование магнитными примесями позволяет сохранить топологические свойства ВП, что может привести к интересным экзотическим кван-

товым явлениям, таким как аномальный или квантовый аномальный эффект Холла. Отсюда возникает интерес к исследованию магнитных свойств примесей в диамагнитной матрице ВП.

В настоящей работе с помощью СКВИД — магнитометра MPMS SQUID производства Quantum Design — исследовались магнитные свойства объемных ВП $Fe_{0,03}W_{0,97}Te_2$, отожженных и неотожженных в сравнении с нелегированным кристаллом WTe_2 . Были измерены полевые и температурные зависимости dc намагниченности в полях с напряженностью до 70 кОе в диапазоне температур от 1,8 до 400 К. Измерения проводились в режимах ZFC и FCC при двух ориентациях образцов: с $\parallel H$ и с $\perp H$. Измерялась также теплоемкость кристалла $Fe_{0,03}W_{0,97}Te_2$ с помощью PPMS-9 + Ever-Cool-II производства Quantum Design в температурном диапазоне 1,9–302 К и в магнитных полях 0 Ое, 500 Ое и 1 кОе.

Обнаружена существенная зависимость магнитных свойств от отжига кристаллов $Fe_{0,03}W_{0,97}Te_2$. Выявлено сосуществование разных типов магнитного упорядочения: ферромагнитного, антиферромагнитного и метамагнитного типа при различных температурах. В нелегированном ВП WTe_2 обнаружен температурно-зависимый диамагнетизм, индуцируемый, по-видимому, вейлевскими фермионами. В области температур, соответствующей парамагнитному состоянию исследуемых кристаллов в поле 60 кОе, температурная зависимость магнитной восприимчивости отожженного кристалла описывалась законом Кюри–Вейсса. Отрицательная температура Вейсса равнялась -123 К, а полученное значение эффективного спина указывает на валентное состояние $+2$ для железа. Исследования теплоемкости показали, что температура Дебая $Fe_{0,03}W_{0,97}Te_2$, равная 131 К, близка к значению для монокристалла WTe_2 . При приложении магнитных полей (500 Ое и 1 кОе) электронная компонента теплоемкости не претерпевает существенных изменений.

Список литературы

- [1] Zhu Li, Li Qi-Yuan et al. *Nano Lett.*, **18**, 6585 (2018).
[2] Yang L., Wu H. et al. *Adv. Funct. Mater.*, **31**, 2008116 (2021).

Киральная нелокальная терагерцовая фотопроводимость в структурах на основе топологической фазы $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$

А.В. Галеева¹, А.С. Казаков¹, А.И. Артамкин¹, Л.И. Рябова¹,
С.А. Дворецкий², Н.Н. Михайлов², М.И. Банников³, С.Н. Данилов⁴,
С.Д. Ганичев⁴, Д.Р. Хохлов^{1,3}

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

²Институт физики полупроводников СО РАН,
г. Новосибирск, Россия

³Физический институт имени П.Н. Лебедева РАН,
г. Москва, Россия

⁴University of Regensburg, Universitaetstrasse 31, Regensburg, Germany

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

Продемонстрировано, что нарушение Р- и Т-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.

Топологически нетривиальные магнитные структуры двумерных сильно коррелированных систем в неоднородном магнитном поле

Д.М. Дзедзисашвили¹, В.А. Степаненко², М.С. Шустин¹

¹Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук — обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН,

²Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Сибирский федеральный университет»

После экспериментального открытия магнитных скирмионов (МС) [1] топологически нетривиальные магнитные структуры стали активно исследоваться как перспективные объекты для создания элементной базы устройств логики и памяти нового поколения [2]. Основное преимущество практического применения МС связано с использованием их конфигурационной устойчивости: невозможности перевести нетривиальное распределение поля намагниченности, отвечающее топологическому индексу Q , в распределение, отвечающее другому значению Q , без преодоления энергетического барьера. До недавнего времени рассматривались только магнитные скирмионы с $|Q| = 1$ или $Q = 0$. Это связано с тем, что именно такие аксиально-симметричные структуры стабилизируются взаимодействием Дзялошинского–Мория (ДМ), наиболее активно изучаемым при моделировании МС. В недавних работах было предсказано, что фрустрированное обменное взаимодействие в сочетании с взаимодействием ДМ может приводить к стабилизации аксиально-симметричных МС высокого порядка (higher-order magnetic skyrmions) (МСВП) с $|Q| > 1$ [3–5]. Однако последние не были открыты экспериментально.

В настоящей работе продемонстрирована возможность стабилизации МСВП в двумерных системах за счет помещения их в неоднородное магнитное поле. Ключевым моментом в таком рассмотрении оказался учет орбитальных поправок к энергии взаимодействия системы с магнитным полем. Для оценки характерных энергий таких поправок проведен вывод эффективных взаимодействий внутри спиновой подсистемы

для 2D-модели Хаббарда на треугольной решетке, помещенной во внешнее магнитное поле, при учете спин-орбитального взаимодействия Рашбы. Оказалось, что в режиме сильных электронных корреляций и относительно слабого спин-орбитального взаимодействия эффективные спиновые взаимодействия содержат киральные вклады векторной и скалярной природы. При этом важно, что эти взаимодействия оказываются одного порядка интенсивности. Векторное киральное взаимодействие, или взаимодействие ДМ, определяется величиной спин-орбитального взаимодействия и зависит от характеристик материала. Вклад скалярного кирального взаимодействия зависит от пространственного профиля, приложенного к системе внешнего магнитного поля. Так, в случае однородного поля его вклад сводится к сдвигу энергии отсчета системы на величину, пропорциональную топологическому заряду спиновой конфигурации. В случае неоднородного поля скалярное и векторное киральные слагаемые могут или конкурировать, или дополнять друг друга.

Рассмотрен вопрос о конкуренции киральных взаимодействий для случая аксиально-симметричного магнитного поля в контексте формирования и стабилизации магнитных скирмионов. При этом считалось, что напряженность поля равна нулю в центре скирмиона и степенным образом изменяется при удалении от его центра. Оказалось, что для простых магнитных скирмионов, обладающих топологическими зарядами $|Q| = 1$, скалярное и векторное киральные взаимодействия входят в энергетический функционал аддитивно и усиливают друг друга. Более интересным оказался вопрос стабилизации аксиально-симметричных МСВП с $|Q| > 1$. Оказалось, что их реализация в неоднородном поле возможна, причем исключительно за счет существования скалярного кирального взаимодействия. При этом зависимость характерных параметров магнитных скирмионов высокого порядка от значений топологического заряда или напряженности прикладываемого магнитного поля является очень нетривиальной. Для ее описания мы развили аналитическую теорию МСВП в неоднородном поле в предположении о классической природе магнитных моментов.

Найденные особенности могут служить платформой для экспериментального поиска магнитных скирмионов высокого порядка в сло-

стых сильно коррелированных материалах за счет помещения их в неоднородное магнитное поле. Сами магнитные скирмионы высокого порядка могут представлять практический интерес либо для создания устройств записи нового поколения [2], либо для поиска на них майорановских связанных состояний [6].

Работа поддержана Фондом развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (проект № 20-1-4-25-1), Советом по грантам Президента РФ (проект № МК-4687.2022.1), а также РФФИ, Правительством Красноярского края и Краевым фондом науки (проект № 20-42-243001).

Список литературы

- [1] Moreau-Luchaire C., Moutafis C., Reyren N. et al. *Nature Nanotechnology*, **11**, 444 (2016).
- [2] Yu G., Upadhyaya P., Shao Q., Wu H., Yin G., Li X., He C., Jiang W., Han X., Amiri P.K., Wang K.L. *Nano Letters*, **17**, 1, 261 (2017).
- [3] Leonov A., Mostovoy M. *Nature Commun.*, **6** 8275 (2015).
- [4] Ozawa R., Hayami S., Motome S. *Phys. Rev. Lett.*, **118**, 147205 (2017).
- [5] Rózsa L., Palotás K., Deák A., Simon E., Yanes R., Udvardi L., Szunyogh L., Nowak U. *Phys. Rev. B*, **95**, 094423 (2017).
- [6] Yang G., Stano P., Klinovaja J., Loss D. *Phys. Rev. B*, **93**, 224505 (2016).

НИЗКОРАЗМЕРНЫЕ, СЛОИСТЫЕ МАТЕРИАЛЫ И СТРУКТУРЫ. ТОНКИЕ ПЛЕНКИ

Эффект Андреева–Башкина в электрон-поляритонной системе

А.Ф. Аминов¹, А.А. Соколик^{1,2}, Ю.Е. Лозовик^{1,2}

¹Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,
г. Москва, Россия

²Институт спектроскопии РАН, г. Троицк, Россия

Эффект кулоновского увлечения (дрэга) между электронными газами в нормальном состоянии в двухслойных системах широко используется для изучения транспортных и коллективных свойств полупроводников и металлов [1, 2]. Кроме кулоновского дрэга, когда нормальный компонент одного газа увлекает за собой нормальный компонент другого газа, существует сверхтекучий дрэг, который называют также эффектом Андреева–Башкина [3], впервые предсказанным для смеси сверхтекучих ^3He и ^4He . Эффект проявляется в том, что при движении сверхтекучего компонента одного газа или жидкости индуцируется бездиссипативное движение другого компонента смеси. Было предсказано, что эффект сверхтекучего увлечения может возникать также в сверхпроводниках [4], нейтронных звездах [5] и бозе-конденсированных ультрахолодных атомных газах [6, 7]. Аналогично кулоновскому дрэгу эффект Андреева–Башкина может, в принципе, использоваться для изучения коллективных явлений в веществах в сверхпроводящем и сверхтекучем состояниях.

В представленной работе [8] методами диаграммной техники Фейнмана на основе теории линейного отклика [9] была построена теория сверхтекучего увлечения в двухслойных электрон-поляритонных

системах, состоящих из взаимодействующих сверхпроводника и экситон-поляритонного бозе-конденсата с прямыми или непрямыми экситонами. Схема рассматриваемой системы представлена на рис. 1. Похожие системы были рассмотрены в работе [10] в контексте поляритон-индуцированного механизма сверхпроводимости и, например, в работе [11], в которой была экспериментально изучена бозе-конденсация экситон-поляритонов с электронным слоем на основе квантовой ямы, помещенным в микрополость.

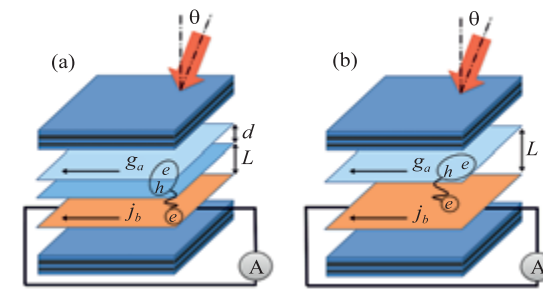


Рис. 1. Схема изучаемой электрон-поляритонной системы с непрямыми (а) и прямыми (б) экситонами в микрополости. Благодаря межслойному взаимодействию незатухающий ток в одном слое индуцирует ток в соседнем слое. Создавая ток поляритонов с помощью лазера и измеряя ток в сверхпроводнике, можно обнаружить эффект Андреева–Башкина

Были получены аналитические выражения для плотности сверхтекучего дрэга, характеризующей эффект увлечения, и проведены численные расчеты при реалистичных параметрах для электронной и экситонной подсистем, представленных в виде квантовой ямы или атомарно тонкого слоя дихалькогенидов переходных металлов. Для изучения влияния учета экранирования на предсказанный эффект плотность сверхтекучего дрэга была рассчитана с учетом различных видов электрон-поляритонного взаимодействия: неэкранированного, экранированного в приближении Томаса–Ферми и в приближении случайных фаз.

Показано, что плотность сверхтекучего дрэга может достигать 0,001–0,1 полной плотности поляритонного конденсата. Эта плотность

уменьшается с увеличением температуры, и поведение ее в основном, определяется температурной зависимостью щели в сверхпроводнике (рис. 2). Кроме того, выяснилось, что плотность дрэга падает с увеличением расстояния между экситонными и электронным слоями как L^{-4} для случая непрямых экситонов и L^{-7} для прямых экситонов.

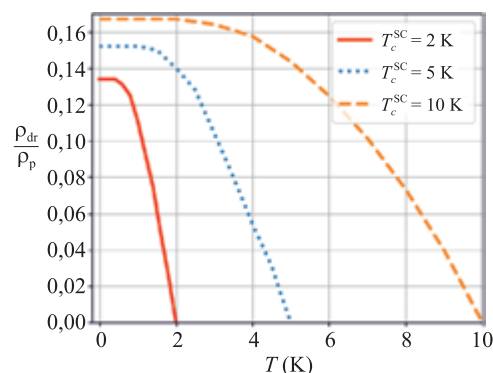


Рис. 2. Зависимость от температуры плотности сверхтекучего дрэга в системе с непрямыми экситонами. Рассматривается система на основе гетероструктуры GaAs/AlGaAs с температурами сверхпроводящего перехода $T_c^{SC} = 2$ К, 5 К и 10 К

Для экспериментального обнаружения предсказанных эффектов предлагается создавать ток экситонных поляритонов и измерять индуцированный ток в сверхпроводнике. Ожидается, что увлеченный ток будет порядка характерного критического тока в сверхпроводниках и, соответственно, достаточно большим для надежного обнаружения в эксперименте.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 21-52-12038.

Список литературы

- [1] Narozhny B. and Levchenko A. Coulomb drag. *Reviews of Modern Physics*, **88**, 025003 (2016).
 [2] Berman O.L., Kezerashvili R.Y., and Lozovik Y.E., Drag effects in a system of electrons and microcavity polaritons. *Phys. Rev. B*, **82**, 125307 (2010).

- [3] Andreev A. and Bashkin E. Three-velocity hydrodynamics of superfluid solutions. *Sov. Phys. JETP*, **42**, 164–167 (1975).
 [4] Duan J.-M. and Yip S. Supercurrent drag via the coulomb interaction. *Phys. Rev. Lett.*, **70**, 3647 (1993).
 [5] Alpar M.A., Langer S.A., and Sauls J.A. Rapid postglitch spin-up of the superfluid core in pulsars. *The Astrophysical Journal*, **282**, 533 (1984).
 [6] Fil D.V. and Shevchenko S.I. Nondissipative drag of superflow in a two-component Bose gas. *Phys. Rev. A*, **72**, 013616 (2005).
 [7] Demin M.V., Lozovik Y.E., and Sharapov V.A. Bose condensate drag in a system of two coupled traps. *JETP Letters*, **76**, 135 (2002).
 [8] Aminov A.F., Sokolik A.A., Lozovik Y.E., to be published.
 [9] Romito D., Lobo C., and Recati A. Linear response study of collisionless spin drag. *Phys. Rev. Research*, **3**, 023196 (2021).
 [10] Cotlet O., Zeytinoglu S., Sigrist M., Demler E., and Imamoglu A. Superconductivity and other collective phenomena in a hybrid bose-fermi mixture formed by a polariton condensate and an electron system in two dimensions. *Phys. Rev. B*, **93**, 054510 (2016).
 [11] Anton-Solanas C., Waldherr M., Klaas M., Suchomel H., Harder T.H., Cai H., Sedov E., Klemmt S., Kavokin A.V., Tongay S., Watanabe K., Taniguchi T., Hofling S., and Schneider C. Bosonic condensation of exciton–polaritons in an atomically thin crystal. *Nature Materials*, **20**, 1233 (2021).

Нековалентные структуры отрицательных ионов, образующиеся при диссоциативном захвате электронов молекулами 1-хлорнафталина

Н.Л. Асфандиаров*, М.В. Муфтахов, А.М. Сафронов, С.А. Пшеничнюк

Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

*E-mail: nail@anrb.ru

Методом спектроскопии диссоциативного захвата электронов [1] исследована молекула 1-хлорнафталина. Полученные кривые эффективного выхода ионов представлены на рис. 1.

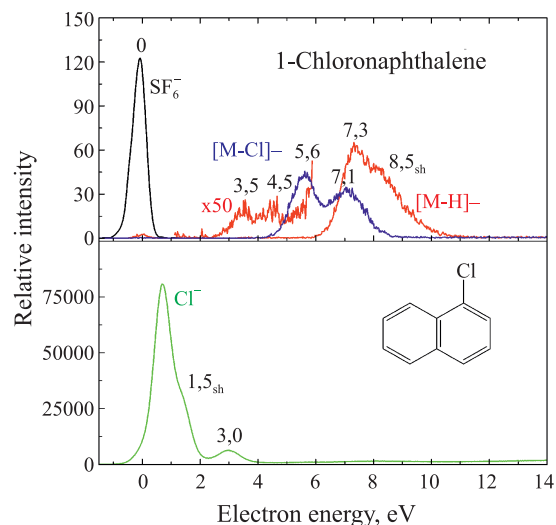


Рис. 1. Кривые эффективного выхода ОИ при ДЗЭ молекулами 1-хлорнафталина и SF_6^-/SF_6 как функция энергии электронов. Указаны положения максимумов, sh означает плечо

Экспериментальные данные интерпретированы с помощью квантово-химических расчетов в приближении DFT CAM-B3LYP/6-311+G(d,p) (см. рис. 2).

Наиболее энергетически стабильной структурой аниона 1-хлорнафталина является структура *St4*, изображенная на рис. 1. Ее относительная энергия с учетом энергии нулевых колебаний $E_{zpv} = -0,296$ эВ практически совпадает с экспериментально измеренной величиной $E_{A_a} = 0,2771 \pm 0,003$ эВ [2].

Исследование ряда бром- и хлор-замещенных производных бифенила, нафталина и антрацена показало [3, 4], что анионы этих молекул способны образовывать необычные структуры с нековалентными связями H–Hal–H, повышающими их энергетическую стабильность по сравнению с «обычными» структурами с $r_{C-Hal} \sim 1,9$ Å. Предположено, что круговой обход анионом галогена нейтрального углеводородного остова создает условия для эффективного образования самособирающихся углеводородных

родных наномембран [5, 6], что важно для прикладных задач микроэлектроники.

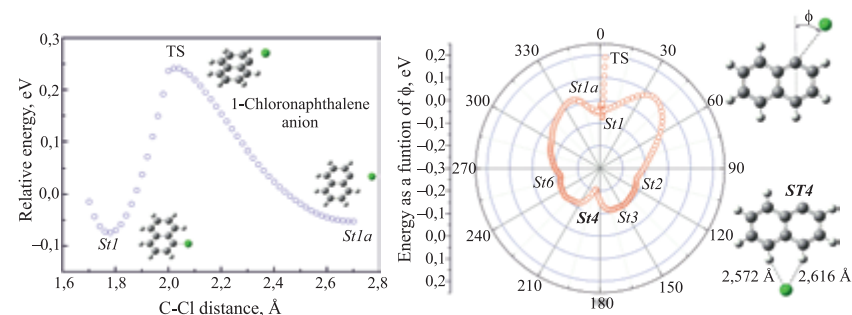


Рис. 2. CAM-B3LYP расчеты энергий аниона $1CIN^-$. Слева — профиль полной энергии (только электронная часть) как функция длины связи r_{C-Cl} . Справа показана электронная часть полной энергии аниона как функции угла ϕ между связью C–Cl и линией, соединяющей противоположные атомы углерода в кольце. Наиболее стабильная структура *St4* показана в правой части. TS означает переходное состояние аниона с атомом хлора, выведенным из плоскости кольца

Список литературы

- [1] Пшеничнюк С.А., Асфандиаров Н.Л., Воробьев А.С., Матейчик Ш. *УФН*, **192**, №2, 177–204 (2022).
- [2] Steelhammer J.C., Wentworth W.E. *J. Chem. Phys.*, **51**, 5, 1802 (1969).
- [3] Asfandiarov N.L., Muftakhov M.V., Pshenichnyuk S.A., Rakhmееv R.G., Safronov A.M., Markova A.V., Vorob'ev A. S., Luxford T.F.M., Kocisek J., and Fedor J., *J. Chem. Phys.* **155**, 244302 (2021)
- [4] Asfandiarov N.L., Muftakhov M.V., Rakhmееv R.G., Safronov A.M., Markova A.V., Pshenichnyuk S.A. *J. Electron Spectr. Rel. Phen.* (2022) accepted for publication.
- [5] Koch S., Kaiser C.D., Penner P., Barclay M., Frommeyer L., Emmrich D., Stohmann P., Abu-Husein T., Terfort A., Fairbrother D.H., Ingolfsson O., and Golzhauer A. *Beilstein J. Nanotechnol.*, **8**, 2562–2571 (2017).
- [6] Cipriani M., Bjornsson R., Barclay M., Terfort A., Fairbrother D.H., and Ingolfsson O. *Int. J. Mass Spectrom.*, **459**, 116452 (2021).

Токово-временная и температурно-временная эволюции волны зарядовой плотности в квазидвумерных соединениях $R\text{Te}_3$

Д.М. Воропаев^{1,2}, А.В. Фролов¹, А.П. Орлов^{1,3},
А.А. Синченко^{1,4}, П. Монсо⁵

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

²Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный, Россия

³Институт нанотехнологий микроэлектроники РАН, г. Москва, Россия

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

⁵Univ. Grenoble Alpes, Inst. Neel, CNRS, г. Гренобль, Франция

Некоторое время назад в трителлуридах редкоземельных металлов $R\text{Te}_3$ (R : La, Gd, Tb, Dy, Er, Tm) было зафиксировано скольжение волны зарядовой плотности (ВЗП) в мостиковых структурах, ориентированных вдоль направления ВЗП. При приложении электрического поля больше порогового происходит резкое возрастание проводимости. Пороговое поле определяется пиннингом, фиксирующим фазу ВЗП и определяемым дефектной структурой кристалла. В данной работе обнаружено, что при выдержке образца при определенной температуре ниже перехода Пайерлса величина порогового поля E_t заметно возрастает со временем. Была обнаружена зависимость порогового поля от тока выдержки образца при температурах ниже перехода Пайерлса. В работе исследованы температурная и токовая эволюции порогового поля E_t в ряде квазидвумерных соединений $R\text{Te}_3$ в широком диапазоне температур. Получены следующие результаты:

1. При нулевых значениях тока зависимость значения порогового при постоянной температуре имеет асимптотический вид.
2. После выдержки образца при температуре T_0 на температурной зависимости порогового поля возникает пик с максимумом в T_0 , что напоминает пик-эффект в сверхпроводниках, проявляющийся на зависимостях критического тока от магнитного поля или от температуры.

3. Кратковременный нагрев образца после выдержки при температуре T_0 приводит к исчезновению максимума, значение порогового поля в T_0 возвращается к исходному, а зависимость порога от времени приобретает линейный вид.
 4. Рост порогового поля слабо зависит от тока экспозиции образца, если этот ток меньше порогового I_t , и, наоборот, при пропускании тока выше порогового увеличение порогового поля сильно замедляется.
 5. Если образец выдерживался при температуре ниже перехода Пайерлса, то выдержка при токе выше порогового I_t может уменьшить значение величины порогового поля.
- Обнаруженные эффекты предположительно связаны с тем, что после охлаждения образца состояние ВЗП является неравновесным. Рост порога связан с медленной релаксацией кристалла к равновесному состоянию, характеризующему высоким значением порогового поля.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 22-22-00331).

Список литературы

- [1] Frolov A.V., Orlov A.P., Hadj-Azzem A., Lejay P., Sinchenko A.A., Monceau P. *Phys. Rev. B*, **101**. 15. С. 155144 (2020).
- [2] Frolov A. V., Orlov A. P., Sinchenko A. A., Monceau P. *JETP Letters*, **109**, 3. С. 203–206 (2019).
- [3] Frolov A. V. et al. Non-equilibrium charge density wave ground state of quasi-two-dimensional rare-earth tritelluride TbTe_3 . *Applied Physics Letters*, **118**. 25. С. 253102 (2021).

Пространственная когерентность магнитоэкситонного конденсата в холловском диэлектрике

А.В. Горбунов, В.Б. Тимофеев

Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия

Триплетные циклотронные магнитоэкситоны (ТЦМЭ, или спин-флип экситоны) в квантово-холловском изоляторе являются композит-

ными бозонами со спином 1. Спин-флип экситоны — оптически неактивные («темные») возбуждения, время жизни которых при температуре $T < 1$ К достигает ~ 1 мс, поэтому с помощью достаточно слабого нерезонансного фотовозбуждения удастся достичь концентрации ТЦМЭ $n_{\text{ex}} \sim (1-10)\%$ от плотности квантов магнитного потока, не перегревая систему. В результате в холловском изоляторе (электронный фактор заполнения $\nu = 2$) образуется качественно новая фаза — магнитоэкситонный конденсат (МЭК) [1]. Это состояние является экспериментальным примером конденсации композитных бозонов в пространстве обобщенных импульсов — величин, зависящих как от пространственных координат, так и от их градиентов [2]. Конденсат спин-флип экситонов способен растекаться из области фотовозбуждения на макроскопические расстояния. В одиночной квантовой яме GaAs/AlGaAs шириной 35 нм с электронной концентрацией $2 \cdot 10^{11}$ см $^{-2}$ и подвижностью $15 \cdot 10^6$ см 2 /В·с транспортная длина ТЦМЭ в конденсированном состоянии по крайней мере на три порядка больше, чем длина диффузии магнитоэкситонов в газовой фазе [3]. При этом скорость разбегания экситонов из пятна накачки достигает $\sim 10^3$ см/с.

С помощью сдвиговой интерферометрии проведены измерения поперечной длины пространственной когерентности ξ в магнитоэкситонном конденсате. Для этого зондирующее излучение резонансного отражения для перехода «0–0» между нулевыми уровнями Ландау валентной зоны и зоны проводимости из оптического криостата с откачкой паров ^3He пропускать в виде параллельного пучка через интерферометр Майкельсона и попадало на охлаждаемую ПЗС-камеру, которая фиксировала увеличенное изображение образца. В одно из плеч интерферометра вместо зеркала была установлена 90° -призма, которая дополнительно переворачивает изображение на 180° , так что на матрице ПЗС-камеры регистрируется промодулированная интерференционными полосами сумма двух изображений: прямого и перевернутого. Огибающая профиля полос, т. е. зависимости их амплитуды от величины сдвига между изображениями из разных плеч интерферометра $|I(\delta)|$, есть не что иное, как коррелятор первого порядка $|g^{(1)}(\delta)|$, характеризующий простран-

ственную когерентность излучателя. При выключенной оптической накачке, т. е. в отсутствие МЭК, эта огибающая неплохо описывается сверткой аппаратной функции оптической системы $|2J_1(\nu)/\nu|$ (здесь $J_1(\nu)$ — функция Бесселя 1-го рода и 1-го порядка, $\nu = 2\pi\delta\sin\alpha/\lambda$, $\sin\alpha$ — числовая апертура оптической системы, λ — длина волны света) и функции $\exp(-\delta/\xi)$ с длиной когерентности источника зондирующего излучения $\xi = 0,4$ мкм (рис. 1,а). При включении накачки, в условиях формирования МЭК, регистрируется зависимость $|g^{(1)}(\delta)|$ (рис. 1,б), которую можно объяснить, только предположив, что имеются два независимых источника излучения: некогерентный ($\xi \lesssim 0,1$ мкм) и частично когерентный с параметром $\xi \sim 10$ мкм (точнее определить здесь невозможно). На рис. 1,б приведен результат суммирования с весом 0,8 и 0,2, соответственно, аппаратной функции и ее свертки с экспонентой $\exp(-|x|/\xi)$ при $\xi = 10$ мкм. Здесь следует вспомнить, что, как известно, при конечной температуре в однородном двумерном бозе-газе дальний порядок невозможен. Поэтому вместо конденсации Бозе–Эйнштейна в газе взаимодействующих бозонов происходит переход Березинского–Костерлица–Таулесса (БКТ) в сверхпроводящую фазу, для которой характерно спадание $|g^{(1)}(x)|$ по степенному закону.

Сравнительно недавно были получены экспериментальные подтверждения степенного спада $g^{(1)}$ на расстояниях до ~ 40 мкм для конденсата экситонных поляритонов в высококачественных GaAs-микрорезонаторах [4]. Качественно зависимость на рис. 1,б весьма схожа с обнаруженной в работе [4]. Отличие состоит в том, что ширина центрального пика, обусловленного надконденсатными частицами, напрямую связана с тепловой дебройлевской длиной волны λ_{dB} и для поляритонов с массой $\sim 10^{-4}m_e$ достигает 5–6 мкм. Масса спин-флип экситона гораздо больше, поэтому для него при $T = 0,5$ К ширина пика при малых δ определяется разрешением оптической системы: ≈ 1 мкм. Что же касается спада $g^{(1)}$ на больших расстояниях, то его вполне можно

описать и степенной зависимостью вида $(b/|x|)^a$ (серая кривая на рис. 1,б), но точность определения показателя невелика.

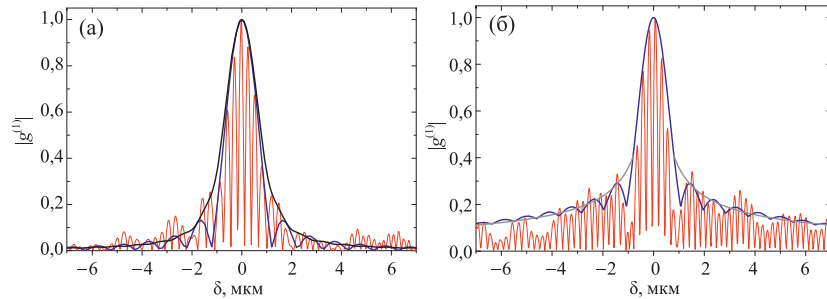


Рис. 1. Профиль интерференционных полос в свете резонансного отражения, $|I(\delta)|$ — красная линия. (а) Без накачки ($P_{\text{pump}} = 0$, $P_{\text{probe}} = 5$ мВт); синяя линия — аппаратная функция $|2J_1(v)/v|$, наилучшим образом описывающая центральный пик; черная линия — результат ее свертки с функцией $\exp(-|\delta|/\xi)$ при $\xi = 0,4$ мкм. (б) При включенной накачке ($P_{\text{pump}} = P_{\text{probe}} = 1$ мВт); синяя линия — результат сложения с весом 0,8 и 0,2 соответственно теоретической кривой на (а) и ее свертки с $\exp(-|\delta|/\xi)$ при $\xi = 10$ мкм; серая линия — функция $(0,18/|\delta|)^{0,6}$

Таким образом, с помощью сдвиговой интерферометрии обнаружена высокая пространственная когерентность магнитоэкситонного конденсата в квантово-холловском диэлектрике. Картина интерференции в свете резонансного отражения свидетельствует о наличии двух компонентов: некогерентного излучения (длина когерентности $\xi \lesssim 0,1$ мкм) надконденсатного магнитоэкситонного газа и излучения конденсата, для которого $\xi \sim 10$ мкм или даже более. Этот результат согласуется с выводами работы [5], из которой следует, что ансамбль ТЦМЭ в холловском диэлектрике всегда является неравновесным и состоит из газа надконденсатных экситонов с обобщенным импульсом $q \approx 0$ и конденсата экситонов в энергетическом минимуме с импульсами порядка обратной магнитной длины $q_{\text{min}} \sim 1/l_B \approx 10^6 \text{ см}^{-1}$.

Список литературы

- [1] Kulik L.V., Gorbunov A.V., Zhuravlev A.S., Timofeev V.B., Dickmann S., Kukushkin I.V. *Scientific Reports*, **4**, 10354 (2015).
- [2] Avron J.E., Herbst I.W., Simon B. *Ann. Physics*, **114**, 431 (1978).
- [3] 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).
- [4] Roumpos G., Lohse M., Nitsche W.H., Keeling J., Szymańska M.H., Littlewood P.B., Löffler A., Höfling S., Worschech L., Forchel A., Yamamoto Y. *Proc. Nat. Acad. Sci.*, **109**, 6467 (2012).
- [5] Журавлев А.С., Кузнецов В.А., Горбунов А.В., Кулик Л.В., Тимофеев В.Б., Кукушкин И.В. *Письма в ЖЭТФ*, **110**, 260 (2019).

Особенности температурной зависимости фотопроводимости слоистого квазиодномерного полупроводника TiS_3

И.Г. Горлова*, С.А. Никонов, С.Г. Зыбцев, В.Я. Покровский

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

*E-mail: gori@cplire.ru

Слоистый квазиодномерный полупроводник TiS_3 известен своими уникальными оптическими свойствами, однако до сих пор фотопроводимость, $\delta\sigma$, этого соединения изучалась только при комнатной температуре [1]. Особый интерес к исследованию TiS_3 при низких температурах связан с предполагаемой возможностью образования коллективных состояний из полупроводниковой фазы [2]. Ранее на температурных зависимостях сопротивления, $R(T)$, обнаружены максимумы $d \ln R/d(1/T)$ при 50 К и 15 К. При $T < 50$ К наблюдалась нелинейная проводимость, причем ее величина резко возрастала при $T < 15$ К. Аналогичные особенности характерны для квазиодномерных проводников с движущейся волной зарядовой плотности (ВЗП), например NbS_3 и TaS_3 , однако прямого доказательства возникновения коллективных электронных состояний

в TiS_3 до сих пор нет [2]. В настоящей работе исследована температурная зависимость фотопроводимости TiS_3 . Получены новые данные об электронной структуре кристалла и ее перестройке.

Монокристаллические вискеры TiS_3 были исследованы при воздействии излучения ближнего ИК-диапазона в области температур 300–5 К. С понижением температуры от 300 К фотопроводимость растет, достигает максимума примерно при 60 К и резко уменьшается с дальнейшим понижением температуры. Еще одна особенность фотопроводимости, а именно дополнительный спад, наблюдается в области 15 К, причем $\delta\sigma(T)$ повторяет особенность проводимости.

Фотопроводимость при $T > 60$ К можно описать в рамках полупроводниковой модели как следствие возбуждения электронно-дырочных пар через щель $E_g \sim 1$ эВ. Температурный ход $\delta\sigma$ определяется ростом подвижности электронов с понижением температуры. Отсутствие экспоненциального роста $\delta\sigma \sim \exp(E_g/T)$ с понижением температуры означает, что рекомбинация электронов и дырок происходит не напрямую, а, скорее всего, через донорный уровень с большим временем жизни носителей. Оценки, основанные на полученных значениях $\delta\sigma$, дают время рекомбинации ~ 3 – 25 мкс при 300 К.

Резкое падение фотопроводимости ниже 60 К можно объяснить фазовым переходом, в результате которого часть носителей заряда конденсируется в коллективное состояние типа ВЗП. Вид особенности при 15 К указывает на то, что фотоэлектроны конденсируются в это состояние, так же как и равновесные электроны, и при этом их подвижность снижается. В этой области температур происходит окончательное формирование коллективного состояния.

Обнаруженные особенности фотопроводимости при температурах, вблизи которых ранее наблюдались максимумы на $\ln R/d(1/T)$, указывают на изменение электронного спектра при данных температурах. Однако температурная зависимость фотопроводимости TiS_3 при $T < 60$ К сильно отличается от $\delta\sigma(T)$ классических полупроводников и известных квазиодномерных проводников с ВЗП [3].

Работа выполнена при поддержке РФФ, проект 22-12-00319.

Список литературы

- [1] Island J.O., Molina-Mendoza A.J., Barawi M. et al. *2D Mater.*, **4**, 022003 (2017).
- [2] Randle M.D., Lipatov A., Mansaray I. et al. *Appl. Phys. Lett.*, **118**, 210502 (2021).
- [3] Zaitsev-Zotov S.V. and Minakova V.E. *Phys. Rev. Lett.*, **97**, 266404 (2006).

Нелинейно-оптические свойства экситон-поляритонов в киральном микрорезонаторе

О.А. Дмитриева^{1,2}, Н.А. Гиппиус³, С.Г. Тиходеев^{1,2*}

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

²Институт общей физики РАН им. А.М. Прохорова, г. Москва, Россия

³Сколковский институт науки и технологии, г. Москва, Россия

*E-mail: tikh@gpi.ru

Полупроводниковые микрорезонаторы с активной квантовой ямой и кирально-модулированным верхним зеркалом могут переходить в режим лазерной генерации с циркулярно-поляризованным излучением как при оптической [1, 2], так и электрической накачке [3]. При этом при низких температурах они работают в режиме сильной экситон-поляритонной связи [2], являясь, таким образом, примером так называемых поляритонных лазеров [4]. По сравнению с некиральными поляритонными лазерами они не требуют использования статического магнитного поля для создания циркулярно-поляризованного излучения.

В докладе теоретически проанализирована мультистабильность [5] нелинейно-оптического отклика экситон-поляритонов в кирально-модулированном микрорезонаторе. Показано, что нарушение зеркальной симметрии такого резонатора приводит к резким мультистабильным переходам когерентной экситон-поляритонной моды (поляритонного конденсата) из линейно-поляризованного в циркулярно-поляризованное состояние и обратно даже при линейно-поляризованной резонансной накачке.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00961 (<https://rscf.ru/project/22-22-00961/>).

Список литературы

- [1] Demenev A.A., Kulakovskii V.D., Schneider C., Brodbeck S., Kamp M., Hoefling S., Lobanov S.V., Weiss T., Gippius N.A., and Tikhodeev S.G. Circularly polarized lasing in chiral modulated semiconductor microcavity with GaAs quantum wells. *Appl. Phys. Lett.*, **109**, 171106 (2016).
- [2] Kulakovskii V.D., Brichtkin A.S., Gippius N.A., and Tikhodeev S.G. Elliptically polarized exciton-polariton condensate in a semiconductor microcavity with a chiral photonic crystal slab. *J. of Physics: Conf. Series*, **1092**, 012071 (2018).
- [3] Maksimov A.A., Filatov E.V., Tartakovskii I.I., Kulakovskii V.D., Tikhodeev S.G., Schneider C., and Höfiling S. Circularly polarized laser emission from an electrically pumped chiral microcavity. *Phys. Rev. Appl.*, **17**, L021001 (2022).
- [4] Bhattacharya P., Xiao B., Das A., Bhowmick S., Heo J. Solid state electrically injected exciton-polariton laser. *Phys. Rev. Lett.*, **110**, 206403 (2013).
- [5] Gippius N.A., Shelykh I.A., Solnyshkov D.D., Gavrilov S.S., Rubo Yu.G., Kavokin A.V., Tikhodeev S.G., and Malpuech G. Polarization multistability of cavity polaritons. *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 236401 (2007).

Магнитно-электронная неустойчивость графена на ферромагнитной подложке

Д.Н. Дресвянкин¹, А.В. Рожков²

¹Московский физико-технический институт

(национальный исследовательский университет), г. Москва, Россия

²Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН,

г. Москва, Россия

Графен — двумерная углеродная система с гексагональной структурой. Эта углеродная структура считается многообещающим объектом исследований в различных областях физики, например в спинтронике,

так как демонстрирует ряд интересных физических свойств. Одним из перспективных способов управления спиновыми свойствами графена является помещение графенового образца на магнитную подложку. Это делает вопрос об исследовании устойчивости подобной системы актуальным для современной физики конденсированного состояния. В работе будет теоретически показано, что графен, помещенный на ферромагнитную подложку, демонстрирует «кооперативную» магнитно-электронную неустойчивость. Эта неустойчивость выражается в том, что при определенных условиях в системе «графен–субстрат» пропадает идеальная однородная ферромагнитная намагниченность, и у вектора намагниченности появляется подкашивающая деформация. Мы покажем, что возникновение подкашивающей деформации идеального ферромагнитного упорядочения в подложке приводит к понижению энергии электронов в графене. Данное понижение всегда будет компенсировать положительный вклад в энергию системы, связанный с возникновением подкоса намагниченности в субстрате. В случае идеального магнитного ферромагнитного упорядочения графен переходит в ферромагнитное состояние. В случае когда в системе имеется подкос, в энергетическом спектре появляется щель, то есть графен переходит в диэлектрическое состояние. Величина этой щели определяется следующей формулой:

$$\Delta = 4h \exp\left(\frac{W}{h} - \frac{\pi^3 t^2 J}{4\sqrt{3}\tau^2 h}\right), \quad (1)$$

где h — энергия зеемановского расщепления, W — ширина зоны, t — интеграл перескока в графене, J — обменный интеграл материала подложки. Величина τ , в свою очередь, связывает намагниченность в подложке с энергетическим вкладом обменного взаимодействия в гамильтониан графена и определяется следующей формулой:

$$h = \tau m. \quad (2)$$

Для простоты мы полагали величину намагниченности безразмерной и по модулю равной единице. В таком случае величина τ численно совпадает с величиной h и примерно равняется $6 \cdot 10^{-3}$ эВ, что следует из экспериментальной статьи [1]. Опираясь на данные из этой же статьи, мы оце-

нили величину обменного интеграла J в 10^{-2} эВ. Величины W и t имеют порядок 1 эВ [2, 3]. Подставляя эти значения, мы получаем незначительную щель порядка 10^{-3} К. Экспериментальное обнаружение столь малой щели представляется затруднительным, но сам факт наличия магнитно-электронной неустойчивости не исчезает. Стоит также принять во внимание, что в наших расчетах не учитывалось электрон-электронное взаимодействие, учет которого может повысить значение щели. Стоит также отметить, что полученные результаты применимы к любому двумерному дираковскому материалу, поэтому если в будущем будут получены подобные материалы с меньшим интегралом перескока, то магнитно-электронная неустойчивость будет проявлять себя более ярким образом.

Список литературы

- [1] Wei P., Lee S., Lemaitre F., Pinel L., Cutaia D., Cha W., Katmis F., Zhu Yu, Heiman D., Hone J., Moodera J.S., Chen C.-T. Strong interfacial exchange field in the graphene/EuS heterostructure. *Nature Materials*, **15**, 711 (2016).
- [2] Rozhkov A.V., Sboychakov A.L., Rakhmanov A.L., Franco Nori Electronic properties of graphene-based bilayer systems. *Physics Reports*, **648**, 1 (2016).
- [3] Zollner K., Gmitra M., Frank T., Fabian J. Theory of proximity-induced exchange coupling in graphene on hBN/(Co/Ni). *Physical Review B*, **94**, 155441 (2016).

Плазмон-поляритонные резонансы в проводящем диске

И.В. Загороднев^{1,*}, Д.А. Родионов^{1,2}

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

²Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет), г. Москва, Россия
*E-mail: igor.zagorodnev@gmail.com

Недавно систематические экспериментальные исследования плазменных резонансов в дисках из двумерного электронного газа в квантовых ямах GaAs/GaAlAs, в режиме, когда электромагнитное запаздывание не мало (т. е. когда размер диска достаточно велик и сравним с длиной

волны возбуждающего излучения), выявили целую область параметров, в которой практически отсутствуют аналитические расчеты, а местами даже качественное понимание физических процессов [1]. И если частоту плазменных резонансов в таких дисках можно качественно описать, используя размерное квантование волнового вектора плазмона размером диска в законе дисперсии для бесконечной системы (с учетом электромагнитного запаздывания), то корректно описать ширину линии поглощения, или, по-другому, затухание плазменных колебаний, таким способом не удастся. В таких случаях часто считают, что ширина линии определяется суммой столкновительного и радиационного уширений [2, 3]. Столкновительное уширение определяется обратным временем релаксации носителей, а радиационное — потерями энергии на излучение (в пренебрежении столкновениями).

Данный доклад является продолжением работы [4]. В нём будут теоретически проанализированы резонансная частота и ширина линии поглощения электромагнитного излучения двумерным электронным газом в форме диска, в том числе в случае, когда рядом с диском расположена металлическая плоскость (электрод/затвор). Близко расположенный металл подавляет основное мультипольное излучение за счет взаимодействия с изображением, что приводит к уменьшению радиационных потерь плазменных колебаний и, следовательно, к увеличению добротности плазменного резонанса. В случае когда расстояние между металлом и диском сравнивается с длиной волны внешнего (резонансного) излучения, наблюдаются осцилляции в добротности резонанса по резонансной плазменной частоте или расстоянию между металлом и диском.

Список литературы

- [1] Gusikhin P.A., Muravev V.M., Zagitova A.A. et al. *Phys. Rev. Lett.*, **121**, 176804 (2018).
- [2] Zoric I., Zach M., Kasemo B., Langhammer C. *ACS Nano*, **5**, 2535 (2011).
- [3] Andreev I.V., Muravev V.M., Belyanin V.N., Kukushkin I.V. *Appl. Phys. Lett.*, **105**, 202106 (2014).
- [4] Zagorodnev I.V., Rodionov D.A., Zabolotnykh A.A. *Phys. Rev. B*, **103**, 195431 (2021).

Магнитосопротивление скользящей волны зарядовой плотности

И.А. Кон¹, С.В. Зайцев-Зотов^{1,2}

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

²ВШЭ, г. Москва, Россия

В работе [1] было обнаружено, что в вейлевском полуметалле с волной зарядовой плотности $(\text{TaSe}_4)_2\text{I}$ при температуре ниже температуры пайерсловского перехода, т. е. при наличии щели в энергетическом спектре состояний, может наблюдаться сильное отрицательное магнетосопротивление, которое интерпретировалось как проявление киральной аномалии. Попытки воспроизвести этот эффект на тонких образцах этого соединения в условиях отсутствия джоулева перегрева носителей тока оказались безуспешными [2], но позволили обнаружить интересные особенности магнетосопротивления, напоминающие слабую локализацию. Эти исследования поставили вопрос о магнетосопротивлении топологически тривиальных квазиодномерных проводников с ВЗП. В настоящей работе представлены результаты исследования одного из таких материалов — ромбического TaS_3 . На рис. 1 представлены вольт-амперные характеристики изучаемого образца TaS_3 в области низких температур.

Видно, что при гелиевых температурах линейная проводимость образцов оказывается в гига- и тераомной области и вкладом ее магнетосопротивления, казалось бы, можно пренебречь на фоне на много порядков большей нелинейной проводимости, обусловленной движением ВЗП. На рис. 2 показано магнетосопротивление при различных значениях напряжения на образце при ориентации $\mathbf{H} \perp \mathbf{J}$. Видно, что при движении ВЗП в магнетосопротивлении наблюдаются эффекты, характерные для одночастичной проводимости металлов и полупроводников — квадратичное положительное магнетосопротивление и отрицательное магнетосопротивление, напоминающее слабую локализацию. Аналогичные зависимости наблюдались также и в геометрии $\mathbf{H} \parallel \mathbf{J}$, но имели в несколько раз

меньшую величину. Удивительным обстоятельством является наблюдение подобной зависимости в области нелинейной проводимости, т. е. в режиме, при котором вклад ВЗП в проводимость на несколько порядков превышает вклад квазичастиц, а эффекты локализации в проводимости ВЗП не ожидаются. Обсуждаются возможные механизмы возникновения подобных эффектов при скольжении ВЗП.

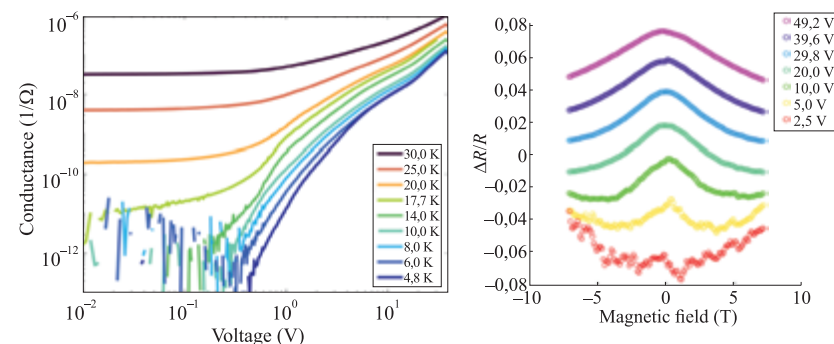


Рис. 1. Вольт-амперные характеристики TaS_3 в области низких температур

Рис. 2. Магнетосопротивление TaS_3 при температуре 4,8 К

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект 21-72-20114).

Список литературы

- [1] Gooth J., Bradlyn B., Honnali S., Schindler C., Kumar N., Noky J., Qi Y., Shekhar C., Sun Y., Wang Z., Bernevig B.A., and Felser C. Axionic charge-density wave in the Weyl semimetal $(\text{TaSe}_4)_2\text{I}$. *Nature*, **575**, 315 (2019).
- [2] Cohn I.A., Zybtev S.G., Orlov A.P., and Zaitsev-Zotov S.V., Magnetoresistance in quasi-one-dimensional Weyl semimetal $(\text{TaSe}_4)_2\text{I}$. *JETP Letters*, **112**, 88 (2020).

Электрические свойства алмазоподобных пленок с большой концентрацией бора, полученных методом импульсного лазерного осаждения

П.В. Зинин², Р.И. Романов³, В.Ю. Фоминский³, С. Буга¹,
В.П. Филоненко⁴, С.Ю. Краснобородко², Ю.Е. Высоких², И.Б. Кутуза²

¹Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов,
г. Троицк, Россия

²Научно-технологический центр уникального приборостроения РАН,
г. Москва, Россия

³Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,
г. Москва, Россия

⁴Институт физики высоких давлений РАН,
г. Троицк, Россия

E-mail: zosimpvz@email.ru

Пленки, содержащие бор и углерод, представляют все больший интерес, поскольку они обладают целым комплексом уникальных электрофизических, оптических, механических и биомедицинских свойств. Было также предсказано, что плотные фазы В–С с высокой концентрацией бора могут быть метастабильными, сверхтвердыми и металлическими проводниками. В данной работе обсуждаются результаты исследования электрических свойств BC_3 - и BC_5 -пленок, полученных методом импульсного лазерного осаждения (PLD).

Подробности метода PLD, используемого для нанесения этих тонких пленок BC_x , можно найти в статье [1]. Вкратце PLD пленок BC_x проводился с помощью лазера YAG:ND+ (АО «Solaris»), работающего в режиме модуляции добротности. Длительность импульса составляла 10 нс, частота следования импульсов — 20 Гц, длина волны лазера — 266 нм. Энергия в импульсе составляла приблизительно 40 МДж. Плотность энергии лазерного излучения на поверхности мишени составляла 8 Дж/см². Вакуумное осаждение пленок BC_x проводилось при давлении остаточного газа $1,5 \cdot 10^{-3}$ Па. Пленки были получены методом PLD на на-

гретых подложках алмаза, когда для импульсной лазерной абляции использовались мишени BC_3 и BC_7 , полученные спеканием порошков наноалмаза и бора под давлением [2]. Температура полированной монокристаллической алмазной подложки составляла 770 К. Толщины тонких пленок BC_3 и BC_5 , измеренные методом нанопрофилометрии, составили 20 ± 3 нм. Исследования атомно-силовой микроскопии проводились с использованием ACM Ntegra Prima (NT-MDT BV, Нидерланды). Для электрических измерений (режим сопротивления распространению) мы использовали зонд HC_FM/W2C (Tipsnano), покрытый карбидом вольфрама толщиной около 30 нм и жесткостью 6 н/м ($\pm 20\%$). Ток, проходящий через образец, измерялся в каждой точке сканирования одновременно с использованием изображений рельефа поверхности.

Измерения энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния, проведенные в предыдущих исследованиях, показали, что: (а) содержание бора в пленках, полученных методом PLD, было несколько выше, чем в мишенях, поэтому мы будем обозначать пленки, аналогичные их мишеням; (б) сформированные пленки BC_x имели алмазоподобную структуру [8].

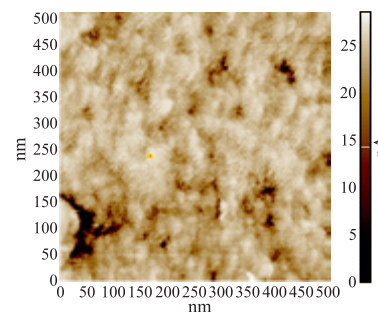


Рис. 1. Проводимость поверхности пленки BC_3

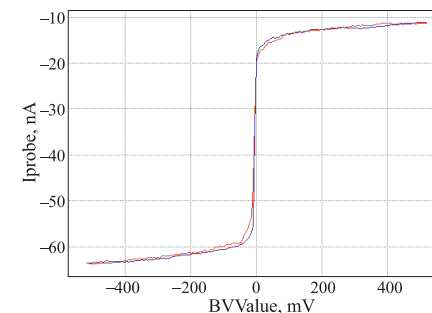


Рис. 2. Вольт-амперная характеристика пленки BC_3

На рис. 1 показано распределение удельного сопротивления на поверхности пленок BC_3 . Средний размер зерен толстой пленки (GB) не

может быть разрешен на поверхности тонкой пленки BC_3 , что указывает на то, что средний размер зерен в тонкой пленке BC_3 меньше радиуса наконечника (30 нм). Различие в микроструктуре может быть связано с различием в процессах роста. Если пленка тонкая, размер алмазного зерна может быть пропорционален толщине пленки. Контраст на АСМ-изображении толстой пленки BC_3 говорит о том, что проводимость между зернами высока. Это согласуется с наблюдением Полякова и др., демонстрирующим образование нанослоев «бор–углерод» (B–C) и бислоев в алмазах, легированных бором, с увеличением концентрации бора. Вольт-амперная характеристика пленки показана на рис. 2. Видно, что значения проводимости BC_3 на алмазе близки к тем, что были измерены на аналогичных пленках, напыленных на Al_2O_3 [3]. Измерения АСМ, проведенные на поверхностях пиролитического графита и пленок BC_3/Al_2O_3 , показали, что удельное сопротивление контактного наконечника в областях высокой проводимости пленок BC_3/Al_2O_3 в 410 раз ниже, чем у графита.

Список литературы

- [1] Романов Р.И., Фоминский В.Ю., Зинин П.В., Троян И.А., Фоминский Д.В. et al. Влияние бора на структуру и проводимость тонких пленок, получаемых лазерной абляцией алмаза при 700 °С. *Письма в ЖТФ*, **44**(12) p. 16–24 (2018).
- [2] Filonenko V.P., Nozhkina A.V., Romanov R.I., Zinin P.V., Titov S.A. et al. Synthesis of New Materials in the Boron–Carbon System. *Glass and Ceramics*, **74**(11–12) p. 434–439 (2018).
- [3] Fominski V.Y., Romanov R.I., Vasil'evskii I.S., Safonov D.A., Soloviev A.A. et al. Pulsed laser modification of layered B-C and mixed BC_x films on sapphire substrate. *Diamond and Related Materials*, 108336, 114 p. (2021).

Линейная и нелинейная фотопроводимость в квазиодномерном проводнике NbS_3

С.Г. Зыбцев, С.А. Никонов, В.Я. Покровский

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

Фотопроводимость в квазиодномерных проводниках (КОП) может быть как линейной, так и нелинейной. В первом случае имеется в виду проводимость квазичастиц, наблюдаемая в полях ниже порогового, E_t . Во втором, как правило, речь идет об изменении E_t под действием света. Нелинейная фотопроводимость была обнаружена два десятилетия назад на голубых бронзах ($K_{0,3}MoO_3$) [1], затем результат был повторен на КОП TaS_3 [2] и на NbS_3 [3]. Линейная фотопроводимость впервые наблюдалась на нанокристаллах TaS_3 с сечением порядка 10^{-3} – 10^{-2} мкм² [4], причем заметно позже, чем нелинейная [1].

Монокристаллы NbS_3 растут, как правило, в виде вискероидов нанометровой толщины, и для приготовления структур нет необходимости в их расщеплении [5]. Такие нановискеры являются идеальными объектами для изучения фотопроводимости. В NbS_3 наблюдается три ВЗП: ВЗП-0, образующаяся при $T_{p0} = 460$ К [6], ВЗП-1 — при $T_{p1} = 360$ К и ВЗП-2 — при $T_{p2} = 150$ К. Самыми совершенными оказались высокоомные кристаллы [5], на которых ВЗП-2 не наблюдается. На них были проведены основные исследования фотопроводимости. Удалось повторить почти все особенности линейной фотопроводимости, $\delta\sigma$, наблюдавшиеся ранее на TaS_3 [4]. Существенное отличие в том, что максимум эффекта наблюдался при температуре 110–130 К, в то время как для TaS_3 максимум был в районе 40–60 К.

Одна из особенностей TaS_3 — отклонение температурной зависимости проводимости, σ , от активационной при низких температурах (см. [2] и ссылки в ней). При изучении зависимости $\delta\sigma$ в TaS_3 от мощности облучения был обнаружен переход режима рекомбинации от линейного к квадратичному [2]. Такой переход, наблюдающийся и в обычных полупроводниках, происходит, когда величина $\delta\sigma$ сравнивается с равновес-

ной (темновой) проводимостью квазичастиц ($\delta\sigma = \sigma$). Используя это обстоятельство, авторы [2] выделили вклад квазичастиц в темновую проводимость и его температурную зависимость. Оказалось, что квазичастичная проводимость следует активационному закону в широком диапазоне температур, и отклонение от нее связано с дополнительным коллективным вкладом в σ , вероятно обусловленным солитонами.

Мы провели аналогичный эксперимент на NbS_3 вплоть до гелиевых температур. Оказалось, что величина $\delta\sigma$, определенная при переходе к квадратичной рекомбинации, во всем диапазоне температур следует активационному закону, то есть темновая проводимость полностью обусловлена квазичастицами. Это может означать, что коллективный вклад в σ в NbS_3 отсутствует.

Была также исследована возможность влияния на фотопроводимость контактных явлений. Известно, что конверсия одночастичных носителей тока, попавших в образец из контакта, в ВЗП (и наоборот) происходит через процесс проскальзывания фазы (ПФ) ВЗП. Это явление приводит к появлению дополнительного напряжения на контактах и перераспределению тока между ВЗП и квазичастицами в некоторой приконтактной области. Для выяснения влияния контактов на фотопроводимость была измерена фотопроводимость в образце с тремя контактами. Такая конфигурация позволяет исследовать транспортные свойства двух сегментов вискера, один из которых намного длиннее другого. Оказалось, что при воздействии света на образец происходит качественно одинаковое изменение вида ВАХ обоих сегментов. Можно сделать вывод, что контактные явления не дают существенного вклада в фотопроводимость.

В NbS_3 под действием света происходит увеличение E_t [3], так же как в $\text{K}_{0.3}\text{MoO}_3$ [1] и TaS_3 [2]. Интересно, что наиболее сильный эффект наблюдался в районе 40–60 К, как и в TaS_3 . Однако мы не обнаружили кубическую зависимость E_t от σ [4]. Более того, при высоких температурах (78 К и выше) E_t практически перестает изменяться при облучении, в то время как $\delta\sigma$ по-прежнему хорошо измеряется [3]. Это ставит под сомнение применимость модели одномерного пиннинга [2], связывающей изменения σ и E_t .

Для проверки модели [2] был также проведен эксперимент с целью выяснить, как зависит воздействие излучения на σ и E_t от длины волны. Для этого мы сначала выбрали мощности света для двух длин волн (940 и 525 мкм) так, чтобы величина $\delta\sigma$ была одинаковой. Оказалось, что при этом излучение с большей энергией кванта приводит к большему увеличению E_t . Этот результат практически исключает саму возможность масштабирования изменений σ и E_t при облучении, что ставит под вопрос применимость модели [2] для описания фотопроводимости в NbS_3 . Можно сделать вывод, что фотоны оказывают прямое воздействие на величину E_t . По всей видимости, свет может создавать дефекты в ВЗП типа центров ПФ (дислокаций), что приводит к увеличению E_t .

Помимо этого, на NbS_3 при гелиевых температурах наблюдался новый эффект: необратимое уменьшение E_t под действием света. В этом случае предположительно генерация центров ПФ может приводить к облегчению срыва (крипа) ВЗП.

Список литературы

- [1] Ogawa N., Shiraga A., Kondo R. et al. *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 256401 (2001).
- [2] Zaitsev-Zotov S.V., Minakova V.E. *Phys. Rev. Lett.*, **97**, 266404 (2006).
- [3] Зыбцев С.Г., Покровский В.Я., Насретдинова В.Ф., Зайцев-Зотов С.В., Аномальная фотопроводимость низкотемпературной ВЗП в NbS_3 -II — физическая основа методики детектирования слабых сигналов. *Радиотехника и электроника*, **63**, 992 (2018).
- [4] Зайцев-Зотов С.В., Минакова В.Е. *Письма ЖЭТФ*, **79**, 680 (2004).
- [5] Zybtev S.G., Pokrovskii V.Ya., Nasretdinova V.F., Zaitsev-Zotov S.V., Pavlovskiy V.V., Odobesco A.B., Woei Wu Pai, Chu M.-W., Lin Y.G., Zupanič E., van Midden H.J.P., Šturm S., Tchernychova E., Prodan A., Bennett J.C., Mukhamedshin I.R., Chernysheva O.V., Menushenkov A.P., Loginov V.B., Loginov B.A., Titov A.N., and Abdel-Hafiez M., NbS_3 — a unique quasi one-dimensional conductor with three charge density wave transitions. *Phys. Rev. B*, **95**, 035110 (2017).
- [6] Zybtev S.G., Pokrovskii V.Ya., Nasretdinova V.F., Zaitsev-Zotov S.V., Erik Zupanič, van Midden M., Woei Wu Pai, The ultra-high- T_p charge-density wave in the monoclinic phase of NbS_3 . *Journal of Alloys and Compounds*, **854**, 157098 (2021).

Тонкие пленки диэлектрического иридата стронция Sr_2IrO_4

Ю.В. Кислинский^{1*}, К.И. Константиан¹, И.Е. Москаль^{1,2},
А.М. Петржик¹, А.В. Шадрин^{1,3}, Г.А. Овсянников¹

¹ИРЭ им. В.А. Котельников РАН, г. Москва, Россия

²МИРЭА, г. Москва, Россия

³МФТИ, г. Долгопрудный, Россия

*E-mail: yulii@hitech.cplire.ru

Интерес к иридату стронция Sr_2IrO_4 (SIO_4) связан с его необычными свойствами. Предсказывают возможность появления сверхпроводимости в Sr_2IrO_4 при легировании. Электрофизические свойства SIO_4 обусловлены сильной спин-орбитальной связью в иридатах, в которых энергия спин-орбитального взаимодействия достигает 0,4 eV [1].

Тонкие пленки SIO_4 наносились методом лазерной абляции в двух режимах: или при давлении кислорода 0,05 mbar и температурах около 750 °C, или при давлении аргона 0,5 mbar и температуре 780 °C, в обоих случаях на подложки (100) SrTiO_3 (STO) [2]. Для двух пленок на подложках STO зависимости удельного сопротивления от температуры $\rho(T)$ продемонстрированы на рис. 1.

Удельное сопротивление образцов характеризуется энергией активации ΔE_A , которая соответствует ширине запрещенной зоны диэлектрика. Энергию активации мы считали как производную $\Delta E_A = d(\ln \rho)/d(1/T)$, где ρ — удельное сопротивление пленки, а T — температура [3]. Температурная зависимость этой энергии показана на рис. 2. Для пленок SIO_4 на подложках STO энергии активации мало менялись в диапазоне 100–250 К. Величина ΔE_A зависит от режима напыления пленки. При напылении в кислороде ΔE_A была 50–70 mV, а в аргоне — 200–260 mV. Для пленки A1 проведена аппроксимация $\Delta E_A \sim c + bT^{3/4}$ (показана пунктиром на рис. 2). Параметр c , по которому мы оценивали ΔE_A при стремлении температуры к нулю, был равен примерно 10 mV. Это указывает на активационный механизм транспорта носителей заряда в пленках на подложках титаната стронция.

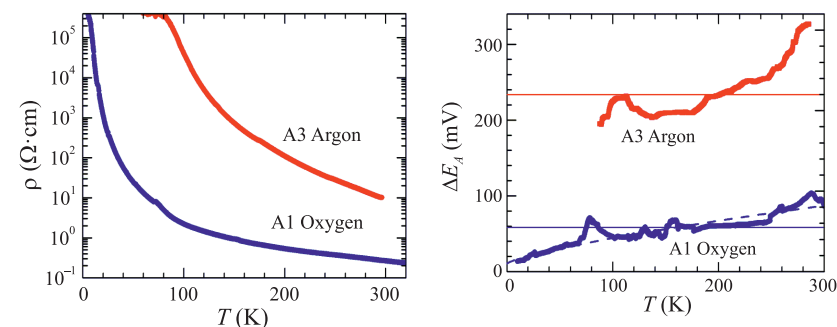


Рис. 1. Зависимости удельных сопротивлений от температуры для пленок SIO_4 : A1 $d = 17$ nm и A3 $d = 34$ nm

Рис. 2. Зависимости энергий активации от температуры для тех же пленок SIO_4 . Прямые линии — оценки энергии активации ΔE_A

Работа выполнена по государственному заданию ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН. Использовалось оборудование УНУ 352529 «Криоинтеграл», (грант МОН, соглашение № 075-15-2021-667). Авторы благодарны А.Е. Пестун за полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] Lu C., Quindeau A., Deniz H. et al. *Appl. Phys. Lett.*, **105**, 082407 (2014).
- [2] Петржик А.М., Cristiani G., Логвенов Г. и др. *Письма в ЖЭТФ*, **43**, 12 (2017).
- [3] Bebenin N.G., Zainullina R.I., Chusheva N.S. *Phys. Rev. B*, **69**, 104434 (2004).

Бозе-конденсация поляритонов в микрорезонаторах, индуцированная магнитным полем

В.П. Кочерешко^{1,*}, P. Savvidis², L. Bessombes², H. Mariette³

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе,
г. Санкт-Петербург, Россия

²Department of Materials Science & Technology, University of Crete,
Heraklion, Greece

³Institut Neel, CNRS, 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 20000. Фотолюминесценция возбуждалась импульсами Ti: Sa-лазера с энергией кванта 1,62 эВ, с длительностью импульса 2 пикосекунды. Энергия возбуждения выбиралась так, чтобы и брэгговские 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 $\sim 0,5$ 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 компонентов хорошо описывалось больцмановским распределением экситонов на зеемановских подуровнях при температуре эксперимента (5 К).

Для самого низкого энергетического уровня латерального квантования поляритонов 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 компонентов оказывалось существенно больцмановским. Степень поляризации ФЛ в этих условиях была близка к 100 %.

Подобное больцмановское распределение можно было получить и при фиксированном оптическом возбуждении в зависимости от магнитного поля. При некотором пороговом значении магнитного поля резкое перераспределение интенсивностей зеемановских компонент также происходило в пользу более низкого энергетического компонента 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 больцмановским.

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 бозе-эйнштейновской конденсации.

Низкоразмерный органический проводник к-BEDT-TTF₂Cu₂(CN)₃: Cu²⁺-примеси и их влияние на электронную структуру

А.В. Кузьмин*, С.С. Хасанов, В.Н. Зверев

Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипяна
Российской академии наук (ИФТТ РАН), г. Черноголовка, Россия

*E-mail: kuzminav@issp.ac.ru

Металлическая проводимость в низкоразмерных органических кристаллах реализуется за счет особой их структуры: слоистой укладки пло-

ских π -донорных молекул [1] с относительно большим перекрытием фронтальных молекулярных орбиталей (МО) соседних молекул, что приводит к образованию энергетических зон электронных состояний. В таких кристаллах донорные слои чередуются со слоями из сильных акцепторов, анионов, способных «забрать» часть электронов из донорного слоя. В результате такой перебалансировки заряда верхняя зона оказывается частично заполненной, в результате может реализоваться металлическое состояние. При этом электроны, локализованные в анионном слое, в проводимости не участвуют, а носителями тока являются электроны донорных слоев. Проводимость такого типа носит квазидвумерный характер, а анизотропия проводимости (соотношение проводимостей вдоль слоев и поперек слоев) составляет 10^3 – 10^4 .

Слабое перекрытие верхних полузаполненных МО молекул в слоях способствует образованию относительно узких (менее 1 эВ) квазидвумерных энергетических зон для электронных состояний в кристалле. Узость зон приводит к тому, что многие из этого класса кристаллов, особенно кристаллы к-типа (катионный слой в проводниках этого типа представлен треугольной подрешеткой димеров BEDT-TTF₂), являются моттовскими диэлектриками. Однако высокая сжимаемость молекулярных кристаллов из-за слабых межмолекулярных взаимодействий способствует тому, что даже умеренные внешние давления переводят эти кристаллы в металлическое состояние за счет усиления перекрытия МО при сжатии и, как следствие, увеличения ширины зоны. Внешнее гидростатическое давление становится, таким образом, эффективным инструментом контроля энергетического спектра кристалла. В целом, P – T -фазовые диаграммы органических проводников к-типа (см. рис. 1) проявляют сложное чередование различных электронных состояний в них: моттовский диэлектрик-антиферромагнетик-металл-сверхпроводник, как результат конкурентной «игры» параметров, контролирующих поведение сильнокоррелированных электронных систем [2]. Более того, кристаллы к-BEDT-TTF₂Cu₂(CN)₃ дают уникальный пример реализации состояния спиновой жидкости, переходящей под давлением в сверхпроводящее состояние [3]. В этом случае под давлением в исходно треугольной спиновой

вой решетке возникает анизотропия, снимающая фрустрацию в спиновой подсистеме.

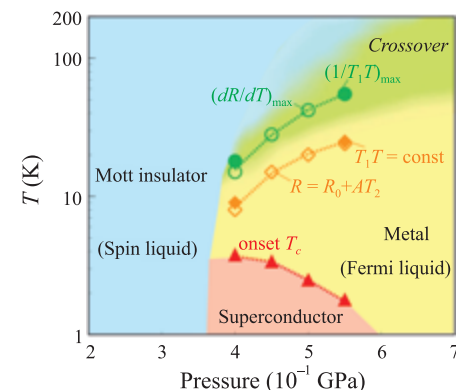


Рис. 1. Фазовая диаграмма к-BEDT-TTF₂Cu₂(CN)₃ [3]

В целом же в кристаллах органических проводников могут иметься и другие факторы, контролирующие их электронные состояния. В этой работе рассматривается эффект присутствия ионов Cu²⁺ в акцепторном, анионном Cu₂(CN)₃¹⁻, слое структуры. В идеальной структуре стандартные ионы Cu¹⁺ приводят к полузаполненности верхней зоны проводимости. Присутствие ионов Cu²⁺ меняет степень заполнения верхних зон, что оказывает влияние на параметры расщепления электронных и дырочных карманов поверхности Ферми. В работе был проведен детальный анализ реальной структуры кристаллов на предмет наличия примесных ионов двухвалентной меди, уточнены параметры атомно-кристаллической структуры при низких температурах. Были проведены квантовохимические расчеты в рамках теории DFT и проанализированы особенности поверхности Ферми, в частности, было дано объяснение аномального поведения магнетосопротивления в этих кристаллах.

Список литературы

- [1] Ishiguro T., Yamaji K., Saito G. Organic Superconductors, 2nd ed., Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg: New York, p 522 (1998).

- [2] Powell B.J. and McKenzie Ross H. Strong electronic correlations in superconducting organic charge transfer salts. *J. Phys.: Condens. Matter*, **18**, R827–R866 (2006).
- [3] Kurosaki Y., Shimizu Y., Miyagawa K., Kanoda K., and Saito G., Mott transition from a spin liquid to a Fermi liquid in the spin-frustrated organic conductor κ -ET₂Cu₂(CN)₃. *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 177001 (2005).

Нейтральные возбуждения в лафлиновской жидкости

Л.В. Кулик, А.С. Журавлев

Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия

Двумерные электронные системы в квантующем магнитном поле представляют исключительный интерес с точки зрения вовлечения квазичастиц с небозевской и нефермиевской статистикой (энионной) в область прикладных физических задач. Дробные состояния ДКЭХ являются единственными на сегодняшний день экспериментально реализованными кандидатами на роль системы квазичастиц с энионной статистикой [1, 2]. Для выяснения статистических и термодинамических свойств энионных систем, а также пригодности энионов для решения технологических задач созданы макроскопические неравновесные ансамбли нейтральных возбуждений со спином 1 в ДКЭХ 1/3 с помощью методики резонансной фотолюминесценции. Суть методики состояла в том, что при оптическом возбуждении электронной системы фотон с определенной энергией поглощается в квантовой яме, в результате чего электрон из валентной зоны переходит на верхний спиновой подуровень нулевого уровня Ландау зоны проводимости. Фотовозбужденная дырка из-за сильного спин-орбитального взаимодействия в валентной зоне релаксирует на нижайший спиновой подуровень подзоны тяжелых дырок за время около 100 пс. Поскольку в электронной системе при низкой температуре равновесно заполнен только нижайший спиновой подуровень,

рекомбинация фотовозбужденной дырки с равновесным электроном приводит к тому, что в электронной системе формируется нейтральное возбуждение со спином 1, состоящее из фотовозбужденного электрона на верхнем спиновом подуровне Ландау и дырки на нижнем. Во всех оптических процессах продольный импульс фотона выбирался равным нулю, поэтому в электронной системе возможны два типа нейтральных возбуждений с единичным спином — спиновой экситон и спиновой «магнито-гравитон» [3], из них долгоживущим возбуждением является только спиновой «магнито-гравитон». Оказалось, что неравновесные ансамбли спиновых «магнито-гравитонов» имеют столь длинные времена релаксации в основное состояние (более 10 секунд), что их можно рассматривать как новые квазиравновесные состояния энионной материи [4]. Разработана экспериментальная методика измерения средних чисел заполнения спиновых «магнито-гравитонов». Показано, что эти нейтральные возбуждения являются «хорошими» бозонами, а средние числа заполнений отдельных квантовых состояний «магнито-гравитонами» при температуре 0,5 К превышают 10. Исследованы низкотемпературные свойства (до 0,1 К) спиновых «магнито-гравитонов».

Список литературы

- [1] Bartolomei H. et al. Fractional statistics in anyon collisions. *Science*, **368**, 173 (2020).
- [2] Nakamura J., Liang S., Gardner G.C., and Manfra M.J. Direct observation of anyonic braiding statistics. *Nature Physics*, **16**, 931 (2020).
- [3] Haldane F.D.M., Geometrical description of the fractional quantum hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, **107**, 116801 (2011).
- [4] Kulik L.V., Zhuravlev A.S., Musina L.I., Belozеров E.I., Vankov A.B., Volkov O.V., Zagitova A.A., Kukushkin I.V. & Umansky V.Y., Laughlin anyon complexes with Bose properties. *Nature Communications*, **12**, Article number: 6477 (2021).

Экситоны в деформационном псевдомагнитном поле в графене: явления КЭХ

Ю.Е. Лозовик

Рассмотрены прямые и пространственно не прямые (псевдомагнето) экситоны, образованные электроном и дыркой в листах графена в индуцированном стрейном калибровочном псевдомагнитном поле [1, 2]. Стрейн в графене действует на электроны как псевдомагнитное поле [3].

Оказывается, поскольку псевдомагнитное поле одинаково действует на электроны и дырки, то свойства псевдомагнитоэкситонов, их коллективные эффекты и фазовая диаграмма кардинально отличаются от свойств магнитоэкситонов в реальном магнитном поле [1,2].

В реальном магнитном поле синглетные экситоны в обеих долинах имеют одинаковую непрерывную зависимость от магнитного импульса, интеграла движения в магнитных полях. Сохранение связано с инвариантностью системы относительно трансляционной и калибровочной инвариантности [4]. В результате двумерный магнитоэкситонный спектр представляет собой набор разрешенных энергетических зон, разделенных расстояниями между уровнями Ландау [5]. Благодаря этому синглетные внутридолинные экситоны обладают такими же коллективными свойствами и образуют бозе-конденсат при низких температурах (идеальный для пространственно прямых экситонов в однослойной системе, см. [6, 7] и цит. лит.) .

Вычислены волновые функции и энергетический спектр прямых в монослое и пространственно не прямых псевдомагнитоэкситонов в двойном слое графена.

Из-за киральности графена фотоны с разной круговой поляризацией поглощаются в двух разных долинах. Фотон с линейной поляризацией представляет собой суперпозицию двух противоположных круговых поляризаций. Поэтому после поглощения линейно поляризованного фотона электрон и дырка появляются в обеих долинах.

После релаксации образуются два типа псевдомагнитных экситонов — «светлый» внутридолинный с электронами и дырками из одной долины и «темный» междолинный с электронами и дырками из разных долин (их рекомбинация без участия фононов запрещена из-за большого расстояния между долинами в импульсном пространстве).

Можно показать, что свойства внутридолинных псевдомагнитных экситонов (с коротким временем жизни) аналогичны свойствам магнито-экситонов в реальных магнитных полях [5–7]. Но уцелевшие междолин-ные экситоны из-за одинакового действия стрейна на электрон и дырку имеют разный интеграл движения в псевдомагнитном поле и, как следствие, разные свойства[1].

Нами получены волновые функции и энергетический спектр прямых в монослое и не прямых псевдомагнитоэкситонов в двойном слое графена. Эффекты КЭХ и ДКЭХ, а также индуцированная псевдомагнитным полем кристаллизация [2] для прямых и не прямых экситонов предсказаны в монослоях и двойных слоях графена под действием индуцированного стрейном калибровочного псевдомагнитного поля.

Выявлены аналогии с эффектами КЭХ и ДКЭХ для электронов в реальных магнитных полях [8].

Список литературы

- [1] Berman O.L., Kezerashvili R.Y., Lozovik Yu.E., Ziegler K.G., Strain-induced quantum Hall phenomena of excitons in graphene. *Scientific reports*, **12**(1), 1–12 (2022).
- [2] Lozovik Yu.E. (to be publ.)
- [3] Vozmediano M.A.H., Katsnelson M.I., Guinea F., Gauge fields in graphene, *Phys. Rep.*, **496**, 109–148 (2010).
- [4] Lozovik Yu.E., Ruvinsky A.M., Magnetoexcitons in coupled quantum wells, *Phys. Lett. A*, **227**, 271 (1997).
- [5] Lerner I.V., Lozovik Yu.E., Two-dimensional electron-hole system in a strong magnetic field as an almost ideal exciton gas, *Sov. Phys. JETP*, **53**, 763 (1981).
- [6] Lerner I.V., Lozovik Yu.E., Two-dimensional electron-hole system in a strong magnetic field as an almost ideal exciton gas, *Sov. Phys. JETP*, **53**, 763 (1981).

- [7] Dzyubenko A.B., Lozovik Yu.E., Symmetry of Hamiltonians of quantum two-component systems: condensate of composite particles as an exact eigenstate, *J. Phys. A*, **24**, 415-424 (1991).
- [8] von Klitzing K., Chakraborty T., Kim P. et al. 40 years of the quantum Hall effect. *Nat. Rev. Phys.*, **2**, 397-401 (2020).

Переход «металл-диэлектрик», стимулированный одноосным растяжением кристаллов топологически нетривиального квазиодномерного проводника TaSe₃

В.Е. Минакова, С.В. Зайцев-Зотов

Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН

TaSe₃ — единственный квазиодномерный проводник из класса трихалькогенидов переходных металлов, в котором не происходит пайерлсовский переход при понижении температуры T . Он остается металлом вплоть до температуры $T_C \approx 2,1$ К, при которой переходит в сверхпроводящее состояние [1,2]. По этой причине во времена интенсивного исследования свойств пайерлсовских проводников TaSe₃ был малоинтересен и оставался слабо изученным соединением. Однако в последнее время к TaSe₃ возник повышенный научный интерес как к материалу с топологически нетривиальной зонной структурой. Особенностью TaSe₃ является существенная зависимость его свойств от величины одноосной деформации [3]. В частности, в этом материале с помощью фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением наблюдался переход от топологического сверхпроводника к топологически тривиальному изолятору при растяжении $> 1\%$ [4].

В данной работе представлены результаты исследования влияния одноосного растяжения на характер проводимости высококачественных кристаллов TaSe₃ ($RRR = R_{300}/R_{4,2} \approx 100$). Оказалось, что эти кристаллы характеризуются не только чрезвычайно высокой тензочувствительностью, но и, кроме того, претерпевают кардинальное изменение транспортных свойств при деформациях.

Рис. 1 демонстрирует абсолютное изменение сопротивления образца при растяжении ΔR , нормированное на начальное сопротивление недеформированного образца $R_0(T)$, при увеличении относительной деформации образца $\varepsilon = \Delta L/L_0$ при комнатной температуре. Видно, что все исследованные кристаллы выдерживают деформацию с абсолютным увеличением длины ΔL до $1,5 \div 2\%$ от первоначальной длины недеформированного образца L_0 . При этом их сопротивление при комнатной температуре может увеличиваться до 8 раз, а коэффициент тензочувствительности $K_f = (\Delta R/R_0)/\varepsilon$ может достигать рекордно высоких значений $300 \div 350$. Согласно данным работы [3], в которой подобные исследования проводились при ряде фиксированных температур $T = 293$ К, 100 К, 77 К, 50 К и 22 К, но при значительно меньших деформациях ($\varepsilon \approx 1\%$), величина $\Delta R/R_0(T)$ при понижении температуры может увеличиваться более чем на 3,5 порядка: от $1 \div 1,6$ при комнатной температуре до $160 \div 9500$ при $T = 22$ К.

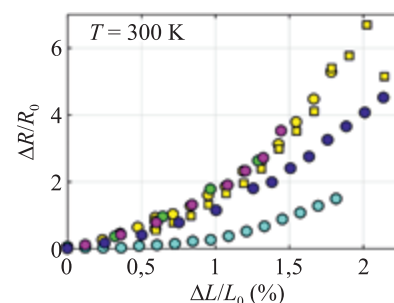


Рис. 1. Взаимосвязь между относительным изменением сопротивления образца при растяжении, $\Delta R/R_0$, и относительным изменением длины образца, $\Delta L/L_0$. Разным образцам соответствуют различные цвета значков

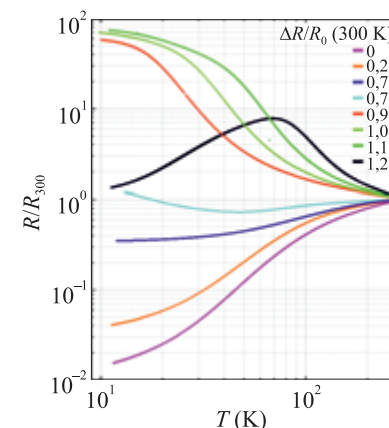


Рис. 2. Температурные зависимости сопротивления, нормированного на комнатное значение, R/R_{300} , при различных деформациях образцов. Разным образцам соответствуют различные цвета кривых. Две зеленые кривые измерены на одном образце при разной деформации

Высокая, зависящая от температуры тензочувствительность TaSe₃ связана с сильной зависимостью зонной структуры данного соединения от деформации образца [4], что в свою очередь приводит к кардинальному изменению вида температурных зависимостей $R(T)$ с ростом ε . А именно: металлический характер проводимости (нижняя кривая на рис. 2) сменяется по мере увеличения растяжения диэлектрической зависимостью (верхние красная, зеленые и черная кривые на рис. 2). Отметим, что при деформациях меньше критической, $\varepsilon_c \approx 0,6\%$ ($\Delta R/R_0(300\text{ K}) \approx 0,7$, см. рис. 1), зависимости $R(T)$ остаются металлическими, при этом увеличивается остаточное сопротивление, и, соответственно, уменьшается величина RRR . Величина ε_c согласуется с величиной критической деформации из [3]. При $0,7 \lesssim \Delta R/R_0(300\text{ K}) \lesssim 1,1$ зависимости $R(T)$ демонстрируют диэлектрический характер без ярко выраженных максимумов вплоть до самых низких температур. Вид этих кривых качественно согласуется с кривыми из [4], исследованными при деформациях $\varepsilon \approx 1\%$. Дальнейшее увеличение деформации позволило нам наблюдать четкий пик на кривой $R(T)$ при $T \approx 70\text{ K}$ (верхняя черная кривая). Подобные не-монотонные зависимости $R(T)$, но с двумя максимумами, наблюдаются в NbSe₃ — ближайшем родственнике TaSe₃ по семейству трихалькогенидов переходных металлов [5, 6]. При этом каждый резкий рост сопротивления при понижении температуры соответствует одному из двух пайерлсовских переходов. Но, в отличие от TaSe₃, пайерлсовские переходы в NbSe₃ происходят в недеформированных кристаллах. Отметим также, что ранее в чрезвычайно тонких ($\sim 300\text{ нм}$) мезопроволоках TaSe₃ К на кривых $R(T)$ наблюдали пайерлсовский переход при $T_p = 65$, что было подтверждено результатами изучения комбинационного рассеяния света и магнитной восприимчивости [7].

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект 21-72-20114).

Список литературы

- [1] Tsutsumi K., Takagaki T., Yamamoto M., Shiozaki Y., Ido M., Sambongi T., Yamaya K., and Abe Y. *Phys. Rev. Lett.*, **39**, 1675 (1977).

- [2] Sambongi T., Yamamoto M., Tsutsumi K., Shiozaki Y., Yamaya K., and Abe Y. *J. Phys. Soc. Japan*, **42**, 1421 (1977).
 [3] Tritt T.M., Stillwell E.P., and Skove M.J. *Phys. Rev. B*, **34**, 6799 (1986).
 [4] Lin Ch., Ochi M., Noguchi R. et al. *Nature*, **20**, 1093 (2021).
 [5] Haen P., Monceau P., Tisser B., Waysand B., Meerschaut A., Molinie P. and Rouxel J. *Proceedings Fourteenth International Conference on Low Temperature Physics* (Otaniemi, Finland 1975), ed M. Krusius and Vuorio, North-Holland, Vol. 5, p. 445 (1975).
 [6] Chaussy J., Haen P., Lasjaunias J.C., Monceau P., Waysand G., Waintal A., Meerschaut A., Molinie P., and Rouxel J., *Solid State Commun.*, **20**, 759 (1976).
 [7] Yang J., Wang Y.Q., Zhang R.R., Ma L., Liu W., Qu Z., Zhang L., Zhang S.L., Tong W., Zhang J., Pi L., Zhu W.K., and Zhang C.J. *Appl. Phys. Lett.*, **115**, 033102 (2019).

Second harmonics of magnetic quantum oscillations in layered metals

T.I. Mogilyuk^{1,*}, P.D. Grigoriev^{2,3}

¹*NRC Kurchatov Institute, Moscow, Russia*

²*Landau Institute for Theoretical Physics, Moscow Region, Chernogolovka, Russia*

³*National University of Science and Technology MISiS, Moscow, Russia*

*E-mail: 5taras@mail.ru

We find expressions for the second harmonics of magnetic quantum oscillations of interlayer magnetoconductivity and of magnetization in quasi-two-dimensional metals. The expressions obtained are useful, since in some experiments with quasi-two-dimensional metals, the second harmonic of magnetic quantum oscillations is also observed. We analyze the effect of magnetic oscillations of the real part of electron self-energy part $\text{Re}\Sigma$ on the shape of the quantum magnetization oscillations and on the magnetoresistance of quasi-two-dimensional conductors. In the limit of strong quantum oscillations, which is possible only in two-dimensional or quasi-two-dimensional metals,

the real part of electron self-energy function $\text{Re}\Sigma$ also oscillates strongly. Usually it is neglected, taking into account only its imaginary part $\text{Im}\Sigma$, since it is assumed that $\text{Re}\Sigma$ only shifts the chemical potential and does not affect the observed properties. However, $\text{Re}\Sigma$ cannot be neglected if it also oscillates. As our calculations show, $\text{Re}\Sigma$ oscillations affect the observed properties, since they shift the chemical potential toward the nearest Landau level even on average over the period of quantum oscillations.

Oscillations of $\text{Re}\Sigma$ affect the shape of the quantum magnetization oscillations [1, 2], which is used to experimentally determine the regime of quantum oscillations: constant chemical potential or a constant electron density [3, 4]. Also, these oscillations change the monotonic part in a strong field by a coefficient of the order of 2 [5, 6], the angular dependence and the shape of the quantum oscillations of the magnetoresistance [7, 8]. Therefore, despite attempts in organic metals to achieve a constant electron density regime, the shape of the magnetization oscillations remained consistent with the constant chemical potential [3, 4]. This question is not only of great practical importance for the analysis of numerous experiments, but also of substantial interest for the development of the theory of magnetic quantum oscillations.

T. I. M. acknowledges the RFBR grants 19-02-01000, 21-52-12027.

References

- [1] Grigoriev P.D. *JETP*, **92**, 1090 (2001).
- [2] Champel T. and Mineev V.P. *Phys. Rev. B*, **66**, 195111 (2002).
- [3] Wosnitzer J., *Fermi Surfaces of Low-Dimensional Organic Metals and Superconductors*. Springer-Verlag, Berlin, 1996.
- [4] Wieggers S.A.J., Specht M., Lévy L.P., Simmons M.Y., Ritchie D.A., Cavanaugh A., Etienne B., Martinez G., and Wyder P. *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 3238 (1997).
- [5] Grigoriev A.D., Grigoriev P.D. *Low Temp. Phys.*, **40**, 367 (2014).
- [6] Grigoriev P.D., Mogilyuk T.I. *Phys. Rev. B*, **90**, 115138 (2014).
- [7] Grigoriev P.D., Mogilyuk T.I. *Phys. Rev. B*, **95**, 195130 (2017).
- [8] Grigoriev P.D., Mogilyuk T.I. *J. Phys.: Conf. Ser.*, **1038**, 012123 (2018).

Влияние ВЧ механических вибраций на проводимость волны зарядовой плотности

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

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

Доклад посвящен исследованию транспортных свойств нитевидных кристаллов (вискеров) квазиодномерных проводников (КвОП) с волной зарядовой плотности (ВЗП) при воздействии на них высокочастотных механических колебаний. ВЗП — особое коллективное состояние электронов (электронный кристалл), которое можно рассматривать как упругую среду, способную деформироваться и двигаться (скользить) при приложении электрического поля. Ранее на вискерах КвОП ромбического TaS_3 наблюдалась значительная модуляция тока ВЗП при одноосной [1] и крутильной [2] деформации. Также было показано, что в TaS_3 при приложении электрического поля выше порогового возникает огромная механическая деформация [2]. Эти результаты говорят о сильном электромеханическом взаимодействии между ВЗП и кристаллической решеткой в данном материале. Данное взаимодействие лежит в основе методики самодетектирования резонансных колебаний подвешенных вискером TaS_3 [3], которые выступают при этом в роли актюаторов и сенсоров. При этом техника гетеродинамирования [3] позволяет детектировать механические резонансы, в которых происходит резкое увеличение модуляции проводимости образцов.

Недавно данная методика была дополнена возможностями регулирования натяжения образцов, а также возбуждения в них колебаний с помощью пьезоактюаторов из пьезокерамики ЦТС-19. Керамика поляризована на сдвиговую деформацию актюаторов, между которыми подвешен образец, что позволяет создавать в нём одноосное растяжение. В результате мы получили уникальную комплексную методику для исследования механических колебаний вискером КвОП, в том числе с относительно слабым электромеханическим взаимодействием ВЗП и решетки. С помощью данной методики были проведены различные типы ис-

следований воздействия механических колебаний частотой до 60 МГц на транспортные свойства вискеро́в различных КвОП: ромбического TaS_3 , NbS_3 I и II фазы, а также $(\text{TaSe}_4)_2\text{I}$. Были получены следующие результаты.

– **Достигнута синхронизация скольжения ВЗП механическими колебаниями, возбужденными в подвешенных вискерах КвОП TaS_3 [4].** При подаче на пьезоактюаторы ВЧ-напряжения в диапазоне частот 0,01–5 МГц на ВАХ наблюдались особенности, аналогичные «электрическим» ступенькам Шапиро. Амплитуда этих «механических» ступенек зависела от подаваемой частоты и достигала максимума на частотах механических резонансов образца. По нашим оценкам, наблюдение «механических» ступенек Шапиро свидетельствует об аномально сильной модуляции тока ВЗП в режиме синхронизации, ~100 %.

– **Продемонстрирована возможность исследования модуляции тока ВЗП с использованием методики ВЧ синхронного детектирования.** На вискерах TaS_3 исследована частотная зависимость переменного тока через образец при подаче на пьезоактюаторы переменного ВЧ-напряжения. При этом к образцу прикладывалось напряжение смещения выше порогового. Обнаружено увеличение модуляции тока на частотах, соответствующих механическим резонансам образца на частотах до 1 МГц. При изгибном резонансе образца на частоте 74 кГц была произведена оценка относительной модуляции тока $\Delta I/I = 3 \cdot 10^{-3}$, что соответствует сделанным ранее предположениям [5].

– **Произведен поиск резонансных колебаний вискеро́в NbS_3 при комнатной температуре.** Были измерены частотные зависимости модуляции проводимости образцов в диапазоне частот от 0,1 МГц до 60 МГц. С использованием методики гетеродинирования на частотной зависимости тока смещения обнаружен ряд особенностей, в том числе на частотах около 9 и 18 МГц. Эти резонансы соответствуют звуковым стоячим волнам, ранее не наблюдавшимся в NbS_3 . Результат подтверждают численные оценки скорости звука. Наблюдалось также уменьшение резонансной частоты при растяжении образца. Стоит отметить, что в данном материале пока не удалось наблюдать механические колебания без исполь-

зования внешних актюаторов, что, по всей видимости, свидетельствует о слабом электромеханическом взаимодействии ВЗП и кристаллической решетки.

– **Произведён поиск резонансных колебаний образцов КвОП $(\text{TaSe}_4)_2\text{I}$.** При помощи методики гетеродинирования были измерены частотные характеристики тока смещения в диапазоне от 0,1–1 МГц при температуре 160 К. Измерения проводились как с использованием пьезоактюаторов, так и без них. В обоих случаях наблюдался резонансный пик на частоте 125 кГц, который можно отнести к изгибным колебаниям образца. При этом амплитуда пика, измеренного при использовании пьезоактюаторов, была на два порядка больше, чем без них. Результат подтверждает возможность деформирования $(\text{TaSe}_4)_2\text{I}$ с помощью электрического поля [2] и открывает новые возможности для изучения электромеханических свойств данного материала.

Таким образом, модуляция проводимости ВЗП механическими колебаниями может быть использована как для изучения электромеханических свойств КвОП, так и для создания элементов НЭМС на основе этих материалов.

Работа выполнена при поддержке РФФ, проект № 22-19-00783.

Список литературы

- [1] Das K., Chung M., Skove M.J., and Tessema G. X. *Phys. Rev. B*, **52**, 7915 (1995).
- [2] Покровский В.Я. и др. *УФН*, **183**, 33 (2013).
- [3] Pokrovskii V.Ya., Nikitin M.V. and Zybtev S.G., *Physica B*, **460**, 39–44 (2015).
- [4] Nikitin M.V., Zybtev S.G., Pokrovskii V.Ya., and Loginov B.A. *Appl. Phys. Lett.*, **118**, 223105 (2021).
- [5] Никитин М.В., Покровский В.Я., Зыбцев С.Г., Жихарев А.М., Лега П.В., *Радиотехника и электроника*, **63**, № 3, 248–256 (2018).

Магнитные свойства широких уровней Ландау в окрестности седловой точки двумерной квадратной решетки

А.В. Николаев¹, М.Е. Журавлев²

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

²Санкт-Петербургский государственный университет,
г. Санкт-Петербург, Россия

В данной работе на основе численного точного решения задачи для 2-мерной квадратной решетки с одним электроном (дыркой) на узел в сравнительно слабом рациональном внешнем магнитном поле изучаются ее магнитные характеристики, учитывая уширение уровней Ландау. В отсутствие внешнего магнитного поля уровень Ферми данной системы попадает на пик седловой точки (особенности Ван Хофа), где соответствующая плотность состояний на уровне Ферми формально бесконечная, $N(E_F) \rightarrow +\infty$. В соответствии с зонной теорией это должно приводить к расходящейся парамагнитной восприимчивости и электронной теплоемкости при нулевой температуре. На основе решения данной задачи и учитывая электронную спиновую поляризацию, мы воспроизводим температурную зависимость для индуцированного магнитного момента (пропорционального магнитной восприимчивости) и электронного вклада в теплоемкость. Обе зависимости оказались конечными и нелинейными, отражают сложную зонную структуру магнитных уровней Ландау в окрестности уровня Ферми. При низких температурах значения индуцированного магнитного момента, магнитной восприимчивости и удельной теплоемкости осциллируют в зависимости от величины приложенного магнитного поля. Мы также показываем, что (1) спектр уровня Ландау у седловой точки является принципиально непрерывным, (2) полностью заполненная электронная зона не вносит вклад в намагниченность и удельную теплоемкость.

Список литературы

- [1] Nikolaev A.V., *Phys. Rev. B*, **104**, 035419 (2021); *Phys. Rev. B*, **105**, 039902 (2022).

Микроструктура и магнетотранспорт пленок Cd_3As_2 с различным уровнем кристалличности

Л.Н. Овешников¹, А.И. Риль², Д.Р. Стрельцов³, И.А. Каратеев³,
А.Б. Давыдов¹, А.Б. Мехия¹, Б.А. Аронзон¹

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

²Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН,
г. Москва, Россия

³Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
г. Москва, Россия

Cd_3As_2 относится к классу дираковских полуметаллов (ДПМ), характеризующихся безщелевым линейным спектром киральных состояний в объеме. В последние годы значительные усилия были приложены для исследования тонких пленок Cd_3As_2 . В частности, на базе таких пленок было реализовано состояние квантового эффекта Холла [1], критерием для возникновения которого послужило наличие туннельной связи между интерфейсами пленки, было обнаружено возникновение сверхпроводимости при сверхнизких температурах [2], а также исследовалось влияние различных примесей, в том числе магнитных [3]. При этом подавляющая часть исследованных пленок была получена с помощью эпитаксиальных методик. Однако в ранних работах активно исследовались пленки, полученные более простыми методами физического осаждения, которые оказываются более пригодными для производственного масштабирования. В частности, было достаточно подробно изучено влияние условий осаждения на кристалличность таких пленок [4]. Однако в данных работах отмечалась аномалия: в некоторых аморфных пленках наблюдались осцилляции Шубникова – де Гааза [5], что в общем случае должно быть невозможно в системе с отсутствием дальнего кристаллического порядка. Более того, из теории следует, что состояние ДПМ является следствием определенных симметрий кристаллической решетки, однако никаких исследований устойчивости данного состояния к сильному беспорядку не представлено в современной литературе.

В рамках настоящей работы были исследованы пленки, полученные в условиях формирования аморфного слоя Cd_3As_2 [4]. Тем не менее удалось получить и кристаллические пленки при близких условиях. Подробно исследованы структура и морфология данных пленок. В частности, отмечено, что переход от рентгено-аморфной структуры к кристаллической сопровождается возникновением двухуровневого рельефа поверхности, содержащим крупные «поверхностные» зерна. Существенным обстоятельством оказывается отсутствие кардинальных различий в сопротивлениях исследуемых пленок. Тем не менее в низкотемпературном магнетотранспорте поведение пленок заметно различается. Так, в аморфной пленке наблюдается слабое отрицательное магнетосопротивление, которое может быть связано с эффектом слабой локализации в сильно разупорядоченной системе. В кристаллических пленках наблюдается характерный вклад антилокализации, являющийся одной из ключевых сигнатур состояния ДПМ. Таким образом, полученные результаты указывают на то, что переход от аморфной структуры к кристаллической идет через промежуточное паракристаллическое состояние, что может объяснять наличие квантовых осцилляций в таких системах. С другой стороны, наблюдение эффекта антилокализации свидетельствует о наличии когерентного состояния ДПМ в достаточно крупных областях исследуемых пленок. При этом средний размер кристаллита в исследуемых кристаллических пленках составляет около 20–40 нм, что можно использовать в качестве грубой оценки минимального масштаба кристаллического порядка, необходимого для формирования фазы ДПМ.

Работа выполнена при поддержке РФФ, грант № 21-12-00254 (<https://rscf.ru/project/21-12-00254/>).

Список литературы

- [1] Schumann T. et al. *Phys. Rev. Lett.*, **120**, 016801 (2018).
- [2] Oveshnikov L.N. et al. *Scientific Reports*, **10**, 4601 (2020).
- [3] Yuan X., et al. *Nano Letters*, **17**, 2211–2219 (2017).
- [4] Zdanowicz L., et al. *Thin Solid Films*, **29**, 177–183 (1975).
- [5] W. Zdanowicz, et al. *Thin Solid Films*, **81**, 101–110 (1981).

Синхронизация скольжения волн зарядовой плотности электрическими и механическими колебаниями

В.Я. Покровский¹, С.Г. Зыбцев¹, М.В. Никитин¹,
С.А. Никонов¹, Б.А. Логинов²

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

²НИУ МИЭТ, г. Зеленоград, Россия

Скольжение волны зарядовой плотности (ВЗП) под действием электрического напряжения V_{dc} происходит в периодическом потенциале пиннинга (ППП), период которого совпадает с периодом ВЗП λ . Это приводит к неравномерности движения ВЗП, в частности к генерации узкополосного ВЧ-шума, основная гармоника которого (фундаментальная частота), f_b , равна v/λ , или $I_{CDW}/2en$, где v — скорость скольжения ВЗП, I_{CDW} — ток ВЗП, n — число цепочек с ВЗП. При воздействии на образец электрического ВЧ-напряжения V_{rf} с частотой f на ВАХ возникают особенности, т. н. ступеньки Шапиро (СШ), связанные с синхронизацией скольжения ВЗП. СШ наблюдаются при токе ВЗП, при котором f_f или одна из ее гармоник или субгармоник совпадает с f . Важный для понимания природы синхронизации результат получен в [1], где показано, что синхронизацию можно описать как периодические колебания частицы в ППП. Амплитуда этих колебаний должна быть сравнимой с λ , и для возбуждения таких колебаний необходимо приложить достаточное высокое напряжение V_{rf} , сравнимое с постоянным напряжением на образце, V_{dc} . В результате модуляции тока ВЗП, δI_{CDW} , оказывается порядка I_{CDW} .

Другим недавним результатом стало наблюдение особенностей на ВАХ под воздействием периодической деформации ϵ [2]. Особенности также появляются при токах ВЗП, при которых f_f совпадает с частотой механической деформации f_m и, очевидно, связаны с синхронизацией скольжения ВЗП механическими колебаниями. Удивительно, что для возникновения «механических» СШ достаточно амплитуды деформации образца, $\delta\epsilon$, порядка 10^{-5} или даже меньше. При таких значениях $\delta\epsilon$ в от-

существование синхронизации наблюдается относительно слабая модуляция тока ВЗП, $\delta I_{CDW}/I_{CDW} \lesssim 10^{-4}$ [2], чего явно не достаточно для возникновения СШ. В докладе будет показано, что при $f_i = f_m$ модуляция тока ВЗП может возрасти до значений достаточных для появления СШ.

«Механические» СШ наблюдались на вискерах TaS₃, в которых наблюдается сильное взаимодействие «ВЗП–решетка». Для определенности ниже будем рассматривать данное соединение и считать, что ϵ — продольная деформация. Для начала заметим, что заметная модуляция тока механическими колебаниями наблюдается лишь в полях выше порогового, E_t , то есть модулируется только I_{CDW} . При этом в области малых ϵ (<0,1 %) может наблюдаться как рост, так и снижение E_t в зависимости от ϵ [3]. Поэтому можно предположить, что при малых $\delta\epsilon$ модуляция связана в основном со случайными изменениями конфигурации ВЗП в ППП, а не с систематической зависимостью E_t (и I_{CDW} ¹) от ϵ . Перестройка конфигурации ВЗП объясняется изменением ее периода относительно периода решетки c [4]. Для TaS₃ известно, что $d \ln(\lambda/c)/d\epsilon \approx -0,25$, то есть, при продольном растяжении TaS₃ рост λ отстает от роста периода решетки c на 25 % [4]. Если взять амплитуду модуляции $\delta\epsilon \sim 10^{-5}$ [2], получаем $\delta \ln(\lambda/c) \sim 0,25 \cdot 10^{-5}$.

Зависимость E_t от λ/c исследована для образцов нанометрового размера в работе [5], где наблюдались мезоскопические осцилляции $E_t(T)$. Эти осцилляции обусловлены температурной зависимостью λ/c . В пределе 0-мерного пиннинга, то есть когда размеры образца во всех трех направлениях меньше соответствующих длин когерентности ВЗП, амплитуда осцилляций $\delta E_t/E_t$ достигает 0,15. Такая модуляция E_t ожидается при величине $\delta\epsilon \sim \delta\epsilon_0$, где $\delta\epsilon_0$ — удлинение, при котором происходит существенное изменение конфигурации ВЗП в ППП, то есть на длине когерентности появляется или исчезает 1 период ВЗП.

В объемном образце величина $\delta E_t/E_t$ меньше в \sqrt{N} раз, где N — отношение объема образца к объему когерентности. Объем когерентности

¹ Для простоты будем считать, что относительное изменение I_{CDW} равно относительному изменению E_t .

можно оценить как произведение длин когерентности вдоль трех осей: $10 \mu\text{m} \times 0,1 \mu\text{m} \times 0,1 \mu\text{m} = 0,1 \mu\text{m}^3$. Объем образца, исследованного в [2], — около $650 \mu\text{m}^3$. Значит, величину мезоскопических осцилляций E_t (и $\delta I_{CDW}/I_{CDW}$) можно оценить величиной $2 \cdot 10^{-3}$.

Иная ситуация будет в режиме «механической» СШ. Поскольку $\delta\epsilon \sim \delta\epsilon_0$ приводит к существенному сдвигу ВЗП относительно ППП, воздействие колебаний с амплитудой $\delta\epsilon$ эквивалентно возбуждению осцилляций ВЗП в ППП, сравнимых по амплитуде с λ . Этим можно объяснить тот факт, что в условиях синхронизации $\delta I_{CDW}/I_{CDW}$ может на 3 порядка превышать модуляцию тока ВЗП в обычных условиях и приводить к появлению «механических» СШ. Наша оценка показала, что амплитуды одноосной деформации $\delta\epsilon \sim 10^{-5}$ [2], возникающей, скажем, при изгибных колебаниях, достаточно для существенной перестройки конфигурации ВЗП относительно ППП. Такие колебания могут объяснить наблюдающуюся в [2] модуляцию тока ВЗП $\delta I_{CDW}/I_{CDW} \sim 10^{-4}$ и появление заметных СШ.

Итак, синхронизацию скольжения ВЗП механическими колебаниями малой амплитуды можно объяснить когерентностью скольжения разных доменов ВЗП в ППП. При этом возникает модуляция тока ВЗП $\delta I_{CDW}/I_{CDW} \sim 1$. В отсутствие же синхронизации модуляция I_{CDW} сводится к мезоскопическим осцилляциям E_t . Поскольку в исследованных образцах число доменов (объемов когерентности) порядка 10^4 , и вклад доменов в изменение E_t имеет случайный знак, величина $\delta I_{CDW}/I_{CDW}$ оказывается на 2–3 порядка ниже. Заметим, что мезоскопическая природа тензорезистивного отклика образцов в режиме скольжения ВЗП требует дальнейшей экспериментальной проверки.

Работа была поддержана РФФ, проект 22-42-09018.

Список литературы

- [1] Zybtev S.G., Nikonov S.A., Pokrovskii V.Ya., Pavlovskiy V.V., and Starešinić D. Step-by-step advancement of the charge-density wave in the rf-synchronized modes and oscillations of Shapiro steps' width vs. rf power. *Phys. Rev. B*, **101** (2020) 115425.

- [2] Nikitin M.V., Zybtev S.G., Pokrovskii V.Ya., and Loginov B.A., Mechanically induced Shapiro steps: Enormous effect of vibrations on the charge-density wave transport. *Appl. Phys. Lett.*, **118**, 223105 (2021).
- [3] Zybtev S.G., Pokrovskii V.Ya., Strain-Induced Formation of Ultra-Coherent CDW in Quasi One-Dimensional Conductors. *Physica B*, **460**, 34–38 (2015).
- [4] Zybtev S.G. and Pokrovskii V.Ya., Quantization of states and strain-induced transformation of charge-density waves in the quasi one-dimensional conductor TaS₃. *Phys. Rev. B*, **94**, 115140 (2016).
- [5] Zaitsev-Zotov S.V., Pokrovskii V.Ya., and Gill J.C., Mesoscopic Behavior on the Threshold Voltage in Ultra-Small Specimens of o-TaS₃. *Journ. Phys. I (France)*, **2**, 111 (1992).

Особенности корреляций сверхструктур при интенсивных испарениях металлов

П.В. Провоторов, А.А. Левченко, Н.В. Классен

Институт физики твердого тела РАН, г. Черногловка, Россия

Самоорганизация сверхструктур в конденсированных средах при сильных отклонениях от равновесия привлекает все большее внимание специалистов самых разных сфер — физики, химии, биологии и их технологических и биомедицинских применений. Возникающие при этом нано- и микроразмерные регулярные системы позволяют и глубже понять процессы образования живых систем, и создавать новые природоподобные технологии электронных и конструкционных компонентов. В представляемой работе исследуются коллективные процессы формирования наноструктур при высокоэнергетических испарениях обширного набора металлов разнообразными способами, сопоставления результатов которых дают полезную информацию как о природе самоорганизации, так и о новых приемах формирования компонентов для технических и биомедицинских применений. Для испарения применялись электрический взрыв тонких проволочек и их нагрев высокочастотным полем, облучение импульсными и непрерывными лазерами, инъектирование мик-

рочастиц металлов в высокотемпературное пламя. Широко варьировались среды, в которых проходило испарение (воздушная атмосфера, инертный газ, жидкий азот, вакуум, плазма). Установлено, что на характер формирования сверхструктур существенное влияние оказывают соотношение между температурами плавления и кипения металлов и их оксидов. Для металлов, температура кипения которых выше, чем температура кипения оксидов, при испарении в кислородсодержащей среде из паров окисленных металлов формируются протяженные цепочки наночастиц, морфологии которых варьируются с изменениями не только свойств самого металла, но и сильно зависят от характеристик ввода энергии и состояния окружающей среды (способ и интенсивность нагрева, морфология исходного металла, состав, давление и скорость потока окружающего газа и т. д.). При этом оказывается, что существенную роль при формировании наночастиц играют турбулентные потоки из смеси получаемого пара и окружающего газа. Например, при испарении молибдена, температуры плавления и кипения которого почти на две тысячи градусов выше соответствующих температур его оксида, образуются наночастицы рекордной длины — до 60 см, способные долго летать в воздухе, подобно паутинкам. В этом случае формирование турбулентных вихрей идет особенно интенсивно за счет того, что оксид, образующийся на поверхности микрокапель расплавленного молибдена, оказывается настолько перегретым, что испаряется взрывообразно. А за счет высокой скорости парового потока в нем образуются турбулентности, в которых быстро вращающиеся частицы пара за счет центробежной силы концентрируются у внешних границ вихрей, конденсируясь в наночастицы, показанные на рис. 1 (разница увеличений — 33 раза).

Похожими способами получены наночастицы оксидов свинца, олова, меди. Если же испарение металла производится в бескислородной среде (например, жидком азоте), то при этом формируются наночастицы самого металла, а изменения условий формирования турбулентных паров приводят к существенным вариациям морфологий цепочек. Например, если при испарении свинца на воздухе превалируют одиночные цепочки, то в жидком азоте образуются ячеистые кружевные структуры. При этом в широком диапазоне масштабов наблюдаются признаки фрактальной

инвариантности морфологий. Радикально отличаются морфологии формируемых при испарении сверхструктур для металлов, у которых температуры плавления и кипения оксидов оказываются, наоборот, выше, чем у исходных металлов. Например, в случаях испарения железа и титана электрическим взрывом и испарением в пламени формируются не нанопечки, а полые микрообразования сферической или эллипсоидной форм. При этом на внутренних поверхностях этих сфер наблюдаются отчетливо разделенные друг от друга зерна разных форм с нано- или микромасштабными размерами (рис. 2).

личиями в активности взаимодействия железа и титана с кислородом. Различия во внутренних морфологиях для этих металлов также весьма значительны. У железа микростолбики формируют регулярные ряды из плотно состыкованных друг с другом компонентов (рис. 2). У титана же превалируют микростолбики, сильнее разделенные друг от друга. Вероятно, существенный вклад в такие различия вносит ферромагнетизм железа. Спонтанная намагниченность приводит к образованию микродоменов, когда соседние домены для минимизации магнитостатической энергии ориентируются своими магнитными моментами противоположно. При этом между ними возникает магнитостатическое притяжение, но за счет обменного отталкивания границ они четко отделены друг от друга, формируя в то же время плотную упаковку. В обоих случаях решающее значение для формирования полых микрообразований имеют процессы внутреннего испарения, давление которого и приводит к их «раздуванию».

В заключение в докладе будут представлены модельные рассуждения обнаруженных процессов с оценками влияния внешних и внутренних факторов на характер формируемых сверхструктур. На этой основе будут предложены рекомендации для получения и нанопечек, и полых микрообразований со сверхструктурными характеристиками, требуемыми для разного рода применений в электронике, оптике, энергетике, биомедицине.

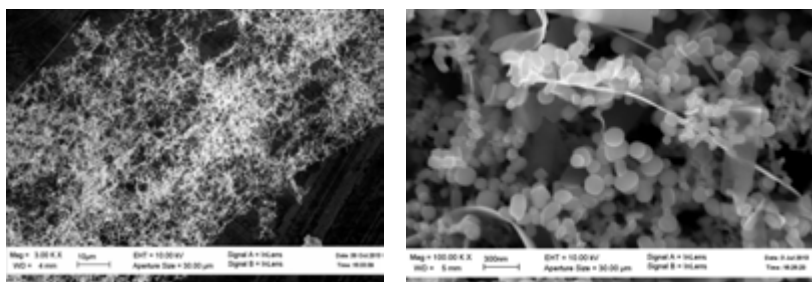


Рис. 1. Электронная микроскопия нанопечек из оксида молибдена

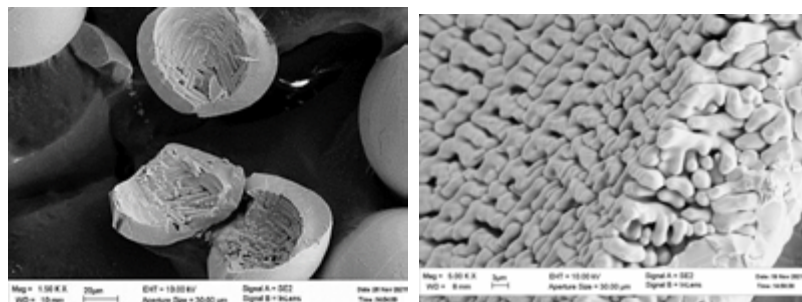


Рис. 2. Электронная микроскопия полых образований железа, сформированных испарением посредством электрического взрыва на воздухе

Следует подчеркнуть, что и внешние, и внутренние морфологии таких образований существенно зависят от типа испаряемого металла. Если в случае железа внешние поверхности гладкие, то у образований титана на них наблюдается значительное количество пор. Это можно объяснить раз-

Трионный газ, электронно-дырочная жидкость и переход «металл–диэлектрик» в легированных гетероструктурах на основе дихалькогенидов переходных металлов

П.В. Ратников^{1,*}, А.П. Силин^{2,3}

¹Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, г. Москва, Россия

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, г. Москва, Россия

³Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный, Россия

*E-mail: ratnikov@lpi.ru

Низкотемпературная легированная электронно-дырочная жидкость (ЭДЖ) в «традиционных» полупроводниках (Ge и Si) исследовалась экс-

периментально и теоретически (см. монографию [1] и ссылки в ней). Плотность «лишних» электронов или дырок определялась легированием (количеством донорных или акцепторных атомов), поэтому в рассматриваемом трехмерном образце ей нельзя было управлять и она изменялась только при замене образца.

Ситуация существенно поменялась при использовании двумерных (2D) материалов, таких как графен и монослои (бислои) дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ). ЭДЖ в монослоях ДПМ становится «высокотемпературной» и сильносвязанной [2, 3]. Плотность «лишних» носителей тока определяется не количеством введенных примесных атомов, а электронным или дырочным легированием, когда плотность носителей тока изменяется с помощью электрического полевого эффекта.

Мы рассматриваем модельный многодолинный 2D-полупроводник с v_e электронными и v_h дырочными долинами. Плотности электронов и дырок равны соответственно n_e и n_h . Пусть $n_e \geq n_h$. При электронном легировании ($n_e > n_h$) превышение плотности электронов над плотностью дырок $\Delta n = n_e - n_h$ задается напряжением на затворе. В условиях фотовозбуждения переменной величиной считается плотность рождаемых электронно-дырочных ($e-h$) пар $n = n_h$. Для заданной интенсивности фотовозбуждения удобно ввести параметр $\delta = \Delta n / n$ (уровень электронного легирования).

Энергию основного состояния представим в виде ($\varkappa = v_e / v_h$ и $\sigma = m_e / m_h$, $r_s = \sqrt{\frac{v_h}{\pi n}}$)

$$E_{gs} = \frac{1}{(1+\sigma)r_s^2} \left(\sigma + \frac{1+\sigma}{\varkappa} \right) - \frac{4\sqrt{2}}{3\pi r_s} \left(1 + \sqrt{\frac{1+\delta}{\varkappa}} \right) + \int_0^\infty I(q) dq. \quad (1)$$

Первые два слагаемые — энергия в приближении Хартри–Фока (кинетическая и обменная энергия). Последнее слагаемое — корреляционная энергия, записанная в виде интеграла по передаваемому импульсу q . Она отнесена к «средней» плотности частиц $\bar{n} = (n_e + n_h) / 2 = \left(1 + \frac{\delta}{2} \right) n$.

При $q \ll 1$ функция $I(q)$ определяется в приближении хаотических фаз, а при $q \gg 1$ — суммой диаграмм второго порядка по взаимодействию (кольцевыми и обменными).

В многодолинном случае ($v_{e,h} \gg 1$) получаем оценку снизу для корреляционной энергии:

$$E_{\text{corr}} \geq -2 \left(\frac{12}{\pi} \right)^{1/3} \frac{(1+\delta)^{1/6} (1 + \sqrt{\varkappa(1+\delta)})}{\left(1 + \frac{\delta}{2} \right)^{1/3} (\varkappa^{3/2} + \sqrt{1+\delta})^{1/3}} n^{1/3}. \quad (2)$$

Множитель при $n^{1/3}$ в (2) как функция \varkappa имеет максимум (по модулю) при $\varkappa_{\text{max}} = 1 + \delta$ (при заданном \varkappa это происходит, когда $n_e = \varkappa n$). Следовательно, при $\delta \neq 0$ ($n_e > n_h$) выгодно иметь $\varkappa \approx \varkappa_{\text{max}} > 1$ ($v_e > v_h$). Это означает, что для увеличения (по модулю) корреляционной энергии добавлять следует носители тока, число долин которых больше.

В отсутствие легирования ($\delta = 0$) термодинамика $e-h$ -пар в монослое ДПМ была описана в нашей предыдущей работе [4]. При низких уровнях легирования ($\delta \ll 1$ и $n_e \approx n_h$) картина слабо изменится.

Химический потенциал носителей заряда в легированных гетероструктурах представляется в виде

$$\mu(n, T) = T \ln \left\{ \left[\exp \left(\frac{2\pi(1+\delta)n}{\varkappa(1+\delta)v_h T} \right) - 1 \right] \left[\exp \left(\frac{2\pi\sigma n}{(1+\sigma)v_h T} \right) - 1 \right] \right\} - \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\pi v_h}} \left(1 + \sqrt{\frac{1+\delta}{\varkappa}} \right) \sqrt{n} + \frac{\partial}{\partial n} (n E_{\text{corr}}). \quad (3)$$

Первое слагаемое — химический потенциал невзаимодействующих частиц. Второе и третье — соответственно обменный и корреляционный вклады, которые полагаются независимыми от температуры T , поскольку температурные поправки для них взаимно сокращаются при $T \ll E_F$ (E_F — энергия Ферми $e-h$ -пар).

Для получения температурной зависимости плотности $e-h$ -пар в газовой $n_G(T)$ и в жидкой $n_L(T)$ фазах воспользуемся правилом Максвелла:

$$\int_{n_G}^{n_L} \mu(n, T) dn = \mu(T)(n_L - n_G), \quad (4)$$

где $\mu(T) = \mu(n_G, T) = \mu(n_L, T)$.

Для каждого значения имеется своя колокообразная кривая, образованная набором пар точек n_G и n_L на плоскости (n, T) . Таким образом, переходу «газ–жидкость» при легировании соответствует поверхность в пространстве (δ, n, T) .

Мы предлагаем адаптировать критерий Мотта к переходу «трионный газ – электронно-дырочная плазма» в гетероструктурах на основе монослойных (бислойных) пленок ДПМ. Вместо экситонов теперь имеются трионы, поэтому оценивать нужно произведение $n_{tr} a_{tr}^2$, где n_{tr} — плотность трионов при переходе, a_{tr} — «радиус» триона. Оно также будет малым по сравнению с 1, даже если учесть, что $a_{tr} \geq a_B$.

Возникновение ЭДЖ при достаточно низких температурах происходит путем фазового перехода первого рода, когда плотность носителей тока достигает некоторого критического значения — плотности насыщенного пара. Эта ситуация может быть реализована в термодинамически равновесных условиях для полупроводника с достаточно узкой запрещенной зоной E_g при повышении температуры или уменьшении E_g [5].

Перенормировка энергетической щели определяется величиной энергии основного состояния электронного газа $E_{gs}(n_e)$ (для определенности будем рассматривать электронное легирование), $E_g(n_e) = E_g^{(0)} - |E_{gs}(n_e)|$, где $E_g^{(0)}$ — перенормированная ширина запрещенной зоны.

Рассматриваемый переход происходит, когда перенормированная щель сравнивается с энергией связи экситона: $E_g(n_e) = |E_{ex}(n_e)|$. Наши оценки для характерных значений параметров монослоев ДПМ показывают, что переход возможен при $v_e \geq 61 \pm 34$. Однако в реальных гетероструктурах на основе ДПМ есть всего несколько долин. Это указывает на отсутствие перехода «металл–диэлектрик» в равновесном случае.

П.В. Ратников благодарит Фонд развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (грант №20-1-3-68-1).

Список литературы

- [1] *Электронно-дырочные капли в полупроводниках* / Ред. К.Д. Джеффрис, Л.В. Келдыш. М.: Наука (1988).
- [2] Yu Y. et al. *ACS Nano*, **13**, 10351 (2019).
- [3] Пех П.Л., Ратников П.В., Силян А.П. *Письма в ЖЭТФ*, **111**, 80 (2020).
- [4] Пех П.Л., Ратников П.В., Силян А.П. *ЖЭТФ*, **160**, 572 (2021).
- [5] Андришин Е.А., Келдыш Л.В., Силян А.П. *ЖЭТФ*, **73**, 1163 (1977).

Электронные свойства двухслойного графена со структурой AA

А.Л. Рахманов, А.В. Рожков, А.О. Сбойчаков

*Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН,
г. Москва, Россия*

Двухслойный графен со структурой AA обладает рядом уникальных физических свойств [1]. Эти свойства обусловлены нестингом поверхности Ферми и, соответственно, высокой чувствительностью рассматриваемой системы даже к слабому к электрон-электронному взаимодействию [2]. Учет этого взаимодействия приводит к неустойчивости бесщелевого электронного спектра и возникновению волны спиновой или зарядовой плотности, а также, возможно, и к электронному фазовому расщеплению. Возникающее в результате неустойчивости новое основное состояние может обладать, например, магнитным порядком.

Наиболее интересной особенностью рассматриваемого двухслойного графена является возможность образования полуметаллических (half-metal) и даже «четверть-металлических» фаз при допировании [3, 4]. Это

необычное свойство связано с существованием двух неэквивалентных конусов Дирака (или двух долин) в зоне Бриллюэна графена. В предсказанных нами дробно-металлических состояниях электроны на поверхности Ферми полностью поляризованы по некоему индексу, характеризующему основное состояние системы. В зависимости от условий электроны могут быть поляризованы по спину (обычный полуметалл), по индексу электронной долины или киральности (спин-долинный полуметалл) либо одновременно по паре индексов спина и долины (четверть-металл). Перечисленные фазы возникают даже в случае слабого электрон-электронного отталкивания, которое не открывает щели в спектре однослойного графена или «обычного» двухслойного графена со структурой АВ.

Какое из возможных однородных или неоднородных упорядоченных состояний является действительно основным для двухслойного АА графена — открытый вопрос. Отличие в свободных энергиях изучаемых электронных фаз невелико. Резонно предположить, что ответ будет зависеть от качества образца и условий, в которых он находится (подложка, допирование, температура и т. д.). Образцы двухслойного АА-графена, которые приготовлены в ряде лабораторий, к сожалению, имеют низкое качество и небольшие размеры. Они не пригодны для выполнения экспериментальных исследований их электронного спектра.

В настоящее время экспериментально и теоретически интенсивно исследуется двухслойный скрученный графен с малыми («магическими») углами поворота слоев друг относительно друга (порядка одного градуса) [5]. Такую структуру можно представить как чередующиеся области двухслойного графена с упаковками АА и АВ. При этом, как известно [1], электроны проводимости локализованы именно в областях АА. При малых углах скрутки эти области содержат тысячи атомов углерода. Естественно предположить, что богатые электронные свойства АА-графена в определенной мере должны отражаться на электронных свойствах двухслойного графена, скрученного под малыми углами. Отмеченная аналогия может быть весьма полезна для теоретического изучения скрученного графена. Действительно, теоретическое исследование электронных свойств такой системы наталкивается на большие вычисли-

тельные сложности. Практически все надежные результаты получены численно на компьютерах с высокой производительностью.

Нами проанализированы электронные свойства квантовой точки из АА-графена. Эта точка моделирует часть ячейки сверхструктуры скрученного графена с упаковкой атомов АА. Аналитически и численно показано, что, по аналогии с двухслойным скрученным графеном, для такой точки наблюдается последовательность «магических» размеров. С изменением радиуса квантовой точки при прохождении магического размера меняется четность волновой функции основного состояния относительно перестановки слоев. Вблизи магического размера низкоэнергетический одноэлектронный спектр системы состоит из восьми почти вырожденных уровней, отделенных большой энергетической щелью от остального спектра. Такой вид спектра напоминает картину зон в двухслойном графене, скрученном под магическим углом. Спектры квантовых точек однослойного графена и «обычного» двухслойного графена со структурой АВ подобной особенности не имеют. Граничные условия на периметре квантовой точки влияют на величину магических радиусов, однако эти магические радиусы существуют при любых граничных условиях.

Список литературы

- [1] Rozhkov A.V., Sboychakov A.O., Rakhmanov A.L., Nori F. *Phys. Reports*, **648**, 1 (2016).
- [2] Rakhmanov A.L., Rozhkov A.V., Sboychakov A.O., Nori F. *Phys. Rev. Lett.*, **109**, 206801 (2012).
- [3] Rozhkov A.V., Rakhmanov A.L., Sboychakov A.O., Kugel K.I., Nori F. *Phys. Rev. Lett.*, **119**, 107601 (2017).
- [4] Sboychakov A.O., Rakhmanov A.L., Rozhkov A.V., Nori F. *Phys. Rev. B*, **103**, L081106 (2021).
- [5] Le Cai, Gui Yu. *Adv. Materials*, **33**, 2004974 (2021).

Электронная нематичность двухслойного подкрученного графена

А.В. Рожков, А.О. Сбойчаков, А.Л. Рахманов

*Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН,
г. Москва, Россия*

Доклад посвящен теоретическому анализу многочастичных свойств двухслойного подкрученного графена с углом подкрутки, равным так называемому «первому магическому углу» [1]. Будут представлены наши результаты, описывающие возникновение электронных упорядоченных состояний при различных уровнях легирования двухслойного образца. В частности, мы обсудим возникновение, устойчивость и проявления нематически упорядоченного низкотемпературного состояния.

В качестве исходной точки мы будем использовать теорию сильной связи для подкрученного графена. Для такой модели хорошо известно, что при нулевом взаимодействии низкоэнергетический спектр исследуемой системы состоит из четырех почти плоских почти вырожденных зон. Эти зоны активно исследовались в последние годы как численными методами, так и аналитически.

Электрон-электронное отталкивание снимает вырождение одноэлектронного спектра. Для учета влияния взаимодействия на одноэлектронные свойства системы нами используется численная теория среднего поля. Предполагая, что основное состояние имеет порядок, локально подобный волне спиновой плотности, мы вводим многокомпонентный параметр порядка, описывающий локальную спиновую намагниченность. Равновесная структура параметра порядка находится методом численной итеративной минимизации энергии основного состояния.

Проведенные нами расчеты показывают, что структура параметра порядка меняется при изменении уровня легирования образца: легирование образца снижает вращательную симметрию упорядоченного состояния, что свидетельствует о появлении электронного нематического состояния. Нематичность проявляет себя в пространственном распределе-

нии спиновой намагниченности внутри муаровой ячейки, а также влияет на одноэлектронную зонную структуру. Мы обнаружили, что нематичность наиболее сильна при половинном заполнении (два дополнительных электрона или дырки на сверхячейку).

Мы демонстрируем, что нематичность является стабильной характеристикой основного состояния системы, устойчивой к изменениям параметров модели. В частности, наши численные данные показывают, что вдали от точки зарядовой нейтральности нематичность сохраняется для трех неэквивалентных параметризаций амплитуды межслоевых перескоков. Полученные теоретические результаты согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00464, <https://rscf.ru/project/22-22-00464/>

Список литературы

- [1] Rozhkov A.V., Sboychakov A.O., Rakhmanov A.L., Nori F. *Phys. Reports*, **648**, 1 (2016).

Аксионная волна зарядовой плотности в $(\text{TaSe}_4)_2\text{I}$?

А.А. Синченко^{1,2}, П. Монсо³

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

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

³*Институт Нееля ИЦНИ, г. Гренобль, Франция*

В недавно опубликованной работе [1] сообщалось о наблюдении в квазиодномерном проводнике с волной зарядовой плотности (ВЗП) $(\text{TaSe}_4)_2\text{I}$ отрицательного магнитосопротивления в пайерлсовском состоянии в случае, когда магнитное поле прикладывалось параллельно цепочкам ВЗП. Зонные расчеты, подтвержденные ARPES-измерениями, показывают, что данное соединение является полуметаллом Вейля

в нормальном состоянии [2]. Однако при понижении температуры и переходе в состояние с ВЗП открывающаяся пайерлсовская энергетическая щель полностью закрывает вейлевские конусы. В этой связи является удивительным, что эффект отрицательного магнитосопротивления проявлялся в данном соединении, причем только в режиме движущейся ВЗП (скольжения) в электрических полях $E \approx 2-3 E_t$, где E_t является пороговым полем для начала скольжения ВЗП [3]. Отрицательное магнитосопротивление в работе [1] возрастало более чем на порядок в магнитном поле 8 Т при $T = 80$ К. На основании этих наблюдений был сделан вывод, что в $(\text{TaSe}_4)_2\text{I}$ наблюдается киральная аномалия, причем реализуется аксионная ВЗП — экзотическое состояние, когда ВЗП образована носителями, конденсированными с различных вейлевских конусов, а отрицательное магнитосопротивление является результатом транспорта аксионных поляритонов. Результаты данной работы привели к появлению большого количества работ, посвященных развитию концепции аксионной ВЗП, хотя корректность самих результатов и, как следствие, возможность существования собственно аксионной ВЗП подтверждены не были.

В настоящей работе проведены детальные исследования магнитосопротивления монокристаллов $(\text{TaSe}_4)_2\text{I}$ в геометрии, полностью аналогичной экспериментальной геометрии работы [1] как в статическом состоянии ВЗП, так и в режиме ее скольжения [4]. Показано, что в цитируемой работе корректно не реализуется коллективное движение волны зарядовой плотности. Полученные в данной работе электронные транспортные характеристики являются результатом гигантского джоулева нагрева, а эффект отрицательного магнитосопротивления является результатом сильной температурной неоднородности образцов. В режиме скольжения ВЗП как продольное, так и поперечное магнитосопротивление является положительным, квадратично зависит от магнитного поля и не превышает долей процента. Эффект отрицательного магнитосопротивления в данном соединении полностью отсутствует при всех состояниях волны зарядовой плотности и для всех ориентаций магнитного поля, что ставит под большое сомнение возможность реализации аксионной ВЗП, по крайней мере в квазиодномерных соединениях.

Список литературы

- [1] Gooth J. et al *Nature*, **575**, 315 (2019).
- [2] Shi W. et al. arXiv:1909.04037.
- [3] Monceau P. *Advances in Physics*, **61**, 325 (2012).
- [4] Sinchenko A.A. et al. *Applied Physics Letters*, **120**, 063102 (2022).

Особенности деформационно-химического формирования сверхструктур в композициях «органика – неорганика»

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

Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия

Разработки гибридов органики и неорганики получают все более широкое применение в оптоэлектронике, новых типах солнечных батарей и электронных устройствах. Интерес к таким гибридам определяется и их новыми функциональными возможностями, и значительно сниженной себестоимостью по сравнению с классическими полупроводниками. При производстве традиционных полупроводниковых элементов применяются дорогостоящие высокотемпературные и высоковакуумные процессы, а изготовление их органических заменителей этого не требует. Кроме того, за счет пониженной энтропии полимерных молекул их самоорганизация в сверхструктуры с требуемой для технического применения морфологией происходит значительно проще. Поэтому при изготовлении электронных и оптических компонентов из гибридов «органика–неорганика» возможно замещение дорогостоящих литографии и термодиффузии управляемой самоорганизацией.

В данной работе исследуется формирование сверхструктур, перспективных для применения в оптике и микроэлектронике, посредством деформационно-химических процессов, означающих в данном случае сочетание химических реакций с деформационными и электрическими воздействиями на композиции из органических и неорганических материалов. Применялись методики формирования игольчатых и дендритных микрокристаллов бромида лантана, йодида и сульфата цезия из водных

растворов в электрическом поле с добавлением раствора полистирола в бензоле, вытягивания волокон из раствора полистирола в бензоле с введенными в него наночастицами йодида цезия или игольчатыми и дендритными микрокристаллами кристаллами бромидов лантана, йодида и сульфата цезия, а также шариковой обкатки кристаллов йодида цезия и хлорида калия с нанесенными на их поверхность суспензиями полистирола и углерода,

Было обнаружено сильное влияние электрического поля величиной порядка 100 В/см на кристаллизацию указанных выше неорганических кристаллов из водных растворов. При наложении поля в растворах быстро формировались игольчатые или периодические дендритные микрокристаллы бромидов лантана, йодида и сульфата цезия. Добавление в эти растворы раствора полистирола в бензоле приводило к образованию композиционных связей этих микрокристаллов с органическими материалами. Это выразилось, в частности, в стабилизации микроигл и микродендритов бромидов лантана. Этот кристалл в обычном состоянии, оказавшись на воздухе, из-за своей высокой гигроскопичности в течение нескольких минут пропитывается молекулами воды, что заметно изменяет его форму. В то же время иглы и дендриты бромидов лантана после взаимодействия с раствором полистирола на открытом воздухе свою форму стабильно сохраняют.

Признаки сильного взаимодействия этих кристаллов с полистиролом отчетливо проявляются при электронной микроскопии и инфракрасной спектроскопии микроволокон полистирола с наполнителями из их нано- или микрочастиц (рис. 1). Слева показана электронная микроскопия боковой поверхности микроволокна полистирола с введенными в него наночастицами йодида цезия. Отчетливо видны отверстия диаметром порядка 5 нм, образованные выходами наружу газообразного продукта химической реакции между наночастицами йодида цезия и полистирола. Справа приведен инфракрасный спектр пропускания этого микроволокна в области колебаний фенильных групп (модифицированных бензольных колец). В спектре полистирола с йодидом цезия отчетливо видно дополнительное поглощение в области 550–570 нм. Оно указывает на сильную связь указанных колец с наночастицами йодида цезия, которая, напри-

мер, может быть обусловлена активным взаимодействием йода с парными междуглеродными связями.

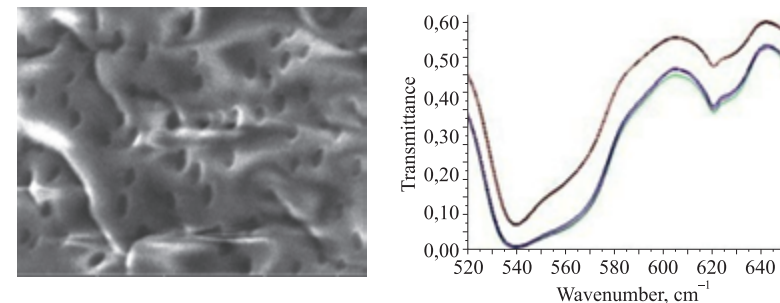


Рис. 1. Слева — электронная микроскопия наноканалов, образованных в волокне полистирола реакцией с наночастицами йодида цезия. Диаметры каналов — 5 нм. Справа — спектры инфракрасного пропускания полистирола в области колебаний фенильных групп. Прогиб нижнего спектра на 560 нм — результат связи фенильных колец с наночастицами

На рис. 2 приведены результаты внедрения углерода (слева) и полистирола (справа) в щелочно-галогидные монокристаллы соответственно хлорида калия и йодида цезия.

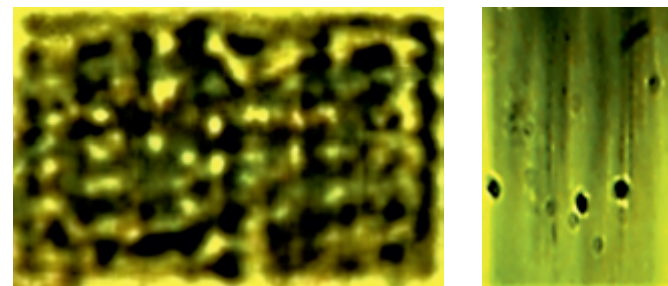


Рис. 2. Просвечивающая оптическая микроскопия включений, введенных в монокристаллы с помощью шариковой обкатки на глубину порядка 100 микрон. Слева — включения углерода, введенные в монокристалл хлористого калия. Размер одного включения — порядка 3 микрон. Справа — нитевидные включения полистирола в монокристалле йодида цезия

Приведенные здесь оптические микрофотографии показывают, что в результате деформационно-химических взаимодействий углерода и полистирола с указанными материалами за весьма короткое время (порядка 20 минут) произошло внедрение микрокомпонентов на аномально большую глубину (порядка 100 нм). Важно подчеркнуть, что в хлориде калия сформировалось квазипериодическое распределение углерода с максимумом средней плотности внедряемого материала не у поверхности, как обычно происходит при термодиффузионном внедрении, а на значительной глубине. Этот результат и внедрение на аналогичные глубины микронитей полистирола (левый снимок) открывают интересные перспективы для экономичного формирования компонентов оптических и электронных устройств с новыми функциональными возможностями.

Исследование проводящих свойств интерфейсов гетероструктур сегнетоэлектрик/диэлектрик

А.О. Чибирев¹, Д.П. Павлов¹, А.В. Леонтьев¹, М.И. Банников^{1,2},
Н.Н. Гарифьянов¹, Р.Ф. Мамин^{1,*}

¹Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского, г. Казань, Россия

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН (ФИАН), г. Москва, Россия

*E-mail: mamin@kfti.knc.ru

Электронный газ высокой подвижности был обнаружен на интерфейсе между LaAlO_3 и SrTiO_3 в 2004 году Охтомо и Хвангом [1]. Впоследствии было найдено, что эта гетероструктура обладает ферромагнитными свойствами [2] и переходит в сверхпроводящее состояние при температурах ниже 300 мК [3]. В нашей группе мы уже исследовали гетероструктуры на основе сегнетоэлектрических и диэлектриков оксидов со структурой типа $\text{BaTiO}_3/\text{LaMnO}_3$ и $\text{BaTiO}_3/\text{La}_2\text{CuO}_4$. Результаты расчетов из первых принципов для гетероструктуры $\text{BaTiO}_3/\text{LaMnO}_3$ представлены в работе [4]. В этих работах показано, что в обеих гетерострук-

турах $\text{BaTiO}_3/\text{LaMnO}_3$ и $\text{BaTiO}_3/\text{La}_2\text{CuO}_4$ в области интерфейса исчезает запрещенная зона и система переходит в состояние с отличной от нуля плотностью состояний на уровне Ферми. Таким образом, моделирование в гетероструктурах $\text{BaTiO}_3/\text{LaMnO}_3$ указывает на металлический характер поведения проводимости интерфейса этой гетероструктуры. Позже были получены образцы гетероструктур $\text{Ba}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{TiO}_3/\text{LaMnO}_3$, в том числе реализованные в пленочной структуре, когда и сегнетоэлектрик $\text{Ba}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{TiO}_3$, и манганит LaMnO_3 были последовательно нанесены на подложку MgO . Экспериментально измерено сопротивление образцов и показано возникновение квазидвумерной проводимости на интерфейсе гетероструктуры.

В гетероструктуре $\text{Ba}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{TiO}_3/\text{LaMnO}_3$ электрическое сопротивление значительно уменьшается с температурой при значениях температуры ниже максимума 160–230 К, указывая на металлический характер поведения проводимости интерфейса этой гетероструктуры. Температура максимума зависит от внешнего магнитного поля и увеличивается с полем. Сильное влияние внешнего магнитного поля на сопротивление гетероструктуры свидетельствует о вероятности существования магнитного порядка в области интерфейса.

При исследовании гетероструктур $\text{Ba}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{TiO}_3/\text{LaMnO}_3$, как пленочных, так и на основе монокристалла LaMnO_3 , был обнаружен своеобразный эффект отрицательной фотопроводимости гетероструктуры во время однородного освещения гетероструктуры со стороны сегнетоэлектрической пленки светом различного спектрального состава. Эффект состоит в том, что при освещении сегнетоэлектрической пленки сопротивление гетероструктуры, измеренное вдоль интерфейса, увеличивается. Величина эффекта зависит от спектрального состава света, наибольший эффект наблюдается при освещении зеленым светом. Также обнаружен кумулятивный эффект при последовательном добавлении освещения различного спектрального состава к сегнетоэлектрической пленке [5].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-12-00179).

Список литературы

- [1] Ohtomo A., Ywang H. *Nature*, **427**, 6973 (2004).
- [2] Thiel S., Hammerl G., Schmehl A. et al. *Science*, **313**, 5759 (2006).
- [3] Reyren N., Thiel S., Cavaglia A.D. et al. *Science*, **317**, 1196 (2007).
- [4] Kabanov V.V., Piyanzina I.I., Lysogorskiy Yu.V. et al. *Mater. Res. Express*, **7**, 055020 (2020).
- [5] Леонтьев А.В., Чибирев А.О. и др. *Письма в ЖЭТФ*, **114**, 12, с. 818–823 (2021).

СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ. СВЕРХТЕКУЧЕСТЬ. БОЗЕ-КОНДЕНСАЦИЯ

Характеристики тока пар в точечных контактах Джозефсона $\text{Pb}_{0,6}\text{In}_{0,4}/\text{K}(\text{Ba})\text{Fe}_2\text{As}_2$ и $\text{K}(\text{Ba})\text{Fe}_2\text{As}_2/\text{K}(\text{Ba})\text{Fe}_2\text{As}_2$

М.В. Голубков^{1,2,*}, В.А. Степанов¹, А.В. Садаков¹,
А.С. Усольцев¹, И.В. Морозов³

¹Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук,
г. Москва, Россия

²Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
г. Москва, Россия

³Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
г. Москва, Россия

*E-mail: golubkov@sci.lebedev.ru

Изучены характеристики точечных контактов Джозефсона $\text{Pb}_{0,6}\text{In}_{0,4}/\text{K}_{1-x}\text{Ba}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ и $\text{K}_{1-x}\text{Ba}_x\text{Fe}_2\text{As}_2/\text{K}_{1-x}\text{Ba}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ (критическая температура кристаллов $\text{K}_{1-x}\text{Ba}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ $T_c \approx 3,8$ К), $x = 0,01$ (EDX). Измерены зависимости характерного напряжения контактов $V_c(T) = I_c \cdot R_N$ (I_c — критический ток, R_N — сопротивление в нормальном состоянии) от температуры T и зависимости амплитуд первых ступенек тока (Shapiro steps) на вольт-амперных характеристиках от мощности СВЧ-излучения P $I_n(P)$ ($n = 0, 1, 2$; $I_0 = I_c$) частотой $f = 7,6$ ГГц. Установлено, что зависимости $V_c(T)$ качественно описываются моделью SIS*IS контакта (S — сверхпроводник, I — изолятор, S* — сверхпроводник с меньшей критической температурой) для «обычных» сверхпроводников. Показано, что период осцилляций ступенек тока, в зависимости от мощности СВЧ-излучения, можно точно аппроксимировать резистивной моделью контакта Джозефсона при опреде-

лении нормированной частоты СВЧ-сигнала $\Omega = 2\pi f / (2eV_c / \hbar)$ из измеренных зависимостей $I_n(\sqrt{P})$. Аппроксимация измеренных зависимостей $I_n(\sqrt{P})$ вычисленными показала, что сверхпроводящий ток $I_s = I_c \sin(\varphi)$, что согласуется с обычной $-s$ и s^{++} -симметрией параметра порядка в $K_1-x\text{Ba}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$.

Исследование сверхпроводящего интерметаллида $\text{Mo}_4\text{Ga}_2\text{Sb}$ в нормальном и сверхпроводящем состоянии методом ЯМР- и ЯКР-спектроскопии

А.В. Гунбин¹, С.В. Журенко¹, Д.А. Ярыгина², А.В. Ткачев¹,
А.А. Гиппиус^{1,2}, В.Ю. Верченко², А.В. Шевельков²

¹Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук,
г. Москва, Россия

²МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия

Сверхпроводящий интерметаллид $\text{Mo}_4\text{Ga}_2\text{Sb}$, исследуемый в работе, обладает критической температурой перехода в сверхпроводящее состояние $T_c = 6,6$ К в нулевом магнитном поле. Исследование соединения $\text{Mo}_4\text{Ga}_2\text{Sb}$ методами ЯМР- и ЯКР-спектроскопии на ядрах $^{69,71}\text{Ga}$ позволяет получить подробную информацию о механизме спаривания электронов и ширине сверхпроводящей щели в сверхпроводнике.

Сверхпроводник $\text{Mo}_4\text{Ga}_2\text{Sb}$ имеет пространственную группу $I4/m$, атом Мо располагается в центре структуры MoGa_{10} . В ЯКР-спектре обнаруживаются 4 пары линий, соответствующих 4 неэквивалентным позициям $^{69,71}\text{Ga}$.

На экспериментальной зависимости скорости спин-решеточной релаксации ^{69}Ga $1/T_1$ от температуры в области выше T_c наблюдается линейная зависимость, выражаемая законом Корринги $1/T_1 T = 2,63$ (с·К)⁻¹. Это свидетельствует о том, что спин-решеточная релаксация в нормальном состоянии обусловлена в основном электронами проводимости. В соответствии с соотношением Корринги $S = 4\pi k_B T_1 T K_s^2 \gamma_n^2 / \hbar \gamma_e^2 = 0,52$

в нормальном состоянии сверхпроводника $\text{Mo}_4\text{Ga}_2\text{Sb}$ присутствуют антиферромагнитные корреляции электронов.

Ниже T_c в $\text{Mo}_4\text{Ga}_2\text{Sb}$ обнаруживается пик когерентности (гебель – сликтеровский пик), что соответствует сверхпроводимости с щелью s -типа. Симуляция зависимости скорости спин-решеточной релаксации от температуры со значениями щелей s -типа 13 и 6 К хорошо согласуется с экспериментальными значениями (рис. 1).

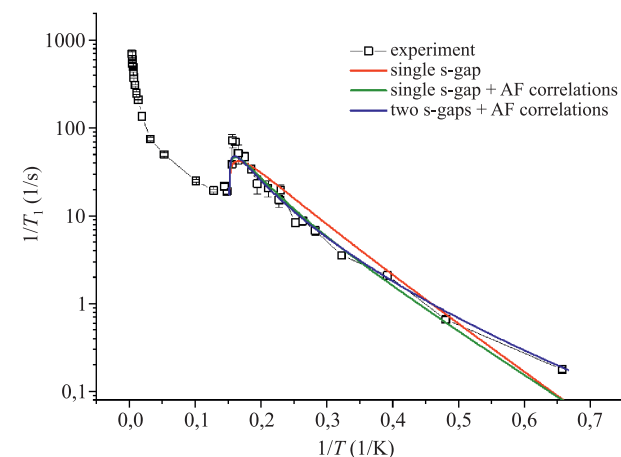


Рис. 1. Температурная зависимость скорости спин-решеточной релаксации в области температур 1–10 К с симуляционными кривыми для одной щели s -типа (красная линия), одной щели s -типа с АФМ-корреляциями (зеленая линия) и двух щелей s -типа с АФМ-корреляциями (синяя линия)

Измерения спин-спиновой релаксации T_2 , проведенные на всех позициях галлия, дают результат, по которому можно предположить наличие магнитных осцилляций. Для описания кривой релаксации используется выражение

$$I(2\tau) = I_0 \cdot \exp\left(-\frac{2\tau}{T_2}\right) \cdot \left[1 - K \cdot \exp\left(-\frac{2\tau}{T_2''}\right) \cdot \cos(2\tau\omega_{\text{mod}}) \right],$$

где $\omega_{\text{mod}} = \gamma B_{\text{loc}}$ — циклическая частота модуляции, возникающая из-за присутствия локального магнитного поля. Аппроксимация релаксацион-

ной кривой приводит к значению локального поля $\mu_0 H_{loc} = 2,96$ Гс при 77 К. Существование локального магнитного поля согласуется с установленными ранее магнитными корреляциями, которые могут приводить к возникновению локальных полей в области ядер *Ga* при различных температурах.

Список литературы

- [1] Verchenko V.Y., Zubtsovskii A.O., Plenkin D.S., Bogach A.V., Wei Z., Tsirlin A.A., Dikarev E.V., Shevelkov A.V., Family of $\text{Mo}_4\text{Ga}_{21}$ -based superconductors. *Chemistry of Materials*, **32** (2020) 6730–6735. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.0c02311>.
- [2] Kushida T., Benedek G.B., Bloembergen N. Dependence of the pure quadrupole resonance frequency on pressure and temperature. *Phys. Rev.*, **104**, 1364, (1956) 1364–1377. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.104.1364>.
- [3] Luo J., Wang C., Wang Z., Guo Q., Yang J., Zhou R., Matano K., Oguchi T., Ren Z., Cao G., NMR and NQR studies on transition-metal arsenide superconductors LaRu_2As_2 , $\text{kCa}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{F}_2$, and $\text{A}_2\text{Cr}_3\text{As}_3$. *Chinese Physics B*, **29**(6) 067402 (2020). <https://doi.org/10.1088/1674-1056/ab892d>.
- [4] Lombardi A., Mali M., Roos J., Brinkmann D. Hyperfine fields at the Ba site in the antiferromagnet $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6,05}$. *Phys. Rev. B*, **53**, 14268 (1996). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.53.14268>.

Novel superconducting states and room-temperature superconductivity in doped cuprates with small fermi energies

S. Dzhumanov, I. Khidirov, M.S. Nodirbekov, Sh.S. Djumanov

*Institute of Nuclear Physics, Uzbek Academy of Sciences,
Ulugbek, Tashkent, Uzbekistan*

Tashkent State Technical University, Tashkent, Uzbekistan

The formation of fermionic (weakly-bound) Cooper pairs and the superconducting transition at the critical temperature T_c and the superconducting state below T_c in conventional metals with large Fermi energies $\varepsilon_F > 1$ eV are

well described by the Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) theory¹. In contrast, the doped high- T_c cuprate compounds with small Fermi energies $\varepsilon_F \ll 1$ eV² undergo a λ -like superconducting transition at T_c ³ and their unusual superconducting state below T_c ⁴ is no longer described by the BCS-like theories. Since these unconventional cuprate superconductors are in the limit of bosonic (tightly-bound) Cooper pairs and therefore, the BCS-like theories predicting the possibility of Fermi-liquid superconductivity in ordinary metals are not able to describe the unusual superconducting state and λ -like phase transitions and other novel superconducting properties of high- T_c cuprates. Actually, there are important differences between fermionic and bosonic Cooper pairs and between superconducting mechanisms of these fundamentally different types of Cooper pairs in metals and high- T_c cuprates. The high- T_c cuprates undergoing a λ -like superconducting transition at T_c are in the regime of Bose-liquid superconductivity^{5,6,7} and not in the regime of BCS (Fermi-liquid) superconductivity. The λ -like superconducting transition observed in these materials^{3,8,9} is clearly indicative of that. It is natural to believe that in high- T_c cuprates the λ -like phase transition at T_c , as observed in various experiments, the novel superconducting states (phases) below T_c and high- T_c superconductivity observed both below and above bulk T_c ^{10,11,12} are closely related and must be understood simultaneously.

In this work we examine the novel superconducting states and the possibility of realizing high- T_c superconductivity of three-dimensional (3D) and two-dimensional (2D) charged bosons (tightly-bound Cooper pairs) in doped cuprates both below the bulk T_c and above the bulk T_c . We argue that unconventional Cooper pairs are formed in the normal state of high- T_c cuprates and behave like bosons, which condense into a Bose superfluid at T_c . We consider the novel superconducting states (phases) in these high- T_c materials as the superfluid states of single-particle and pair condensates of attracting bosonic Cooper pairs, which are fundamentally different from the usual Bose condensate of an ideal Bose-gas irrelevant to the phenomenon of superfluidity (superconductivity). We show that superconductivity in high- T_c cuprates just like

superfluidity in liquid ^4He is well described by the mean-field theory of interacting bosons. This theory of the Bose superfluid describes the phenomenon of high- T_c superconductivity in 3D- and 2D-attractive Bose systems resulting from pair condensation (at T_c) and single-particle condensation (at a temperature lower than T_c in 3D-systems, or at $T = 0$ in 2D-systems) of bosonic Cooper pairs. We find that the pair and single-particle condensates of bosonic Cooper pairs in high- T_c cuprates are two distinct superconducting states (phases), which are similar to the superfluid A and B phases in liquid ^3He . The theory of 3D and 2D Bose superfluids predicts that high- T_c cuprate superconductivity is more robust in 2D-systems than in 3D-systems, since the critical temperature T_c of the superconducting transition in 2D layers is much higher than in the bulk of high- T_c cuprates. Thus, the results of our calculations indicate that the predictions of the theory of Bose-liquid superconductivity realizing in the 3D-to-2D crossover regions may give help to find new examples of room-temperature superconductivity in some high- T_c cuprates. We demonstrate that the highest superconducting transition temperature can reach up to room temperature at 2D grain boundaries, interfaces and planes in the laminated blocks in newly derived high- T_c cuprates (e. g. in the specially-grown-specimens of new Bi-based high- T_c cuprates¹³).

References

- [1] Bardeen J., Cooper L.N., and Schrieffer J.R. *Phys. Rev.*, **108**, 1175 (1957).
- [2] Pietronero L., Strässler S., and Grimaldi S. *Phys. Rev. B*, **52**, 10516 (1995).
- [3] Salamon M.B., in: *Physical properties of High Temperature Superconductors I*, ed. D.M. Ginsberg (Mir, Moscow, 1990) Chap. 2.
- [4] Dzhumanov S. *Theory of Conventional and Unconventional Superconductivity in the High- T_c Cuprates and Other Systems* (Nova Science Publishers, Nova Science Publishers, New York, 2013).
- [5] Dzhumanov S., Baimatov P.J., Baratov A.A., and Rahmatov N.I. *Physica C*, 235–240, 2339 (1994).
- [6] Dzhumanov S., Khabibullaev S. *Paramana-J. Phys.*, **45**, 385 (1995).

- [7] Dzhumanov S., Karimboev E.X., Djumanov E.X. *Phys. Lett. A*, **380**, 2173 (2016).
- [8] Fossheim K., Nes K., Legreid T., Darlington C.N.W., O'Connor D.A., and Gough C.E. *Int. J. Mod. Phys. B*, 1, 1171 (1988).
- [9] Matsuzaki T., Ido M., Momono N., Dipasupil R.M., Nagata T., Sakai A., and Oda M. *J. Phys. Chem. Solids*, **62**, 29 (2001).
- [10] Ulug A., Ulug A., and Yagbasan R. *Physica C*, 235–240, 879 (1994).
- [11] Tholence J.L., Puech L., Sulpice A., Capponi J.J., Souletie B., Chaillout C., Prejean J.J., Alario-Franco M., Marezio M., de Brion S., Couach M., Monnereau O., Badoche T., Ghorayeb A.M., Boulesteix C., Vad K., and Keszei B. *Physica C*, 235–240, 1545 (1994).
- [12] Ivanenko O. and Mitsen K. *Physica C*, 460–462, 1004 (2007).
- [13] Gulamova D.D., Karimov A.V., Chigvinadze A.V., Ashimov S.M., Magradze S.M., Bobokulov S.Kh., Turdiev Zh.Sh., and Bakhrinov Kh.N. *Zh. Techn. Fiz.*, **89**, 583 (2019).

Сверхтекучая бета-фаза жидкого ^3He

В.В. Дмитриев¹, М.С. Кутузов^{1,2}, А.А. Солдатов¹, А.Н. Юдин¹

¹Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН,

г. Москва, Россия

²Metallurg Engineering Ltd., г. Таллинн, Эстония

Сверхтекучесть ^3He связана с триплетным куперовским спариванием. Параметр порядка сверхтекучего состояния имеет вид комплексной матрицы 3×3 , и теоретически возможны до 18 разных сверхтекучих фаз. В низком магнитном поле в объемном ^3He в зависимости от давления и температуры реализуются только 2 фазы, имеющие при этих условиях наименьшую энергию: B -фаза с изотропной сверхтекучей щелью и A -фаза, сверхтекучая щель которой обращается в нуль в двух точках. В высоком магнитном поле к ним добавляется A_1 -фаза, которая возникает вблизи температуры сверхтекучего перехода (T_c) и отличается от A -фазы на-

личием только куперовских пар $\uparrow\uparrow$ (A -фаза представляет собой конденсат одинакового числа пар $\uparrow\uparrow$ и $\downarrow\downarrow$).

Недавно нашей экспериментальной группой методом ЯМР в низком магнитном поле была открыта новая сверхтекучая фаза ^3He — *полярная* фаза [1]. Эта фаза не реализуется в объемном ^3He , но наблюдается в ^3He , заполняющем нематический аэрогель достаточно высокой плотности. Нематический аэрогель (см. рис. 1) отличается от обычного (изотропного) тем, что его нити ориентированы вдоль выделенного направления [2]. Такой аэрогель приводит к анизотропному рассеянию квазичастиц ^3He [3], что в теории [4] делает более выгодной *полярную* фазу вблизи температуры сверхтекучего перехода. Орбитальный вектор *полярной* фазы фиксируется вдоль нитей, а сверхтекучая щель обращается в нуль на экваторе (в плоскости, перпендикулярной нитям; см. рис. 2).

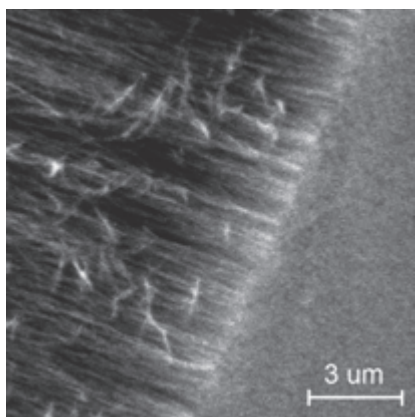


Рис. 1. Фотография СЕМ поверхности нематического аэрогеля

В данной работе с помощью вибрирующей проволоочки с приклеенным к ней образцом нематического аэрогеля, погруженной в жидкий ^3He и помещенной в высокое магнитное поле (вплоть до 10 кЭ), было обнаружено, что сверхтекучий переход в аэрогеле (T_{ca}) расщепляется на два перехода, происходящих при разных температурах ($T_{P2} < T_{ca} < T_{P1}$). Согласно теоретическим предсказаниям [5], в данном температурном ин-

тервале между этими двумя переходами должна наблюдаться другая сверхтекучая фаза — *бета*-фаза. *Бета*-фаза содержит только куперовские пары $\uparrow\uparrow$, в отличие от *полярной* фазы, в которой пары $\uparrow\uparrow$ и $\downarrow\downarrow$ находятся в одинаковом соотношении (аналогия с A - и A_1 -фазами). Мы измерили температурный интервал существования этой новой фазы в зависимости от величины магнитного поля. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с теорией для *бета*-фазы.

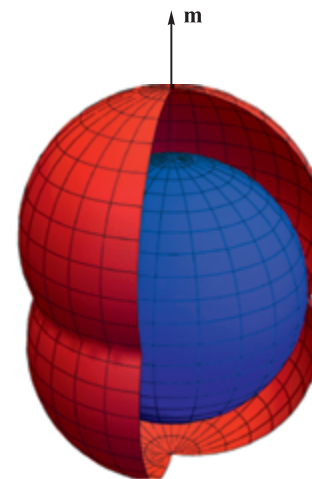


Рис. 2. Энергетическая щель в *полярной* фазе и *бета*-фазе. Направление орбитального вектора \mathbf{m} параметра порядка фиксируется вдоль нитей

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 18-12-00384.

Список литературы

- [1] Dmitriev V.V., Senin A.A., Soldatov A.A., Yudin A.N. *Phys. Rev. Lett.* **115**, 165304 (2015).
- [2] Асадчиков В.Е., Асхадуллин Р.Ш., Волков В.В., Дмитриев В.В., Китаева Н.К., Мартынов П.Н., Осипов А.А., Сенин А.А., Солдатов А.А., Чекрыгина Д.И., Юдин А.Н. *Письма в ЖЭТФ* **101**, 613 (2015).
- [3] Dmitriev V.V., Melnikovskiy L.A., Senin A.A., Soldatov A.A., Yudin A.N. *Письма в ЖЭТФ* **101**, 908 (2015).

- [4] Aoyama K., Ikeda R. *Phys. Rev. B* **73**, 060504 (2006).
[5] Суровцев Е.В. *ЖЭТФ* **155**, 554 (2019).

Свойства полярной фазы ${}^3\text{He}$ в нематическом аэрогеле

В.В. Дмитриев, А.А. Солдатов, А.Н. Юдин*

Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, г. Москва, Россия
*yudin@kapitza.ras.ru

Сверхтекучесть ${}^3\text{He}$ связана с куперовским спариванием с орбитальным моментом и спином пары, равными 1. Такое триплетное спаривание приводит к разнообразию физических свойств и допускает существование множества сверхтекучих фаз с разными волновыми функциями. Однако в слабых магнитных полях в чистом объемном ${}^3\text{He}$ в зависимости от условий (температуры и давления) реализуются две сверхтекучие фазы (A и B), а в сильных магнитных полях в узкой температурной области вблизи температуры сверхтекучего перехода T_c наблюдается еще одна сверхтекучая фаза (A_1). Эксперименты также показывают, что при внесении в жидкий ${}^3\text{He}$ примесей в виде изотропных аэрогелей, нити которых состоят из SiO_2 , область существования сверхтекучести ${}^3\text{He}$ уменьшается и наблюдаются 2 сверхтекучие фазы, аналогичные A и B -фазам объемного ${}^3\text{He}$. Установлено также, что небольшая глобальная анизотропия аэрогеля оказывает ориентирующее влияние на параметры порядка этих фаз, но природа фаз остается прежней. Но согласно теории [1] ситуация может измениться в ${}^3\text{He}$ в нематическом аэрогеле, который состоит из почти параллельных нанонитей. В этом случае вместо A и B -фаз могут стать выгодными новые сверхтекучие фазы: полярная фаза, полярно-искаженная A -фаза и полярно-искаженная B -фаза. Это предсказание было подтверждено в наших экспериментах [2]. Обнаружено, что при охлаждении из нормальной фазы сверхтекучий переход в ${}^3\text{He}$ в нематическом аэрогеле действительно происходит в полярную фазу. При дальнейшем охлаждении могут наблюдаться переходы в полярно-искаженные A и B -фазы.

В докладе дан краткий обзор полученных нами результатов исследований свойств полярной и полярно-искаженной A -фаз, проведенных методами ЯМР с использованием образцов нематических аэрогелей разной пористости (от 78 до 99 %) и, соответственно, с разной степенью анизотропии рассеяния фермиевских квазичастиц в этих образцах (от 1,9 до 6,7).

Список литературы

- [1] Aoyama K. and Ikeda R. *Phys. Rev. B*, **73**, 060504 (2006).
[2] Dmitriev V.V., Senin A.A., Soldatov A.A., Yudin A.N. *Phys. Rev. Lett.*, **115**, 165304 (2015).
[3] Дмитриев В.В., Солдатов А.А., Юдин А.Н. *ЖЭТФ*, **158**, 6 (2020).

Multipolar spin structure in the pseudogap phase of high- T_c superconductor $\text{HgBa}_2\text{CuO}_4$: magnetic symmetry and *ab initio* simulations

V.E. Dmitrienko*, V.A. Chizhikov

*A.V. Shubnikov Institute of Crystallography,
FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Moscow, Russia*

*E-mail: dmitrien@crys.ras.ru

A possible intra-unit-cell magnetic ordering in the so-called pseudogap state of different high- T_c superconductors is discussed for many years (see recent surveys [1, 2] and references therein). Very exotic theoretical models were suggested but they are still controversial. The most popular are different variants of the loop-current model [2]. Another idea is that the magnetic order could be related with oxygen ions [3]. Experimentally, it is very difficult to study any details of weak antiferromagnetic-type order when the magnetic unit cell coincides with the atomic one.

In this report, we suggest a reasonable magnetic symmetry of the intra-unit-cell spin arrangement and perform *ab initio* simulations with QUANTUM

ESPRESSO DFT package for a typical high- T_c superconductor $\text{HgBa}_2\text{CuO}_4$ (no doping!). Our main idea is that the atoms in highly symmetrical positions should have **zero** dipole magnetic moments but could have **non-zero** higher multipolar moments (toroidal, *etc.*). It was found that the considered magnetic phase is energetically more favorable than the non-magnetic state. We have also calculated the magnetic structure factors for many reflections and have compared them with available neutron diffraction data. Similar ideas and simulations were previously used in [4] for the hidden order in URu_2Si_2 .

This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the State assignment FSRC “Crystallography and Photonics” RAS.

References

- [1] Bourges P., Bounoua D., Jeong J., Mangin-Thro L., Sidis Y. Evidence for Intra-Unit Cell Magnetism in Superconducting Cuprates: a Technical Assessment, *Journal of Physics: Conference Series*, **1316**, 012003 (2019).
- [2] Bourges P., Bounoua P., Sidis P. Loop currents in quantum matter, *Comptes Rendus, Physique*, **22**, 1–25 (2021); <https://doi.org/10.5802/crphys.84>
- [3] Moskvin P. Pseudogap phase in cuprates: Oxygen orbital moments instead of circulating currents, *JETP Letters*, **96**, 385 (2012).
- [4] Dmitrienko V.E., Chizhikov V.E. Hidden order in URu_2Si_2 : Symmetry-induced antitoroidal vortices, *Phys. Rev. B*, **98**, 165118 (2018).

Свойства сверхпроводящего состояния в трехзонной модели

А.Е. Каракозов

Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина,

г. Москва, г. Троицк, Россия

E-mail: chkara@rambler.ru

Исследование свойств железосодержащих сверхпроводников (далее — ферропниктиды, ФП) в принципе позволяет определить величину корреляционных эффектов в ФП, прямо связанных со спин-флуктуа-

ционным (СФ) взаимодействием электронных (e) зон с центрами в точках $X = (\pi, 0)$ и $Y = (0, \pi)$ и дырочных (h) зон, центрированных в точке Γ . Для корректного исследования роли СФ-взаимодействия необходимо учитывать до пяти зон на поверхности Ферми (и слишком большое число параметров). Неизбежные при этом упрощения могут приводить к прямо противоположным результатам оценки СФ-взаимодействия в различных подходах, поэтому возникает необходимость использования упрощенных вариантов теории, позволяющих тем не менее описать надежно установленные общие свойства ФП, включая допинговую эволюцию (фазовую диаграмму) ФП. Ранее уже обсуждалась недостаточность для этих целей «минимальной» модели, учитывающей только две взаимодействующие изотропные s -зоны e и h [1, 2]. Предлагаемая 3-зонная модель рассматривает две h -зоны, взаимодействующие с e -зоной посредством модельного СФ-взаимодействия. Последнее учитывает основные установленные свойства СФ-взаимодействия $V_{\text{SF}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$: $s+d$ -симметрию, зависимость от волнового вектора, зависимость интенсивности СФ-взаимодействия g от близости к антиферромагнитному (АФМ) переходу и малость размеров e - и h -карманов. Для межзонного e - h -рассеяния на большие волновые векторы $\mathbf{k}_e - \mathbf{k}_h \sim$ АФМ вектора \mathbf{Q} СФ взаимодействие $V_{\text{SF}}(\mathbf{k}_e, \mathbf{k}_h')$ принимается равным $V_{\text{SF}} \approx g(x)$ и для внутризонного e - e -рассеяния на малые волновые векторы $k_e, k_e' \ll Q$ $V_{\text{SF}}(\mathbf{k}_e, \mathbf{k}_e') \approx \pm g(x) \cos(2\varphi_{XY}) \cos(2\varphi'_{XY})$, где x — мера близости к АФМ переходу. Межзонное электрон-фононное взаимодействие $U(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ считается малым по сравнению с V_{SF} , а внутризонное, с учетом малости размеров карманов и условия симметрии, считается изотропным и одинаковым для всех зон $U(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \approx u$. В соответствии с этим внутризонные спаривающие взаимодействия в e -зоне $V_e(\varphi_{XY}, \varphi'_{XY}) = u(1 \pm d \cos 2\varphi_{XY})(1 \pm d \cos 2\varphi'_{XY})$, где φ и φ' — полярные углы, отсчитываемые от k_x/y , а d — коэффициент анизотропии: $d^2 = 2x$. Величина $x = g/u$ отношения межзонного СФ-взаимодействия g к внутризонному u рассматривается как аналог меры близости к АФМ-переходу или допинговой зависимости в ФП. Решения 3-зонной системы уравнений с модельным взаимодействием $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ для $t = T/T_c$ записывается как $\Delta_{1h,2h}(t)$ для дырочных h -щелей и $\Delta_c(\varphi, t) = \Delta_c(t)(1 + D(x,t) \cos 2\varphi)$, причем коэффици-

ент анизотропии e -щели $D(x,t)$ и из-за перенормировки межзонными s -взаимодействиями отличается от анизотропии взаимодействия спаривания d . Отметим, что в рассматриваемой модели *всего 4 параметра*. Используя подобный подход, мы исследовали роль СФ-взаимодействия в сверхпроводимости семейства $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ [1, 2].

Многозонные сверхпроводники имеют некоторые «непривычные» особенности. «Привычные» безразмерные отношения теории БКШ для энергетических щелей, скачка электронной теплоемкости и некоторые подобные соотношения для них уже не являются универсальными даже при слабой связи. Здесь мы остановимся на наблюдаемом в туннельных экспериментах сильном отклонении зависимости доминирующей щели $\Delta_L(x_{\text{орб}}, t)/\Delta_L(x_{\text{орб}}, 0)$ от универсальной зависимости щели в модели БКШ $\delta_0(t)$ в оптимально допированных ФП с максимальным СФ-взаимодействием [3]. В 2-зонной модели с независимыми параметрами такая «аномалия» объясняется слабым межзонным взаимодействием с константами связи $\lambda_{SL}, \lambda_{LS} \ll \lambda_{LL}, \lambda_{SS}$ при условии, что плотность состояний в e -зоне много больше, чем в h -зоне ($\gamma_S \gg \gamma_L$) и $\lambda_{LL} \sim \lambda_{SS}$ [3]. Однако первое соотношение противоречит наблюдаемому в ФП монотонному уменьшению (несмотря на заполнение e -зоны при увеличении допинга) полной плотности состояний $\gamma_n(x)$ в передопированном режиме $x > x_{\text{орб}}$, указывающему на малость плотности состояний в e -зоне (т. е. $\gamma_S \ll \gamma_L$). Второе же означает, что взаимодействие внутризонного спаривания в e -зоне, в отличие от h -зоны, очень мало ($V_{SS} \ll V_{LL}$), что довольно необычно.

Поэтому, по нашему мнению, формальное применение минимальной модели для определения параметров сверхпроводящего спаривания в ФП не слишком надежно. В рассматриваемой модели указанная аномалия имеет место в случае достаточно сильного СФ-взаимодействия $g \sim u$, $x = 0,9$, анизотропии электронной щели $\sim 20\%$ и минимальной плотностью состояний в e -зоне. На рис. 1 показана зависимость нормированных щелей $\Delta_i(t)/\Delta_m(0)$ (1 и 3 — дырочные, 2 — электронная щели) для этого случая в сопоставлении с нормированной полной плотностью состояний (рис. 2) и плотностью состояний в e -зоне (рис. 3) при $t \rightarrow 0$ для изотропного и анизотропного сверхпроводников с одинаковыми щелями. Ри-

сунки показывают, что аномалия имеет место для сильного анизотропного СФ-взаимодействия, а также указывают на сложность интерпретации туннельных спектров ФП с анизотропной e -щелью, т. к. максимум в $N_e(\omega)$ (и его температурная зависимость) не совпадает с $\Delta_e(t)$ на величину порядка анизотропии e -щели.

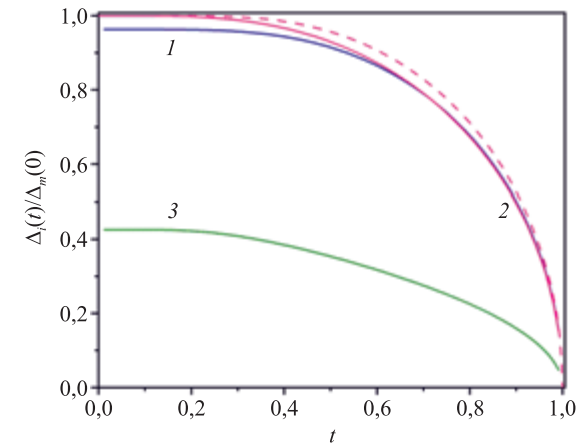


Рис. 1

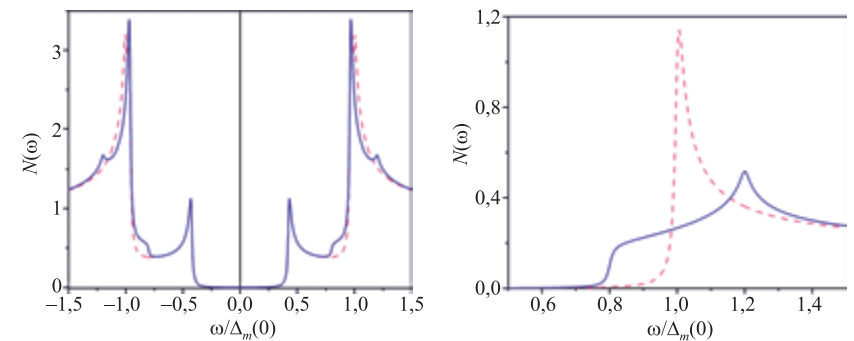


Рис. 2

Рис. 3

Список литературы

- [1] Karakozov A.E., Zapf S., Gorshunov B., Ponomarev Ya.G., Magnitskaya M.V., Zhukova E., Prokhorov A.S., Anzin V.B., Haindl S. *Phys. Rev. B*, **90**(1). P. 014506 (2014). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.014506>
- [2] Karakozov A.E., Magnitskaya M.V., Kadyrov L.S., Gorshunov B.P. *Phys. Rev. B*, **99** (5). P. 054504 (2019). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.054504>
- [3] Кузьмичева Т.Е., Кузьмичев С.А., Михеев М.Г., Пономарёв Я.Г., Чесноков С.Н., Пудалов В.М., Хлыбов Е.П., Жигadlo Н.Д. *УФН*, **184**. № 8. С. 888 (2014). DOI: 10.3367/UFNr.0184.201408i.0888

Трещелевая сверхпроводимость LiFeAs: прямое экспериментальное наблюдение методами спектроскопии многократных андreeвских отражений

С.А. Кузьмичев^{1,2,*}, Т.Е. Кузьмичева¹, И.В. Морозов¹,
А.И. Болтали¹, А.И. Шилов^{1,2}

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

²Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, г. Москва, Россия
*E-mail: kuzmichev@mig.phys.msu.ru

Сверхпроводящие (СП) пниктиды на основе щелочных металлов LiFeAs относятся к структурному типу 111. LiFeAs обладает критической температурой до $T_c \approx 17\text{--}18$ К в стехиометрическом составе и демонстрирует ряд уникальных свойств (в качестве обзора см. [1]). При дефиците Li или замещении железа атомами переходными металлами сверхпроводимость LiFeAs разрушается. На поверхности Ферми сосуществуют два концентрических дырочных цилиндра в Γ -точке зоны Бриллюэна и электронные цилиндры в M-точке [1, 2]. В отличие от большинства пниктидов стехиометрический LiFeAs немагнитен, а нестинг поверхностей Ферми отсутствует.

Из-за наличия активного щелочного металла СП-свойства LiFeAs быстро деградируют в присутствии даже следовых количеств воды, кислорода или азота. Сложность работы с LiFeAs обуславливает крайне малое количество экспериментальных данных о свойствах этого соединения, опубликованных в мире на данный момент.

В наших исследованиях использовались монокристаллы LiFeAs, синтезированные методом «раствор в расплаве» [3]. Подготовка и монтаж образцов проводились в перчаточном боксе в атмосфере «сухого» аргона для предотвращения деградации материала.

Для прямого определения энергетических СП-параметров использовался метод спектроскопии эффекта многократных андreeвских отражений (incoherent multiple Andreev reflection effect, IMARE) в контактах «сверхпроводник – тонкий нормальный металл – сверхпроводник» (SnS) с некогерентным транспортом. В контактах с высокой прозрачностью NS-интерфейсов (> 80 %) IMARE проявляется в виде избыточного тока во всем диапазоне смещений, а также минимумов динамической проводимости $dI(V)/dV$ на смещениях $eV_n(T) = 2\Delta(T)/n$, где Δ — величина СП-параметра порядка, а $n = 1, 2, \dots$, которые составляют субгармоническую щелевую структуру [4, 5].

В случае анизотропной СП-щели для расширенного s -волнового типа симметрии СП-параметра порядка (в пространстве импульсов) ожидаются дублетные минимумы $dI(V)/dV$, положения которых соответствуют экстремумам распределения $\Delta_j(\theta)$ — максимальной и минимальной энергии связи куперовских пар в зоне j в зависимости от угла θ в k -пространстве (см. раздел 3.2 и рис. 4 из [6]).

Планарные SnS-контакты создавались при 4,2 К с помощью техники break-junction. Данный метод позволяет локально и напрямую определять величины и температурные зависимости объемных СП-параметров порядка. Преимущества и недостатки методики, детали эксперимента подробно описаны в обзоре [6].

Проведены исследования более 100 SnS-контактов в монокристаллах LiFeAs, полученных из одной закладки [1, 7]. В нормальном состоя-

нии вплоть до $T = 80\text{--}100$ К транспортные характеристики $I(V)$ и $dI(V)/dV$ получаемых контактов воспроизводимо демонстрировали сильную нелинейность, вызванную *объемными* свойствами и не связанную со сверхпроводимостью. Данная нелинейность может быть следствием пика плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми в LiFeAs.

На $I(V)$ -характеристиках ниже T_c наблюдался избыточный андреевский ток и отсутствовали гистерезис и сверхтоковая ветвь, что говорит о реализации IMARE [4, 5]. Андреевские структуры на $dI(V)/dV$ -спектрах соответствуют как минимум трем СП-параметрам порядка [1,7]. Для большой (Δ_Γ) и средней (Δ_L) СП-щелей воспроизводимо наблюдались дублетные $dI(V)/dV$ -минимумы, предположительно связанные с анизотропией Δ_Γ и Δ_L в xy -плоскости импульсного пространства. Напрямую определенные при $T \ll T_c$ экстремумы анизотропных СП-щелей в среднем составляют $\Delta_\Gamma^{\text{out}} \approx 5,8$ мэВ и $\Delta_\Gamma^{\text{in}} \approx 5,0$ мэВ (анизотропия $\sim 14\%$), $\Delta_L^{\text{out}} \approx 3,2$ мэВ и $\Delta_L^{\text{in}} \approx 2,2$ мэВ (анизотропия $\sim 32\%$). Для малой сверхпроводящей щели $\Delta_S \approx 1,2$ мэВ признаков анизотропии не наблюдалось. По данным ARPES [2], большая СП-щель открывается на внутреннем цилиндре поверхности Ферми в Γ -точке, средняя щель — в электронных зонах, а малая — на внешнем Γ -цилиндре.

Разброс значений $\Delta_j(0)$, наблюдаемый на верхней панели рис. 1, вызван разбросом локальных $T_c = 15,0\text{--}17,5$ К исследованных SnS-контактов, что может быть связано с локальным дефицитом $\text{Li}_{1-\delta}$ в контактной области. В то же время, разброс характеристических отношений $2\Delta_j(0)/(k_B T_c)$ (нижняя панель, рис. 1) значительно меньше, что говорит о скейлинге $\Delta_j(0)$ и T_c в исследованном диапазоне T_c .

Напрямую полученные температурные зависимости СП-щелей, приведенные на рис. 2, лежат ниже однозонных БКШ-образных функций (показана пунктиром для $\Delta_\Gamma^{\text{out}}$) и типичны для случая умеренного межзонного взаимодействия. Степени анизотропии Δ_L и Δ_Γ остаются примерно постоянными вплоть до T_c .

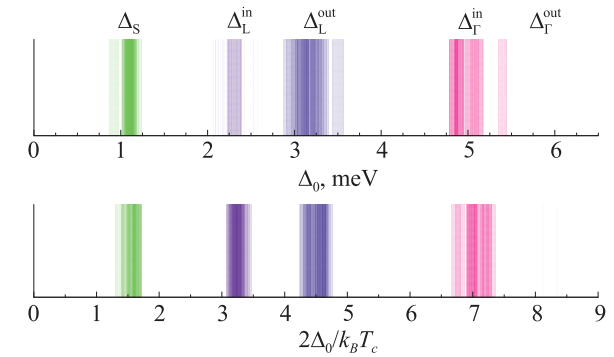


Рис. 1. Гистограммы величин энергетических СП-параметров $\Delta_j(0)$ при $T \ll T_c$. Локальные $T_c = 15,0\text{--}17,5$ К. Интенсивность цвета соответствует вероятности наблюдения величин $\Delta_j(0)$ и $2\Delta_j(0)/(k_B T_c)$

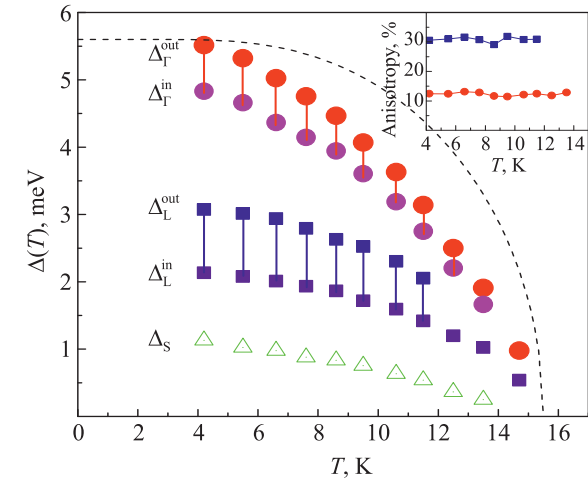


Рис. 2. Температурные зависимости энергетических СП-параметров LiFeAs. Цвета для Δ_j соответствуют таковым с рис. 1. Вставка — температурные зависимости анизотропии большой Γ - (красные кружки) и средней L- (синие квадраты) СП-щелей

Список литературы

- [1] Kuzmicheva T.E., Kuzmichev S.A. *JETP Lett.*, **114**, 630 (2021).
 [2] Borisenko S.V. et al. *Symmetry*, **4**, 251 (2012).
 [3] Morozov I. et al. *Cryst. Growth Des.*, **10**, 4428 (2010).
 [4] Octavio M. et al. *Phys. Rev. B*, **27**, 6739 (1983).
 [5] Kümmel R. et al. *Phys. Rev. B*, **42**, 3992 (1990).
 [6] Kuzmichev S.A., Kuzmicheva T.E., *Low Temp. Phys.*, **42**, 1008 (2016).
 [7] Kuzmicheva T.E. et al. *JETP Lett.*, **111**, 35 (2020).

Эволюция сверхпроводящего параметра порядка с электронным допированием в арсенидах и селенидах железа семейства 122 методами спектроскопии многократных андреевских отражений

Т.Е. Кузьмичева^{1,*}, С.А. Кузьмичев^{1,2}, К.С. Перваков¹, В.А. Власенко¹,
И.В. Морозов¹, А.И. Болталин¹, А.И. Шилов¹

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

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН,
г. Москва, Россия

*E-mail: kuzmichevate@lebedev.ru

Железосодержащие сверхпроводники (СП) структурного типа 122 состоят из СП-блоков FeAs или FeSe, чередующихся вдоль с-направления с блоками щелочных или щелочноземельных металлов. Допированные пниктиды $\text{Ba}(\text{Fe},\text{Ni})_2\text{As}_2$ [1] имеют критические температуры СП-перехода до $T_c \approx 21$ К. На поверхности Ферми сосуществуют дырочные цилиндры вокруг Г-точки зоны Бриллюэна и электронные цилиндры в М-точке, на которых ниже T_c образуются несколько СП-конденсатов. Напротив, в селенидах $(\text{K},\text{Na})\text{Fe}_2\text{Se}_2$ T_c составляет около 30 К, а дырочные

листы поверхности Ферми имеют исчезающе малый фазовый объем (в качестве обзора см. [2]). Кроме того, монокристаллы 122-Се демонстрируют естественное фазовое расслоение — сосуществование как минимум трех пространственно разделенных фаз с объемным содержанием СП-фазы около 15 %.

В работе исследована структура СП-параметра порядка в монокристаллах слоистых железосодержащих пниктидов $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ недо-, пере- и оптимально допированных составов в диапазоне $x = 0,08\text{--}0,16$ и $T_c = 8\text{--}20$ К. Образцы выращены в Центре им. Гинзбурга ФИАН [1]. Также приводятся первые данные по железосодержащему селениду $(\text{K},\text{Na})_{0,8}\text{Fe}_{1,6}\text{Se}_2$ с критическими температурами $T_c = 25\text{--}30$ К, монокристаллы которого были выращены на химическом факультете МГУ им. Ломоносова. Синтез проходил методом «раствор в расплаве» [2].

Для прямого определения сверхпроводящих энергетических параметров использовался метод спектроскопии эффекта многократных андреевских отражений (incoherent multiple Andreev reflection effect, IMARE) в контактах «сверхпроводник – тонкий нормальный металл – сверхпроводник» (SnS) с некогерентным транспортом. При высокой прозрачности NS-интерфейсов (> 80 %) IMARE проявляется в виде избыточного тока во всем диапазоне смещений, а также минимумов динамической проводимости $dI(V)/dV$ на смещениях $eV_n(T) = 2\Delta(T)/n$, где Δ — величина сверхпроводящего параметра порядка, а $n = 1, 2, \dots$ [3, 4]. В случае анизотропной сверхпроводящей щели (расширенный s-волновой тип симметрии) ожидаются дублетные минимумы $dI(V)/dV$, положения которых соответствуют экстремумам $\Delta(\theta)$ — максимальной и минимальной энергии связи куперовских пар в данной зоне в зависимости от угла θ в k-пространстве [5]. Планарные SnS-контакты создавались при 4,2 К с помощью техники break-junction. Преимущества и недостатки методики, детали эксперимента подробно описаны в обзоре [5].

Исследования $\text{BaFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ методом IMARE спектроскопии [1, 6, 7] показали двухщелевую объемную сверхпроводимость и существование анизотропной большой щели с пороговыми значениями Δ_L^{out} и Δ_L^{in} и изотропной малой щели Δ_S , примерно линейно связанных с T_c (рис. 1,а). Их

характеристические отношения $2\Delta_L^{\text{out}}(0)/(k_B T_c) \approx 6$, $2\Delta_L^{\text{in}}(0)/(k_B T_c) \approx 4$ и $2\Delta_S(0)/(k_B T_c) \approx 2$ практически не меняются во всем исследованном диапазоне T_c при вариации допирования (рис. 1,б). Температурные зависимости СП-щелей типичны для случая умеренной межзонной связи,

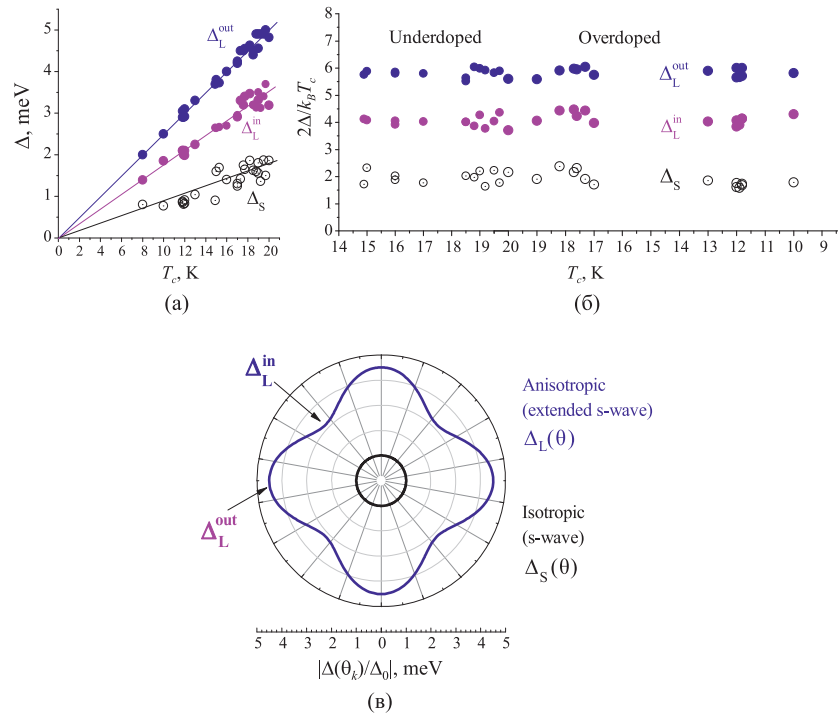


Рис. 1. Зависимость сверхпроводящих параметров порядка $\Delta_i(0)$ (а) и их характеристических отношений (б) от T_c для недо-, пере- и оптимально допированных монокристаллов $\text{Ba}(\text{Fe},\text{Ni})_2\text{As}_2$. Максимальная и минимальная энергии связи куперовских пар в конденсате с анизотропной большой щелью обозначены как Δ_L^{out} и Δ_L^{in} , соответственно. Δ_S — малая СП-щель. (в) Схематически приведено вероятное угловое распределение Δ_L и Δ_S в импульсном пространстве

а анизотропия большой щели (т. е. отношение величин, соответствующих синим и фиолетовым кружкам на рис. 1,а,б) не зависит от температуры, степени допирования и, соответственно, T_c . Возможное распределение энергии связи куперовских пар в конденсате с анизотропной большой щелью $\Delta_L(\theta)$ в пространстве импульсов схематически показано на рис. 1,в.

В монокристаллах $(\text{K},\text{Na})_{0,8}\text{Fe}_{1,6}\text{Se}_2$ с $T_c = 25\text{--}30$ К установлено наличие двух объемных СП-параметров порядка $\Delta_1(0) = 7,5\text{--}7,8$ мэВ и $\Delta_2(0) = 4,5\text{--}5,0$ мэВ. Определены соответствующие характеристические отношения 6,1–6,5 и 3,7–4,0, близкие к таковым в $\text{BaFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$.

Зависимости $\Delta_1(T)$ и $\Delta_2(T)$ в 122-Se проходят ниже однозонных БКШ-образных функций, однако имеют разный температурный ход: большая щель закрывается с ростом T быстрее, чем малая. Такая форма зависимостей $\Delta_{1,2}(T)$ воспроизводится для различных образцов.

В нормальном состоянии ВАХ контактов сильно нелинейны. Подобная форма воспроизводится, не зависит от нормального сопротивления и площади контакта, числа контактов в стопке. Поскольку вид ВАХ туннельного контакта определяется распределением электронной плотности состояний $N(E)$ вблизи уровня Ферми, можно предположить, что $N(E)$ в селениде $(\text{K},\text{Na})_{0,8}\text{Fe}_{1,6}\text{Se}_2$ также нелинейна, что является следствием особенностей зонной структуры вблизи уровня Ферми.

Список литературы

- [1] Kuzmicheva T.E. et al. *Phys. Rev. B*, **104**, 174512 (2021).
- [2] Roslova M. et al. *CrystEngComm.*, **16**, 6919 (2014).
- [3] Octavio M. et al. *Phys. Rev. B*, **27**, 6739 (1983).
- [4] Kümmel R. et al. *Phys. Rev. B*, **42**, 3992 (1990).
- [5] Kuzmichev S.A., Kuzmicheva T.E. *Low Temp. Phys.*, **42**, 1008 (2016).
- [6] Kuzmicheva T.E. et al. *Phys. Rev. B*, **97**, 235106 (2018).
- [7] Kuzmicheva T.E. et al. *JETP Lett.*, **112**, 786 (2020).

Сверхпроводимость органометаллических фуллеридов $M_{(3-n)}(NR_4)_n C_{60}$, $M = K, Rb$; $R = H, D, Me, Et, Bu$; $n = 1, 2, 3$

В.А. Кульбачинский, Н.С. Ёжиков, Б.М. Булычев

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

Проблема существования в индивидуальном состоянии «комплексных металлов» состава $[ФX_4]_n$, где $Ф = N, P, As$; $X = H, Alk$, и определение их «металличности» обсуждаются с конца XIX века. За прошедшие годы были использованы все возможные способы их синтеза с применением физических, химических, электрохимических методов воздействия, но ни один из них не привел к получению этих веществ в индивидуальном состоянии, кроме зарегистрированного факта образования крайне неустойчивой амальгамы аммония [1]. В то же время успехи в области синтеза неорганических веществ с металлами в необычных степенях окисления показали, что они могут быть получены и сохранены либо в наноразмерных матрицах типа цеолитов и углей, слоистых соединений типа графита, либо путем окружения объемными полидентатными лигандами. Таким образом, в качестве таких матриц может выступать любое достаточно инертное по отношению к молекуле-гостю вещество, имеющее в своей структуре полость соответствующего размера, например фуллерит $(C_{60})_n$.

Возможность внедрения тех или иных атомов металлов в ГЦК решетку фуллерита, с последующим образованием кристаллических веществ (фуллеридов), в основном определяется несколькими факторами — потенциалом ионизации атома металла, температурой его плавления или температурой испарения. Их размер менее существенен, поскольку размер октаэдрической пустоты, при условии сохранения ГЦК-решетки фуллерита, характерной не для всех сверхпроводящих фуллеридов, допускает размещение в ней всех металлов периодической системы, а тетраэдрические — многих, и даже без существенного ее расширения. В настоящее время известны несколько десятков фуллеридов с переход-

ными и непереходными металлами и нейтральными молекулами. Среди них гомо- и гетерофуллериды щелочных металлов, имеющие наивысшие потенциалы ионизации и наибольшие температуры перехода в сверхпроводящее состояние [2–8], гомофуллериды щелочноземельных металлов [2–5], гетерофуллериды щелочных и переходных металлов [6–11], фуллериды редкоземельных металлов [12, 13] и фуллериды с нейтральными молекулами (с аммиаком [14–19]).

Учитывая размер и свойства катиона NH_4^+ , в [20] было предсказано существование сверхпроводящего фуллерида состава $(NH_4^+)_3C_{60}^{3-}$ с энтальпией образования $H_f = -1,82$ эВ/моль (для реально существующего фуллерида K_3C_{60} $H_f = -6,27$ эВ/моль). Более объемные тетраалкиламмонийные основания также могут образовывать комплексы с фуллереном.

В представленной работе изучены сверхпроводящие свойства гомо- и гетерофуллеридов калия и рубидия с аммонием и аммониевыми основаниями (тетраметиламмоний, тетраэтиламмоний и тетрабутиламмоний — метилMe, этилEt, бутилBu), а также изотопический эффект в гомофуллеридах с аммонием составов $K_{1-x}(NR_4)_x C_{60}$ и $Rb_{1-x}(NR_4)_x C_{60}$ ($R = H, D$). Синтез осуществляли обменной реакцией триметаллических фуллеридов калия и рубидия с хлоридом аммония и галогенидами аммонийных оснований в среде толуола. Все сверхпроводники кристаллизуются в кристаллических ГЦК-решетках с увеличенными параметрами кристаллической решетки a по сравнению с исходными известными сверхпроводниками K_3C_{60} и Rb_3C_{60} . Однако, несмотря на это, температуры сверхпроводящего перехода этих веществ оказались ниже, чем у исходных фуллеридов (18,5 К для K_3C_{60} и 29 К для Rb_3C_{60}): $T_c = 14–16$ К для фуллеридов с калием и $T_c = 19–20$ К для фуллеридов с рубидием. Это можно объяснить низкой «металличностью» аммония и интеркалатов аммониевых оснований по сравнению с истинными металлами. Образование ион-радикальных солей с аммонием и его алкилпроизводными в фуллеридах демонстрирует возможность стабилизации этих молекул путем интеркаляции в матрицы с подходящими свойствами. Мы исследовали изотопический эффект, сверхпроводимость в образцах $Rb_2NH_4C_{60}$ и $Rb_2ND_4C_{60}$ с заменой водорода на дейтерий в аммонии, а также

в $K_2NH_4C_{60}$ и $K_2ND_4C_{60}$. Температура сверхпроводящего перехода не изменилась при замене Н на D в пределах точности измерения. Отсюда можно сделать вывод, что основную роль в сверхпроводимости играют фононы, связанные с молекулой C_{60} . Впервые синтезирован сверхпроводник $(NH_4)_3C_{60}$ с $T_c = 16,4$ К.

Список литературы

- [1] Стишов С.М. *УФН*, **125**, №3, 731 (1978).
- [2] Hebard A.F., Rosseinsky M.J., Haddon R.C., Murhy D.W., Glarum S.H., Palstra T.T.M., Ramirez A.P. & Kortan A.R. *Nature*, **350**, 600 (1991).
- [3] Stephens P.W., Mihaly L., Lee P.A., Whetten R.L., Huang S.M., Kaner R., Diederich F. & Holczer K. *Nature*, **351**, 632 (1991).
- [4] Gunnarsson O. *Rev. Mod. Phys.*, **69**, 575 (1997).
- [5] Palstra T.T.M., Zhou O., Iwasa Y., Sulewski P.E., Fleming R.M. and Zegarski B.R. *Solid State Commun.*, **93**, 327 (1995).
- [6] Lunin R.A., Velikodny Y.A., Bulychev B.M., Kulbachinskii V.A. *Polyhedron*, **102**, 664 (2015).
- [7] Бульчев Б.М., Лунин Р.А., Кульбачинский В.А., Шпанченко Р.В., Привалов В.И. *Известия Академии наук. Серия химическая*, **33**, № 8, 1623 (2004). [English translation: Bulychev B.M., Lunin R.A., Kul'bachinskii V.A., Shpanchenko R.V., Privalov V.I., *Russ. Chem. Bull., Int. Ed.*, **53**, 1686 (2004)].
- [8] Bulychev B.M., Kulbachinskii V.A., Lunin R.A., Kytin V.G., Velikodny Yu.A. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, **18**, 381 (2010).
- [9] Кульбачинский В.А., Лунин Р.А., Качан И.П., Великодный Ю.А., Тарасов В.П., Бульчев Б.М. *ФНТ*, **39**(1), 76–85 (2013). [English translation: Kulbachinskii V.A., Lunin R.A., Kachan I.P., Velikodnyi Yu.A., Bulychev B.M., Tarasov V.P., *Low Temp. Physics*, **39**, 58–65 (2013)].
- [10] Kulbachinskii V.A., Ezhikov N.S., Lunin R.A., and Bulychev B.M. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, **28**, No. 3, 168 (2020).
- [11] Kulbachinskii V.A., Bulychev B.M., Kytin V.G., Krechetov A.V., Konstantinova E.A., Lunin R.A. *Advances in Condensed Matter Physics, Hindawi Publishing Corporation*, V.2008, 941372/6 (2008). DOI: 10.1155/2008/941372
- [12] Ozdas E., Kortan A.R., Kopylov N., Ramirez N., Siegrist T., Rabe K.M., Bair S., Schuppler S. & Citrin P.H. *Nature*, **375**, 126–129 (1995).

- [13] Chen X.H. & Roth G. *Phys. Rev. B*, **52**, 15534–15536 (1995).
- [14] Rosseinsky M.J., Murphy D.W., Fleming R.M. & Zhou O. *Nature*, **364**, 425 (1993).
- [15] Iwasa Y., Shimoda H., Palstra T.T.M., Maniwa Y., Zhou O., Mitani T. *Phys. Rev. B*, **53**, R8836(R) (1996).
- [16] Zhou O., Palstra T.T.M., Iwasa Y., Fleming R.M., Hebard A.F., Sulewski P.E., Murphy D.W., and Zegarski B.R. *Phys. Rev. B*, **52**, 483 (1995).
- [17] Shimoda H., Iwasa Y. & Mitani T. *Synth. Met.*, **85**, 1593 (1997).
- [18] Zhou O., Fleming R.M., Murphy D.W., Rosseinsky M.J., Ramirez A.P., van Dover R.B. & Haddon R.C. *Nature*, **362**, 433 (1993).
- [19] Shimoda H., Iwasa Y., Miyamoto Y., Maniwa Y. & Mitani T. *Phys. Rev. B*, **54**, 15653 (1996).
- [20] Ruoff R.S. *J. Phys. Chem.*, **100**, 8973 (1996).

О проблеме реализации комнатнотемпературной сверхпроводимости в сильно коррелированных электронных системах

Л.С. Мазов

ФИЦ «ИПФ РАН»: ИФМ РАН, г. Нижний Новгород, Россия

Как известно, В.Л. Гинзбург рассматривал проблему комнатнотемпературной сверхпроводимости (КТСП) как вторую по важности после проблемы термоядерного синтеза. В последнее время появились сообщения, в которых, по мнению авторов, была достигнута КТСП в гидридах при сверхвысоких давлениях. Такие утверждения были сделаны на основе наблюдения резкого спада электросопротивления при понижении температуры до $T \sim 300$ К. Они привлекли большой интерес как в научной литературе, так и в СМИ (появилась даже статья об этом «открытии» в *New York Times*). В настоящее время в литературе идет острая дискуссия о достоверности измерений магнитной восприимчивости, подтвер-

ждающих «сверхпроводящую» природу фазового перехода при $T \sim 300$ К. Однако даже резистивные данные, представленные на рисунках в этих работах, не соответствуют подписям к рисункам. Например, на рис. 1 представлен спад сопротивления в нормальном состоянии для соединения C–S–H при сверхвысоком давлении ($R = 1,75 \rightarrow 0,1$ Ом (т. е. $R > 0$)). В то же время из подписи к рисунку следует, что это «сверхпроводящий» переход с критической температурой, близкой к комнатной: $T_c \sim 7$ °С. Такая ситуация может свидетельствовать, что авторы этих и других недавних работ по исследованию возможной «сверхпроводимости» в гидридах считают, что признаком перехода системы в «сверхпроводящее» состояние является резкий спад сопротивления, а не «исчезновение» сопротивления после резистивного перехода, как это следует из определения понятия «сверхпроводящий переход» (см., например, [2]). Другими словами, это означает, что резистивный переход в гидридах в этой области температур носит несверхпроводящий (диэлектрический) характер (ср. с [3]). Позднее к такому же выводу независимо пришли и авторы работы [4].

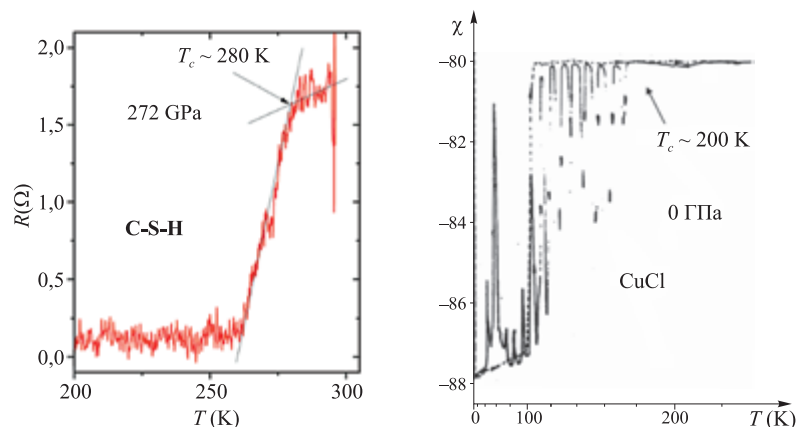


Рис. 1. Сверхпроводящий переход при 272 GPa. T_c был определена по возникновению сверхпроводимости (см. стрелку) (см. [1] ExtData, Fig. 4)

Рис. 2. Температурная зависимость магнитной восприимчивости в CuCl (см., например, [5])

Ввиду такой ситуации необходимо заметить, что аналогичные явления резкого спада сопротивления на несколько порядков и магнитной восприимчивости при $T \sim 200$ К наблюдались и ранее (рис. 2). Эти результаты вызвали в то время значительный интерес, однако после широкого обсуждения в литературе вывода о «сверхпроводящем характере» этих высокотемпературных спадов не было получено. Более того, было сделано предположение об экситонном характере этих явлений. Соответствующая теория к тому времени уже появилась, В этой теории, построенной на модели фазового перехода «металл–диэлектрик» (Келдыш–Кобаев, 1964), было показано, что в системах с сосуществованием диэлектрического ($e-h$) и сверхпроводящего ($e-e$) спариваний, с понижением T , первым происходит диэлектрический фазовый переход с частичной диэлектризацией поверхности Ферми — остальная часть поверхности Ферми остается свободной для сверхпроводящего спаривания. Причем T_c повышается за счет роста плотности состояний на краях диэлектрической щели.

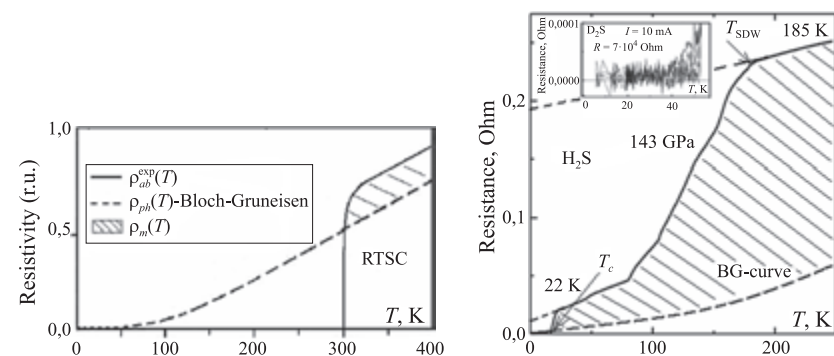


Рис. 3. Температурная зависимость резистивного перехода в сероводороде при сверхвысоких давлениях (см., например, [3])

Рис. 4. Резистивный переход в сероводороде при сверхвысоких давлениях (см., например, [3])

Интересно, что фактически такая последовательность диэлектрического и только затем сверхпроводящего фазовых переходов реализуется в высокотемпературных купратных сверхпроводниках. В качестве ди-

электрического фазового перехода здесь выступает магнитный (АФ ВСП) фазовый переход в CuO_2 -плоскости (подробнее см. в [6]). В результате этого перехода на симметричных участках поверхности Ферми допированных купратов образуется псевдощель (диэлектрическая щель), что приводит к умеренному росту T_c . Кроме того, в CuO_2 -плоскости формируется последовательность проводящих, зарядовых (С) и полуизолирующих, спиновых (S) нанострайпов (~ 1 нм), характерная энергия СТ-экситонов в которых порядка ~ 2 эВ [7]. Эти параметры соответствуют параметрам «сэндвича Гинзбурга» [8], что обеспечивает резкий рост T_c в купратах.

Эта картина может быть использована для поиска КТСП в других соединениях типа перовскитов. Как известно, недопированные купраты являются антиферромагнитными (АФ) диэлектриками с температурой Нееля $T_N \sim 300$ К для лантановых и 500 К для иттриевых соединений. Величина этой температуры существенно определяет температуру открытия псевдощели в купратах. Кроме того, характерная энергия СТ-экситонов в CuO_2 -плоскостях в недопированных соединениях составляет ~ 2 эВ. Как показывают оценки, в подобных соединениях перовскитов с $T_N \sim 1500$ К и энергией СТ-экситонов ~ 3 эВ допирование может привести к сверхпроводящему переходу с $T_c \sim 300$ К при атмосферном давлении (рис. 3). Сейчас такие соединения синтезированы, однако проблемой реализации КТСП является их радиоактивность [7].

Что касается гидридов, то причиной спада сопротивления при $T \sim 200$ –300 К в них может быть не сверхпроводящий, а, как и в купратах (и в пниктидах и селенидах), магнитный (АФ ВСП) фазовый переход. Как было ранее показано, при сверхвысоких давлениях в металлическом водороде может возникнуть ферромагнетизм (см., например, [10, 11]), что может привести к антиферромагнитному упорядочению в гидридах. Такая ситуация аналогична пниктидам, когда атомы железа, являясь ферромагнитными, упорядочиваются антиферромагнитно в пниктидных (селенидных) соединениях, что приводит к магнитному (АФ ВСП) фазовому переходу, предшествующему сверхпроводящему в допированных пниктидах (селенидах) (подробнее см. в [9]). В этом случае температура возможного

сверхпроводящего перехода в гидридах (видимо, замаскированного в «шумах» сопротивления (вставка на рис. 4)) далека от комнатной.

Список литературы

- [1] Snider E. et al. *Nature*, **586**, 373 (2020).
- [2] Тинкхам М. Введение в сверхпроводимость. М.: Атомиздат, 1980. 310 с.
- [3] Mazov L.S. arXiv 1510.00123 (2015); *Eur. Phys. J.*, WC **185**, 08003 (2018).
- [4] Hirsch J.E., Marsiglio F. arXiv:2010.10307 (2020).
- [5] Брандт Н.Б. и др. *Письма в ЖЭТФ*, **27**, 37 (1978).
- [6] Мазов Л.С., *ФНТ*, **17**, 1372 (1991); *Progress in HTSC*, **32** (WS Singapore, 1992), p. 605.
- [7] Mazov L.S., *Phys. Proc.*, **36**, 735 (2012).
- [8] Проблема ВТСП / под ред. В.Л. Гинзбурга и Д.А. Киржница. Наука, 1977. 400 с.
- [9] Мазов Л.С. *Известия РАН. Серия физическая*, **78**, 1643 (2014).
- [10] Hirsch J.E., *Phys. Lett. A*, **141**, 191 (1989)
- [11] Ichimaru S., *Phys. Lett. A*, **258**, 354 (1999).

Природа ВТСП купратов и никелатов

А.С. Москвин¹, Ю.Д. Панов¹

¹Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

Результаты многочисленных экспериментальных и теоретических исследований ВТСП купратов указывают на «непреодолимые» расхождения с представлениями модельной теории Бардина–Купера–Шриффера, а также рядом устоявшихся представлений. Так, исследование купратов и никелатов с «безопасной» T -структурой [1, 2] меняет представление о родительских составах как антиферромагнитных изоляторах. Несмотря на надежное экспериментальное обоснование, факт мезоскопического фазового расслоения не стал основой для объяснения необычных свойств купратов с дырочным допированием. В этом плане выделим «революционную» работу [3], авторы которой фактически показали, что

ВТСП в таких купратах не связана со спариванием допированных дырок, которые всего лишь формируют нормальную Ферми-жидкость, ответственную за Холл, ARPES и магнитные осцилляции.

В рамках разрабатываемой нами модели «зарядовых триплетов» низкоэнергетическая «ВТСП-активная» электронная структура $\text{CuO}_2/\text{NiO}_2$ -плоскостей купратов/никелатов формируется системой зарядовых «триплетов» — $[\text{CuO}_4]^{5-,6-,7-}/[\text{NiO}_4]^{6-,7-,8-}$ центров (номинально $\text{Cu}^{3+,2+,1+}/\text{Ni}^{2+,1+,0+}$) с «родительским» магнитным $s = 1/2$ $[\text{CuO}_4]^{6-}/[\text{NiO}_4]^{7-}$ -центром и бесспиновыми электронным $[\text{CuO}_4]^{7-}/[\text{NiO}_4]^{8-}$ и дырочным $[\text{CuO}_4]^{5-}/[\text{NiO}_4]^{6-}$ центрами. Для описания зарядовой степени свободы используется $s = 1$ псевдоспиновый формализм [4, 5], а для квартета спин-зарядовых состояний — спин-псевдоспиновые операторы типа X-операторов Хаббарда. Прямым следствием модели является введение нового «сверхпроводящего носителя» — эффективного локального композитного бозона с симметрией $d_{x^2-y^2}^2$, формально двух дырок, связанных в синглете Жанга–Райса, а также d -симметрия локального сверхпроводящего параметра порядка. Спин-псевдоспиновый гамильтониан модели зарядовых триплетов, учитывающий локальные и нелокальные корреляции, коррелированный одночастичный и двухчастичный (бозонный) транспорт, напоминает известные спин-гамильтонианы и в частных случаях сводится к известным «предельным» гамильтонианам (Хаббард, Гейзенберг, атомный предел, ...). В зависимости от соотношения параметров и уровня допирования основным состоянием $\text{CuO}_2/\text{NiO}_2$ -плоскостей даже для родительских составов может быть либо антиферромагнитный изолятор (AFMI), немагнитный зарядово-упорядоченный изолятор (CO), необычная ферми-жидкость (FL), или бозе-сверхпроводник (BS) с d -симметрией локального параметра порядка. В рамках приближения эффективного поля с учетом построения Максвелла нами построен ряд фазовых T - x диаграмм для $\text{CuO}_2/\text{NiO}_2$ -плоскостей, качественно воспроизводящих все особенности экспериментально наблюдаемых фазовых 3D-диаграмм купратов и никелатов [5]. Псевдошелевая фаза ассоциируется с областью разделения фаз AFMI–CO–FL–BS, отделенной от 100%-й FL-фазы кривой $T^*(x)$ фазового перехода «третьего рода» — температурой псевдошели.

Работа выполнена при поддержке проекта FEUZ-2020-0054 МОН РФ.

Список литературы

- [1] Naito M., Krockenberger M., Ikeda A. et al. *Physica C*, **523**, 28 (2016).
- [2] Li D., Lee K., Wang B.Y. et al. *Nature (London)*, **572**, 624 (2019).
- [3] Pelc D., Popcevic P., Pozek M. et al. *Sci. Adv.*, **5**, eaau4538 (2019).
- [4] Moskvin A.S. *Phys. Rev. B*, **84**, 075116 (2011).
- [5] Moskvin A.S., Panov Y.D. *Condens. Matter*, **6**, 24 (2021).

Electron plasma parameter superconducting crystals

N.P. Netesova, S.R. Arakelyan, E.A. Arakelyan

M.V. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

Within oscillation electron model the superconducting crystal AB is considered consisting of two subsystems for phase separation [1]. During the phase transition in the AB crystal, the valence bond breaking associated with the crystal lattice destruction. It is caused by the balance energies of the AB and A–A, B–B bonds. The basic principle of the phase transition is caused by bonds being broken and dumbbell configurations of atoms are formed. The pairing of electrons is guided by a plasma mechanism. Free electrons couple to lower system energy. When molecules are formed from individual atoms by dumbbell configuration, energy is released. The energy balance is caused by a change in the distances between atoms A–A and B–B with decreasing temperature. It is necessary, that square electron energy in a local phase was essentially much less, than the one in an initial phase. This is the condition for the superconducting phase transition in the crystal AB. The electron plasma parameters of iron selenide, magnesium diboride, complex cuprates, barium – titanium, barium — bismuth oxides were calculated, $\Phi^2(s, \rho, M, q, \beta)$, where $\Phi^2(ab)$, $\Phi^2(a)$, $\Phi^2(b)$ is squared electron energy for phase ab , a , b , respective-

ly, ρ is density, s is valence electron number, M is molecular (atomic) mass, q and β are parameters, T_c is the phase transition temperature. The obtained equation of the phase transition $T_c(q)$ for superconductors (Fig. 1) is

$$T_c = 168,39409q^2 - 376,51815q + 210,31224.$$

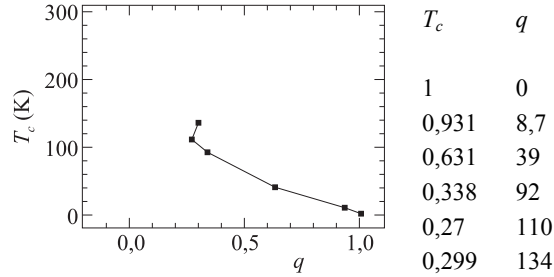
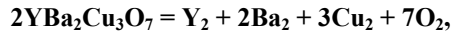


Fig. 1. The phase transition temperature of a superconducting crystal T_c [2] is a function of the interaction parameter q

In summary, the calculations for $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+x}$, $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+x}$, BaBiO_3 are given.



$$\Phi^2(\text{Y}) = 830 \cdot 4,47 \cdot 3/88,91 = 125,18614329,$$

$$\Phi^2(\text{Ba}) = \Phi^2(\text{Ba}) = 830 \cdot 3,76 \cdot 2/137,327 = 45,45063971,$$

$$\Phi^2(\text{Cu}) = 830 \cdot 8,92 \cdot 11/63,546 = 1281,5849935,$$

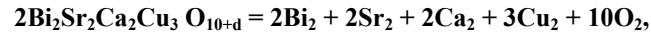
$$\Phi^2(\text{O}) = 830 \cdot 1,27 \cdot 6/15,9994 = 395,302323837,$$

$$\Sigma_{m,n}\Phi m^2 = \Phi^2(\text{Y}) + 2\Phi^2(\text{Ba}) + 3\Phi^2(\text{Cu}) + 8\Phi^2(\text{O}) =$$

$$= 125,18614329 + 2 \cdot 45,45063971 + 3 \cdot 1281,5849935 + 7 \cdot 395,302323837 = 125,18614329 + 90,90127942 + 3844,7549805 + 2767,116266859 = 6827,958670069,$$

$$\Phi^2(\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7) = 830 \cdot 5,65 \cdot 82/666,1978 = 577,214454926$$

$$q = 4 \cdot 577,214454926/6827,958670068 = 0,338147597.$$



$$\Phi^2(\text{Bi}) = 830 \cdot 5 \cdot 9,8/208,980 = 194,611924586,$$

$$\Phi^2(\text{Sr}) = 830 \cdot 2 \cdot 2,63/87,62 = 49,82652362,$$

$$\Phi^2(\text{Ca}) = 830 \cdot 1,55 \cdot 2/40,078 = 64,199810369,$$

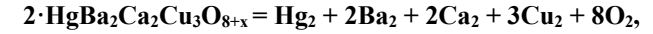
$$\Phi^2(\text{Cu}) = 830 \cdot 8,92 \cdot 11/63,546 = 1281,5849935,$$

$$\Phi^2(\text{O}) = 830 \cdot 1,27 \cdot 6/15,9994 = 395,302323837,$$

$$\Sigma_{m,n}\Phi m^2 = \Phi^2(\text{Bi}) + 2\Phi^2(\text{Sr}) + 2\Phi^2(\text{Ca}) + 3\Phi^2(\text{Cu}) + 10\Phi^2(\text{O}) = 2 \cdot 194,611924586 + 2 \cdot 49,82652362 + 2 \cdot 64,199810369 + 3 \cdot 1281,5849935 + 10 \cdot 395,302323837 = 389,223849172 + 99,65304724 + 128,399620738 + 3844,7549805 + 3953,02323837 = 8415,05473602,$$

$$\Phi^2(\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+d}) = 830 \cdot 111 \cdot 6,31/1023,989 = 567,721235286,$$

$$q(\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+d}) = 4 \cdot 567,721235286/8415,05473602 = 0,26985979.$$



$$\Phi^2(\text{Hg}) = 830 \cdot 14,193 \cdot 12/200,592 = 704,725412778,$$

$$\Phi^2(\text{Ba}) = \Phi^2(\text{Ba}) = 830 \cdot 3,76 \cdot 2/137,327 = 45,45063971,$$

$$\Phi^2(\text{Ca}) = 830 \cdot 1,55 \cdot 2/40,078 = 64,199810369,$$

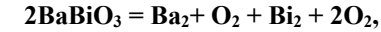
$$\Phi^2(\text{Cu}) = 830 \cdot 8,92 \cdot 11/63,546 = 1281,5849935,$$

$$\Phi^2(\text{O}) = 830 \cdot 1,27 \cdot 6/15,9994 = 395,302323837,$$

$$\Sigma_{m,n}\Phi m^2 = \Phi^2(\text{Hg}) + 2\Phi^2(\text{Ba}) + 2\Phi^2(\text{Ca}) + 3\Phi^2(\text{Cu}) + 8\Phi^2(\text{O}) = 704,725412778 + 2 \cdot 45,45063971 + 2 \cdot 64,199810369 + 3 \cdot 1281,5849935 + 8 \cdot 395,302323837 = 704,725412778 + 90,90127942 + 128,399620738 + 3844,7549805 + 3162,418590696 = 7931,199884132,$$

$$\Phi^2(\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+x}) = 830 \cdot 6,18 \cdot 101/874,0332 = 592,734234809,$$

$$q(\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+x}) = 4 \cdot 592,734234809/7931,199884132 = 0,298937988.$$



$$\Phi^2(\text{BaBiO}_3) = 830 \cdot 25 \cdot 7,54/394,3056 = 396,786147597,$$

$$\Phi^2(\text{Bi}) = 830 \cdot 5 \cdot 9,8/208,980 = 194,611924586,$$

$$\Phi^2(\text{Ba}) = 45,45063971,$$

$$\Phi^2(\text{O}) = 395,302323837,$$

$$q(\text{BaBiO}_3) = 4 \cdot 396,786147597/(45,45063971 + 194,611924586 + 3 \cdot 395,302323837) = 1587,144590388/1425,969535807 = 1,113028399.$$

References

- [1] Netesova N.P. Oscillation electron model superconductors: phase diagram, temperature transition, isotopic shift. *Proceedings SPIE*, **10533**, No. 105330Z, 1–11 (2018).

- [2] Lokshin K.A., Pavlov D.A., Putilin S.N., Antipov E.V., Shepyakov D.V., Balgurov A.M. *Phys. Rev. B*, **63**, 064511 (2001).

Исследование электронной структуры в ряде изоэлектронных аналогов железных сверхпроводников

Н.С. Павлов^{1,2,*}, И.Р. Шеин³, К.С. Перваков², И.А. Некрасов^{1,2}

¹Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, г. Москва, Россия

³Институт химии твердого тела УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: pavlovns@gmail.com

Открытие высокотемпературных сверхпроводников на основе пниктидов и халькогенидов железа [1, 2, 3] породило поиск новых химических или структурных аналогов и совершенно новых соединений данного класса (см., например, [4, 5]). Среди аналогов железных сверхпроводников есть сверхпроводящие системы, но с малой критической температурой сверхпроводящего перехода T_c , однако многие из вновь полученных систем не являются сверхпроводниками. Актуальным является теоретическое изучение таких систем (известных и потенциально возможных), в которых может реализоваться сверхпроводимость. Для теоретического изучения сверхпроводящего состояния необходимо знать электронную структуру нормальной фазы. Электронную структуру можно рассчитать, используя первопринципные зонные расчеты, которые основаны на теории функционала электронной плотности DFT. Для изучения реальных соединений с электрон-электронными корреляциями используются гибридные расчетные схемы, объединяющие в себе первопринципные методы (DFT) и такие подходы, как теория динамического среднего поля (DMFT), — DFT+DMFT [6].

В данной работе исследована электронная структура ряда изоэлектронных аналогов железных сверхпроводников BaNi_2As_2 , BaCo_2P_2 ,

InCo_2As_2 , $\text{InKCo}_4\text{As}_4$ в рамках DFT+DMFT-подхода. Установлено, что, несмотря на достаточно большую величину электрон-электронных корреляций (локальное кулоновское взаимодействие на Ni-3d-оболочке взято $U = 4,5$ эВ, на Co-3d-оболочке — $U = 4,0$ эВ, хундовское обменное взаимодействие $J = 0,85$ эВ), в рассмотренных системах наблюдается относительно небольшая величина перенормировки массы 1–2 на уровне Ферми. При этом, например, в системе BaNi_2As_2 корреляционные эффекты приводят к заметному смещению и сжатию спектра вдали от уровня Ферми ниже $-0,8$ эВ. Это приводит к лучшему согласию спектральной функции DFT+DMFT в сравнении с DFT, с экспериментальной спектральной функцией, полученной в рентгеновской фотоэмиссии с угловым разрешением (ARPES). Соединения InCo_2As_2 и $\text{InKCo}_4\text{As}_4$ экспериментально еще не синтезированы. Расчеты показали, что их основным магнитным состоянием является парамагнитное. При этом вблизи уровня Ферми наблюдаются плоские или почти плоские зоны, что может привести к возникновению сверхпроводимости с относительно высокой критической температурой [7].

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 21-12-00394).

Список литературы

- [1] Sadovskii M.V. *Phys. Usp.*, **51**, 1201, (2008).
[2] Stewart G.R. *Rev. Mod. Phys.*, **83**, 1589 (2011).
[3] Sadovskii M.V. *Phys. Usp.*, **59**, 947 (2016).
[4] Neupane M., Liu C., Xu S.-Y., Wang Y.-J., Ni N. et al. *Phys. Rev. B*, **85**, 094510 (2012).
[5] Nekrasov I.A. and Sadovskii M.V. *JETP Lett.*, **99**, 598 (2014).
[6] Kotliar G. et al. *Rev. Mod. Phys.*, **78**, 865, (2006).
[7] Heikkilä T.T., Kopnin N.B. and Volovik G.E. *JETP Lett.*, **94**, 233 (2011).

Electronic spectrum and superconductivity in the extended t-J-V model

N.M. Plakida, Nguen Dan Tung, A.A. Vladimirov,

*Bogoliubov Laboratory of Theoretical physics,
Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

A consistent microscopic theory of superconductivity for strongly correlated electronic systems is presented within the extended t-J-V model where the intersite Coulomb repulsion and the electron-phonon interaction are taken into account. The exact Dyson equation for the normal and anomalous (pair) Green functions is derived for the projected (Hubbard) electronic operators. The equation is solved in the self-consistent Born approximation for the self-energy. We obtain the *d*-wave pairing with high- T_c induced by the strong kinematical interaction of the order of the kinetic energy $\sim t$ of electrons with spin fluctuations which is much larger than the exchange interaction J and the electron-phonon interaction. Fig. 1, left panel shows various contributions to T_c .

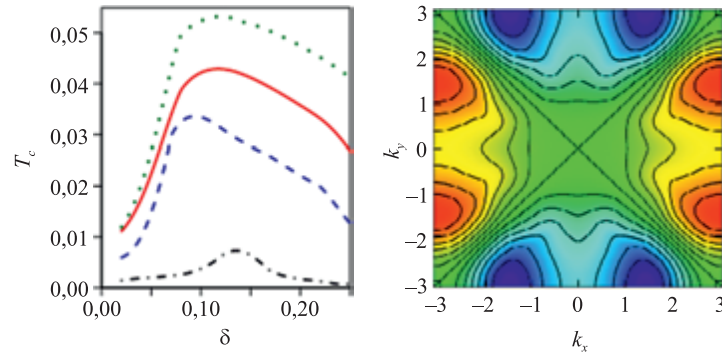


Fig. 1. Left panel: solution of the gap equation for electron-phonon interaction for T_c^{ep} (black, dash-dotted line), for spin-fluctuation pairing T_c^{sf} (blue, dashed line), and for both electron-phonon and spin-fluctuation contributions $T_c^{\text{ep+sf}}$ (red, solid line). The green dotted line shows $T_c^{\text{ep+sf}}$ with zero intersite Coulomb interaction. Temperature is measured in units of hopping parameter $t = 0,4$ eV. Right panel: wave-vector dependence of the superconducting gap at the Fermi surface

Fig. 1, right panel shows wave-vector dependence of the superconducting gap at the Fermi surface. The Coulomb intersite repulsion and the electron-phonon interaction give small contributions for the *d*-wave pairing. These results support the spin-fluctuation mechanism of high-temperature superconductivity in cuprates previously proposed in phenomenological models. Details of calculations and numerical results are given in [1].

Reference

- [1] Tung Nguen Dan, Vladimirov A.A., Plakida N.M. *Physica C*, **587**, 1353900 (2021), arXiv:2107.03131.

Влияние SF-близости и неравновесной спиновой инжекции на сверхпроводящие токи в джозефсоновских переходах «сверхпроводник (S) – нормальный металл (N) – сверхпроводник (S)»

В.В. Рязанов¹, Т.Е. Голикова¹, М.Дж. Вольф², Д. Бекманн²,
Г.А. Пензяков¹, И.Е. Батов¹, И.В. Бобкова¹, А.М. Бобков¹

¹Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия

²Karlsruhe Institute of Technology, Germany

Представлены экспериментальные результаты исследований когерентного транспорта на планарных субмикронных структурах «сверхпроводник – нормальный металл/ферромагнетик – сверхпроводник» (S-N/F-S структурах), выполненных в лаборатории сверхпроводимости ИФТТ РАН. Изучено влияние квазичастичной и спиновой инжекции и спиновой диффузии в берега и джозефсоновский барьер SNS-структур на критический ток, инверсию разности фаз, появление нелокальных эффектов. Наблюдалось спиновое расщепление сверхпроводящей энергетической щели и мини-щели, двойной переход с инверсией разности сверхпроводящей фазы. Полученные результаты сравниваются с модельными расче-

тами, учитывающими изменение функции распределения в S-N/F-S-переходах под действием эффекта близости нормального барьера с ферромагнетиком и сверхпроводником, а также спиновой диффузии и неравновесной квазичастичной инжекции.

Эксперименты по синтезу и исследованию сверхпроводимости в некоторых полигидридах металлов при мегабарных давлениях

И.А. Троян, И.С. Любутин

*Институт кристаллографии, ФНИЦ «Кристаллография и фотоника»,
г. Москва, Россия*

В докладе будут представлены новые экспериментальные результаты по исследованию сверхпроводимости в некоторых полигидридах металлов, полученные недавно в ФНИЦ «Кристаллографии и фотоники» РАН при статических давлениях мультимегабарного диапазона и высоких температурах до 2500 К.

В 2004 году Эшкрофт [1] предположил, что вещества с высоким содержанием водорода при высоких давлениях могут проявлять свойства, похожие на чистый атомарный металлический водород. Теоретические расчеты [2–4] показывают, что количество водорода в стехиометрических гидридах металлов, стабильных при нормальных условиях, не является достаточным, чтобы воспроизвести уникальные свойства металлического водорода. Новые химические соединения, которые обладают избытком водорода и неожиданными структурами и стехиометрией, могут быть синтезированы только при высоких давлениях и могут обладать высоким значением температуры сверхпроводящего перехода T_c .

Два богатых водородом материала, H_3S и LaH_{10} , синтезированные недавно при мегабарных давлениях, произвели революцию в области физики конденсированных сред и дали первую надежду на решение столетней проблемы сверхпроводимости при комнатной температуре. В по-

следние годы появилось много теоретических работ, предсказывающих новые составы гидридов металлов с высокими значениями T_c . Однако экспериментальный синтез таких соединений и последующие исследования структурных и сверхпроводящих свойств чрезвычайно сложны. Они требуют высокого давления, порядка нескольких мегабар, и очень высоких температур. Образцы, синтезированные при высоких давлениях в ячейках с алмазными наковальнями, имеют размеры всего несколько микрон, и исследование сверхпроводимости на таких образцах требует от экспериментаторов высочайшего мастерства. Поэтому имеющихся успешных экспериментальных данных по сверхпроводимости в гидридах очень мало. Кроме того, структурные исследования нуждаются в синхротронных установках, которые труднодоступны для российских ученых.

В нашей группе для выполнения таких экспериментов подготовлена серия камер высокого давления с алмазными наковальнями (DAC). В рабочий объем камеры (диаметром около 50 мкм) помещается небольшой кусочек металла размером около 20 мкм. Для выделения водорода в камере под давлением используется боран аммония NH_3BH_3 . При высокой температуре это соединение разлагается с выделением атомарного водорода. При заданном давлении нагрев образцов до 2500 К в камерах осуществляется несколькими импульсами инфракрасного лазера. При высокой температуре и высоком давлении водород вступает в реакцию с металлом и происходит синтез высших гидридов металлов.

При высоком давлении нами синтезированы два новых сверхпроводника гидридов тория с высокими значениями T_c [5]. Это соединения ThH_{10} с кристаллической структурой $Fm\bar{3}m$ и ThH_9 ($P6_3/mmc$). Экспериментально установлены критические температуры сверхпроводящего перехода $T_c = 159$ – 161 К для ThH_{10} и $T_c = 146$ К для ThH_9 . Для этих соединений установлены также значения верхних критических магнитных полей $\mu H_c = 45$ и 38 Тесла соответственно при давлениях 170–175 ГПа. Экспериментально показано, что фаза $fcc-ThH_{10}$ имеет давление стабилизации 85 ГПа, что делает этот материал уникальным среди всех известных полигидридов металлов с высоким T_c . В процессе синтеза также получены три других полигидрида ThH_6 ($Cmc2_1$), ThH_4 ($P321$) и ThH_4

($I4/mmm$). Кроме того, экспериментально обнаружены структурные фазовые переходы, индуцированные давлением в соединениях ThH_4 ($P321 \rightarrow I4/mmm \rightarrow Fmmm$) и ThH_{10} ($Fm3m \rightarrow Immm$).

В системе полигидридов иттрия нами впервые синтезирован новый высокотемпературный сверхпроводник YH_6 с критической температурой сверхпроводящего перехода 224 К при давлении 166 ГПа [6]. Установлено, что при лазерном нагреве металлического иттрия до 2400 К в среде борана аммония кубическая фаза $Im\bar{3}m$ - YH_6 может образоваться вместе с примесными фазами $I4/mmm$ - YH_4 и $Imm2$ - YH_7 при давлениях в области 160–196 ГПа. Обнаружено, что значение $T_c = 224$ К в YH_6 неожиданно ниже теоретически предсказанного значения (≈ 290 К) [7]. Наблюдаемое верхнее критическое магнитное поле $\mu_0 H_{c2}(0) = 116$ –158 Тл более чем в два раза превышает предсказанное в рамках теории БКШ (~ 60 Тл). Возможно, что свойства этого супергидрида не укладываются в теорию сверхпроводимости БКШ. Установлено, что критический ток I_c и его плотность J_c в YH_6 могут превышать соответственно значения 1 А и 2000 А/мм² при 0 К, что сравнимо с параметрами сверхпроводников, используемых в промышленности, таких как NbTi и YBCO. Это указывает, что YH_6 может быть перспективным для использования в сверхпроводниковой электронике. Наши эксперименты показывают большой потенциал системы Y-H, где увеличение содержания водорода может превратить $Im\bar{3}m$ - YH_6 в ГЦК- YH_{10} , который имеет наилучшие шансы стать сверхпроводником при комнатной температуре.

В нашей работе [8] также впервые удалось синтезировать и изучить серию новых сверхпроводящих тройных гидридов. Это кубические гексагидрид $(\text{La}, \text{Y})\text{H}_6$ и декагидрид $(\text{La}, \text{Y})\text{H}_{10}$ с максимальной температурой сверхпроводящего перехода $T_c = 253$ К и верхним критическим магнитным полем $B_{c2}(0)$ порядка 135 Тесла при давлении 183 ГПа. По результатам измерения вольт-амперных характеристик для $(\text{La}, \text{Y})\text{H}_{10}$ установлена величина плотности критического сверхпроводящего тока $J_c \sim 12$ –27,7 кА/мм² при 4,2 К, что сравнимо с известными сверхпроводящими сплавами NbTi и Nb₃Sn. Результаты наших исследований показывают, что гидрид $Fm\bar{3}m$ - $(\text{La}, \text{Y})\text{H}_{10}$ содержит атомы исходных металлов в ок-

ружении водородных кластеров La@H_{24} и Y@H_{32} , что характерно для структур $Im\bar{3}m$ - LaH_6 и $Fm\bar{3}m$ - YH_{10} . Изучена зависимость температуры сверхпроводящего перехода T_c от давления для образцов $(\text{La}, \text{Y})\text{H}_{10}$, полученных из сплавов La_2Y и La_4Y .

Отметим, что в настоящее время ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН — это единственное место в России, где создана необходимая инфраструктура для работы со сжатым газообразным водородом и можно проводить эксперименты по синтезу (при лазерном нагреве) и исследованию гидридов при мегабарных давлениях с использованием методов оптической спектроскопии, электрорезистивных и гальваномагнитных измерений.

Авторы выражают глубокую благодарность А.Г. Гаврилюку и В.В. Стружкину за участие в ряде экспериментов, А.Г. Ивановой за анализ кристаллической структуры синтезированных полигидридов, сотрудникам лаборатории В.М. Пудалова (ФИАН) А.В. Садакову и О.А. Соболевскому за помощь в измерениях сверхпроводимости во внешнем магнитном поле, а также теоретикам группы А.Р. Оганова (Сколково), Д.В. Семенюку и А.Г. Кващину за теоретическую обработку экспериментальных данных.

Работа проводится при финансовой поддержке РФФ (грант № 22-12-00163).

Список литературы

- [1] Ashcroft N.W. *Phys. Rev. Lett.*, **92**, 187002 (2004).
- [2] Liu H. et al. *PNAS*, 114, 6990–6995 (2017).
- [3] Peng F. et al. *Phys. Rev. Lett.*, **119**, 107001–107007 (2017).
- [4] Wang H. et al. *Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci.*, 8, e1330 (2018).
- [5] Semenok D.V. et al. *Materials Today* **33**, 36–43 (2020).
- [6] Troyan I.A. et al. *Advanced Materials*, 2006832 (1–10) (2021).
- [7] Salke N.P., et al., *Nat. Commun.*, 10 4453 (2019).
- [8] Semenok D.V., et al. *Materials Today*, 48, p. 18–28 (2021).

Параметр порядка триплетного сверхпроводника UTe_2 , согласующийся с наблюдаемой в нем аномалией верхнего критического поля

И.А. Фомин

Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, г. Москва, Россия

Совокупность экспериментальных данных позволяет считать, что куперовское спаривание в сверхпроводящей фазе UTe_2 триплетное. Орторомбическая симметрия кристаллов UTe_2 частично ограничивает возможный вид параметра порядка этой фазы [1]. Тем не менее конкретная форма параметра порядка остается неопределенной. Полезную дополнительную информацию дают измерения верхнего критического поля в сверхпроводящем UTe_2 [2]. Для магнитных полей с напряженностью более 15 Т, направленных вдоль одной из осей кристалла, перпендикулярных оси легкого намагничивания, температура сверхпроводящего перехода T_c возрастает с ростом поля.

Похожая зависимость температуры сверхтекучего перехода от магнитного поля наблюдалась в жидком ^3He . Аналогия с поведением сверхтекучего ^3He в сильном магнитном поле была использована в работе [3] для объяснения наблюдаемой аномалии в UTe_2 . В этой работе, однако, сознательно не учитывалась существенная разница между жидким ^3He и UTe_2 как по симметрии, так и по величине спин-орбитального взаимодействия. В урановых соединениях спин-орбитальное взаимодействие сильное, спин оказывается «вмороженным» в решетку и, в отличие от ^3He , не может отслеживать направление магнитного поля.

Цель настоящей работы — выяснить, какие ограничения на вид параметра порядка сверхпроводящего UTe_2 накладывает существование в нем аномалии верхнего критического поля, если не делать нереалистичных предположений о свойствах этого соединения. Знание параметра порядка позволит, во-первых, правильно описывать макроскопические свойства сверхтекучей фазы UTe_2 и, во-вторых, с помощью микроскопи-

ческих моделей понять механизм, обеспечивающий образование куперовских пар.

Список литературы

- [1] Фомин И.А. *ЖЭТФ*, **122**, 1089 (2002).
- [2] Knafo W. et al. *Communications Physics*, **4**, 40 (2000).
- [3] Machida K. *Phys. Rev. B*, **104**, 014514 (2021).

Поверхностная сверхпроводимость на примере свинца и ванадия

И.Н. Хлюстикова

Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, г. Москва, Россия

Обнаружено, что в свинце и ванадии критическая температура поверхностной сверхпроводимости T_{cs} превышает критическую температуру сверхпроводимости объема T_{cv} . Для свинца превышение температуры составило 0,25 мК [1], а для ванадия — 0,04 К [2].

Показано, что токи поверхностной сверхпроводимости и в том и другом случае эффективно обеспечивают захват магнитного потока.

Для свинца построена зависимость критического поля поверхностной сверхпроводимости $H_{cs}(T)$.

В случае ванадия удалось оценить критическую плотность тока поверхностной сверхпроводимости. При $T = T_{cv}$ она составила $j_{cs} = 5 \cdot 10^6$ А/см².

Список литературы

- [1] *ЖЭТФ*, **149**, вып. 2, стр. 378–381 (2016).
- [2] *ЖЭТФ*, **159**, вып. 3, стр. 541–545 (2021).

Vortex phase transitions in superconductors with modulated disorder

I.M. Tsar'kov¹, A.A. Kopasov^{1,2,*}, A.S. Mel'nikov^{1,2}

¹*Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod, Nizhni Novgorod, Russia*

²*Institute for Physics of Microstructures, Russian Academy of Sciences,*

Nizhny Novgorod GSP-105, Russia

*E-mail: kopasov@ipmras.ru

We study the superconductivity nucleation in superconductors with modulated disorder near the upper critical magnetic field. Within the Ginzburg-Landau and Usadel models with a nonuniform diffusion coefficient we demonstrate that the emerging localized superconducting nuclei can exhibit the field controlled switching of the angular momentum (or vorticity). This effect should manifest itself in the appearance of an additional vortex phase transition line on the phase diagram magnetic field – temperature.

Introduction

The influence of the disorder on the superconductivity nucleation is an important problem for all possible applications of superconducting materials. In this report we address the case of superconductors with inhomogeneous disorder characteristics. Such inhomogeneities are inevitably present in real materials due to fluctuations in the impurity concentration during the sample fabrication. On the other hand, spatially modulated impurity concentration can be created artificially by means of the ion implantation.

In the present work we investigate the features of the superconductivity nucleation in superconductors with spatially modulated impurity concentration described by the inhomogeneous diffusion coefficient $D(\mathbf{r})$. We analyze the phase diagrams magnetic field H – temperature T for superconducting nuclei localized at isolated inhomogeneities described by several deterministic $D(\mathbf{r})$ profiles. We observe the phase transitions between the localized superconducting states with different orbital momenta somewhat similar to the well known

Little–Parks effect or superconductivity nucleation at columnar defects or circular holes [1, 2].

Model

For illustration we describe here the analysis based on the linearized Ginzburg–Landau (GL) equation with a nonuniform diffusion coefficient

$$\left(\frac{\pi\hbar}{8T_{c0}}\right)\widehat{\Pi}D(\mathbf{r})\widehat{\Pi}\Psi(\mathbf{r})=E\Psi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

where $\widehat{\Pi}=(i\nabla-2\pi\mathbf{A}/\phi_0)$, \mathbf{A} is the vector potential, $\phi_0=\pi\hbar c/|e|$ is the magnetic flux quantum, T_{c0} denotes the superconducting critical temperature at zero magnetic field, and $\Psi(\mathbf{r})$ is the superconducting order parameter. We use the following profiles of the diffusion coefficient

$$D(r)=D_0-(D_0-D_m)\Theta(l_c-r), \quad (2a)$$

$$D(x)=D_0-(D_0-D_m)[\Theta(x+l_c/2)-\Theta(x-l_c/2)]. \quad (2b)$$

Here l_c denotes the size of a region with a suppressed diffusion coefficient. Two-dimensional profile (2a) describes a cylindrically shaped region with the increased impurity concentration. In the case of the one-dimensional profile (2b) the region with the suppressed diffusion coefficient is a layer of the thickness l_c .

The phase transition line $T_c(H)$ is determined by the lowest eigenvalue of the problem (1)

$$E_0(H)=1-T_c(H)/T_{c0}. \quad (3)$$

We calculate the lowest eigenvalue of the problem (1) using the exact numerical solution of the linearized GL equation, the perturbation theory, and the variational method

$$E_0=\left(\frac{\pi\hbar}{8T_{c0}}\right)\min\frac{\int D(\mathbf{r})\{v^2(\mathbf{r})f^2(\mathbf{r})+[\nabla f(\mathbf{r})]^2\}d^3\mathbf{r}}{\int f^2(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}}, \quad (4)$$

where $f(\mathbf{r})$ and $\theta(\mathbf{r})$ are the absolute value and the phase of the superconducting order parameter $\Psi(\mathbf{r})=f(\mathbf{r})e^{i\theta(\mathbf{r})}$, and $v(\mathbf{r})=[\nabla\theta(\mathbf{r})+2\pi\mathbf{A}/\phi_0]$.

Results

For the radial profile of the diffusion coefficient (2a) we choose the radial gauge for the vector potential $\mathbf{A} = [\mathbf{H}, \mathbf{r}]/2$ and seek the solution for Eq. (1) in the form

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{ik_z z} e^{in\phi} f_{n,k_z}(r), \quad (5)$$

where n is the vorticity. We find the following corrections to the lowest eigenvalues derived by treating the modulation of the diffusion coefficient within the first-order perturbation theory and in the limit $l_c / L_H \ll 1$:

$$E_0(n=0) - h \approx \delta D h^3 / 8D_0 b^2, \quad (6a)$$

$$E_0(n=-1) - h \approx \delta D h^2 / 2D_0 b. \quad (6b)$$

Here $h = H 2\pi \xi_0^2 / \phi_0$, $\xi_0^2 = \pi \hbar D_0 / 8T_{c0}$, $\delta D = -(D_0 - D_m)$, $b = \xi_0^2 / l_c^2$, and $L_H = \sqrt{\phi_0 / 2\pi H}$ is the magnetic length.

Typical phase transition lines for the radial profile of the diffusion coefficient (2a) are shown in Fig. 1. One can see the appearance of the tricritical point on the phase diagram magnetic field — temperature. For temperatures larger than the temperature of the tricritical point the emerging superconducting state possesses a nonzero winding number while the state with zero vorticity appears for lower temperatures. For temperatures below the superconducting phase transition line one can expect the appearance of the line of the first order phase transition associated with the switching of the orbital momenta of superconducting localized states. This transition, in fact, relates to the change in the vortex lattice structure.

For the one-dimensional profile of the diffusion coefficient (2b) we choose the following gauge for the vector potential $\mathbf{A} = \hat{y} H x$ and seek the solution of Eq. (1) in the form

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{ik_y y} e^{ik_z z} f_{k_y, k_z}(x). \quad (7)$$

Typical phase transition lines and k_y values corresponding to a maximal critical temperature are presented in Figs. 2,a and 2,b, respectively. In the vicinity of T_{c0} the states with k_y and $-k_y$ are degenerate and the superconductivity nucleates in the form of a vortex chain localized in the regions with the sup-

pressed diffusion coefficient. At some temperature $T_* < T_{c0}$ the first-order phase transition takes place into the state with $k_y = 0$.

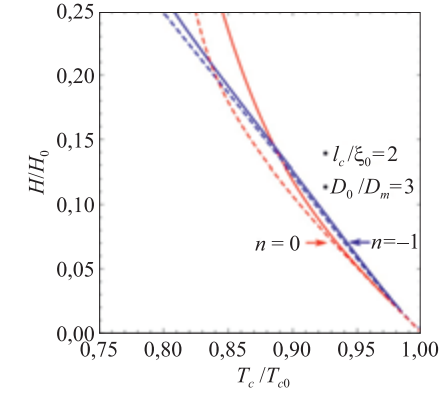


Fig. 1. Typical phase transition lines for the radial profile of the diffusion coefficient (2a). Hereafter, $H_0 = \phi_0 / 2\pi \xi_0^2$. Solid lines show the results of the exact numerical solution while dashed lines correspond to the results of the variational approach

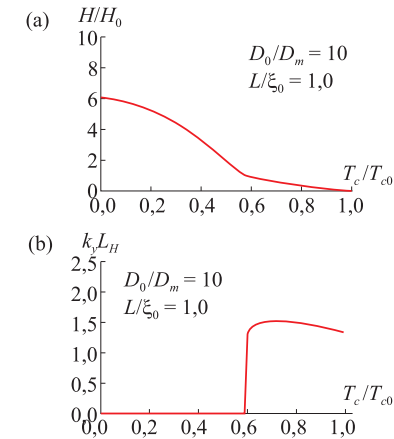


Fig. 2. Typical phase transition lines (a) and k_y values (b) corresponding to a maximal critical temperature. Here the states with k_y and $-k_y$ are degenerate. Sum of these solutions represents a chain of vortices localized in the region with the suppressed diffusion coefficient

This work was supported by the Russian Science Foundation (Grant No. 21-12-00409).

References

- [1] Buzdin A.I. *Phys. Rev. B*, **47**, 11416 (1993).
[2] Bezryadin A., Buzdin A., Pannetier B. *Phys. Lett. A*, **195**, 373 (1994).

Effect of superconductivity on the shape of flat bands

V.R. Shaginyan

Petersburg Nuclear Physics Institute of NRC «Kurchatov Institute», Russia

For the first time, basing both on experimental facts and our theoretical consideration, we show that Fermi systems with flat bands should be tuned with the superconducting state. Experimental measurements on magic-angle twisted bilayer graphene of the Fermi velocity V_F as a function of the temperature T_c of superconducting phase transition have revealed $V_F \sim T_c \sim 1/N_s(0)$, where $N_s(0)$ is the density of states at the Fermi level. We show that the high- T_c compounds

$\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ exhibit the same behavior. Such observation is a challenge to theories of high- T_c superconductivity, since V_F is negatively correlated with T_c , for $T_c \sim 1/V_F \sim N_s(0)$. We show that the theoretical idea of forming flat bands in strongly correlated Fermi systems can explain this behavior and other experimental data collected on both $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ and twisted bilayer graphene. Our findings place stringent constraints on theories describing the nature of high- T_c superconductivity and the deformation of flat band by the superconducting phase transition [1, 2].

The data are well explained in the framework of fermion condensation theory and to our best knowledge there is no any other standard theoretical framework that can do the same, since the BSC like theories state $T_c \sim N_s(0)$. Finally, our study of the experimental results confirms that the topological

FCQPT is the intrinsic feature of many strongly correlated Fermi systems and can be viewed as the universal cause of both the NFL behavior and the corresponding new state of matter.

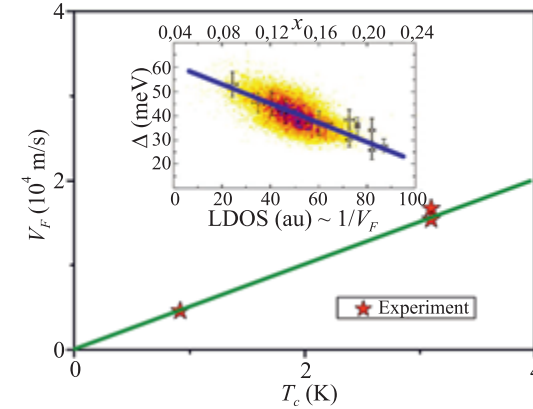


Fig. 1

Experiment is shown by the stars [3]. Theory is displayed by the solid line. Inset is adopted from [4], and depicts experimental dependence of the superconducting gap versus the local density of states (LDOS) collected on $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$, x is oxygen doping concentration.

References

- [1] Shaginyan V.R., Amusia M.Ya., Msezane A.Z., and Popov K.G. Scaling Behavior of Heavy Fermion Metals. *Phys. Rep.*, **492**, 31 (2010).
[2] Shaginyan V.R., Msezane A.Z., Amusia M.Ya., Japaridze G.S. Effect of superconductivity on the shape of flat bands. arXiv: 2103.11848.
[3] Qin W., Zou B., MacDonald A.H. Critical magnetic fields and electron-pairing in magic-angle twisted bilayer graphene. arXiv:2102.10504.
[4] Pan S.H. et al. Microscopic electronic inhomogeneity in the high- T_c superconductor. *Nature* **413**, 282 (2001).

МАГНЕТИЗМ. МАГНИТНЫЕ СТРУКТУРЫ. КОНДО-СИСТЕМЫ

Cooperative and local features of the spin gap formation in the Kondo insulators YbB_{12} and $\text{CeFe}_2\text{Al}_{10}$

P. A. Alekseev^{1,2}, V. N. Lazukov¹, and P. S. Savchenkov¹

¹National Research Centre "Kurchatov Institute", Moscow, Russia

²National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, Russia

The formation of the excitation spectra of the ground state for Kondo insulators like YbB_{12} , $\text{CeFe}_2\text{Al}_{10}$ has been studied and analyzed in terms of correspondence between cooperative and local effects. Experimental results concerning different types of substitutions for the rare earth and d -metal sublattices are discussed on the basis of model calculations. It is shown how the transformation from Kondo insulator to heavy fermions occurs in the f -electron excitation spectra of $\text{CeFe}_2\text{Al}_{10}$.

Влияние примесей на фазовые переходы в киральных магнетиках

А.М. Белемук¹, С.М. Стишов²

¹Институт физики высоких давлений РАН, г. Троицк, Россия

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, г. Москва, Россия

Исследуется эволюция удельной теплоемкости и магнитной восприимчивости с помощью классического метода моделирования Монте-Карло в киральных магнетиках с примесями. Вычисления проводятся на ос-

нове спин-решеточной модели. Анализируется поведение удельной теплоемкости моносилицидов переходных металлов $\text{Mn}_{1-x}(\text{Fe},\text{Co})_x\text{Si}$ при увеличении допирования. Предложены две модели расположения примесей в решетке. В первой модели предполагается, что примеси (Fe, Co) замещают регулярный ион Mn. Во второй модели примеси рассматриваются как замороженные спины, помещенные в междоузлия регулярной решетки. Они связаны с ближайшими соседями обменным взаимодействием случайной амплитуды. Обе модели предсказывают быстрое подавление признаков магнитного фазового перехода с увеличением допирования, однако характер эволюции удельной теплоемкости и флуктуационного максимума теплоемкости различается. Проводится анализ интенсивности брэгговского рассеяния для этих двух моделей.

Неупорядоченная модель Изинга: численное моделирование и аналитическое решение

Н.А. Богословский, П.В. Петров, Н.С. Аверкиев

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, г. Санкт-Петербург, Россия

Неупорядоченная модель Изинга представляет собой систему случайно расположенных в пространстве спинов, обменно взаимодействующих между собой. При этом энергия их взаимодействия является функцией расстояния и взаимной ориентации спинов: $J = J(r_{ij})S_i S_j$, где S — спиновая переменная, равная ± 1 . Эта модельная система активно исследовалась в 1980-х годах для описания спинового упорядочения в легированных полупроводниках [1, 2]. При помощи различных численных методик было продемонстрировано, что спиновое упорядочение в такой модели если и происходит, то при концентрациях, намного превосходящих критическую концентрацию перехода «металл–диэлектрик». В нашей недавней работе было показано, что использованный в предыдущих исследованиях потенциал вида $J(r_{ij}) = J_0 \exp(-2r_{ij}/a)$ сильно недооценивает обменное взаимодействие по сравнению с более реалистичным потен-

циалом $J(r_{ij}) = J_0(r_{ij}/a)^{5/2}\exp(-2r_{ij}/a)$. Применение в наших расчетах методом Метрополиса более реалистичной зависимости $J(r_{ij})$ приводило к возникновению спинового упорядочения при концентрациях сравнимых с концентрацией перехода «металл–диэлектрик» [3].

В настоящей работе мы исследуем термодинамические и магнитные свойства неупорядоченной модели Изинга посредством вычисления плотности состояний системы как функции внутренней энергии и магнитного момента $g(E, M)$. Зная точный вид функции $g(E, M)$, легко рассчитать статистическую сумму, а после и остальные термодинамические свойства модели. Сперва для вычислений нами был использован алгоритм численного моделирования плотности состояний, предложенный Ландау и Вэнгом [4]. Алгоритм состоит в совершении системой последовательности немарковских случайных блужданий в пространстве энергий с равновероятным посещением всех энергетических состояний. Анализ полученных результатов позволил нам разработать аналитический подход к вычислению плотности состояний $g(E, M)$, основывающийся на том, что полная энергия системы взаимодействующих спинов является суммой случайных величин, дисперсию и среднее значение которых мы также можем вычислить аналитически. Вероятность того, что система из N спинов имеет конкретное значение магнитного момента мы вычисляем комбинаторно. Исходя из аналитического вида функции $g(E, M)$, нами рассчитаны температурные зависимости магнитной восприимчивости, теплоемкости и других термодинамических характеристик системы как для ферромагнитного, так и для антиферромагнитного видов взаимодействия. Полученные результаты важны с точки зрения интерпретации экспериментальных данных по исследованию магнитных свойств легированных полупроводников. Кроме этого, представляется весьма интересным получение нового, основанного на чисто вероятностном подходе, аналитического решения для модели Изинга, крайне простого и наглядного по сравнению с вычислениями для регулярных решеток.

Результаты работы были получены с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

Список литературы

- [1] Bhatt R.N. and Lee P.A. *Phys. Rev. Lett.*, **48**, 344 (1982).
- [2] McLenaghan I.R. and Sherrington D. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **17**, 1531 (1984).
- [3] Богословский Н.А., Петров П.В., Аверкиев Н.С. *Письма в ЖЭТФ*, **114**(6), 383 (2021)
- [4] Wang F. and Landau F. *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 2050 (2001).

Сверхтонкие взаимодействия в мультиферроиках

$\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0,0225, 0,075, 0,9$)

А.В. Бокков^{1,*}, Д.А. Саламатин^{1,2}, В.С. Показилов³, А.В. Саламатин²,
А. Величков², М.В. Михин², Д.С. Гроздов², К.Н. Вергель², А.С. Сигов³,
А.О. Макарова³, М. Будзинский⁴, А.В. Цвященко¹

¹Институт физики высоких давлений им. Верещагина РАН, г. Троицк, Россия

²Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия

³МИРЭА — Российский технологический университет, г. Москва, Россия

⁴Институт физики, Университет М. Кюри-Склодовской, г. Люблин, Польша

*E-mail: bokov@hppi.troitsk.ru

В мультиферроиках, таких как соединение BiFeO_3 , электрические и магнитные свойства сосуществуют в одном температурном диапазоне. Недавно ферроэлектрические свойства наблюдались в «скошенном» антиферромагнитном изоляторе LaFeO_3 . Рентгеновский дифракционный анализ показал, что соединения $\text{Bi}_{0,9775}\text{La}_{0,0225}\text{FeO}_3$ и $\text{Bi}_{0,925}\text{La}_{0,075}\text{FeO}_3$ имеют ромбоэдрически искаженную кристаллическую структуру перовскита с пространственной группой $R3c$ (№ 161), а соединение $\text{La}_{0,9}\text{Bi}_{0,1}\text{FeO}_3$ имеет орторомбически искаженную структуру перовскита типа GdFeO_3 с пространственной группой $Pnma$ (№ 62). Небольшие изменения постоянной решетки по сравнению с недопированными соединениями ($x = 0,0$ и $1,0$) подтверждают успешное замещение Bi на La.

С помощью метода дифференциальных возмущенных угловых корреляций (^{140}Ce -ВУК) были определены сверхперенесенные сверхтонкие магнитные поля на зондирующих ядрах ^{140}Ce . Зондовые ядра $^{140}\text{La}/^{140}\text{Ce}$ получались в реакции $^{139}\text{La}(n,\gamma)^{140}\text{La}$ при облучении образцов тепловыми нейтронами. Из-за малого значения электрического квадрупольного момента 2083 кэВ 4^+ состояния ^{140}Ce только сверхтонкое магнитное поле возмущает угловые корреляции. Магнитный момент этого состояния составляет $4,00 \mu_N$ [1]. ВУК-измерения были выполнены с помощью компактного спектрометра, оснащенного четырьмя детекторами LaBr_3 [2]. Спектрометр основан на цифровой электронике и методах цифровой обработки сигналов. Использовался четырехканальный АЦП 250 МГц с разрешением 14 бит. Временное разрешение (FWHM) составляет около 350 пс по основной линии ^{60}Co . Спектры ВУК, полученные при $T = 295 \text{ K}$, имеют медленный наклон и не демонстрируют прецессии на измеренном временном интервале (см. рис. 1). Большое изменение угловой анизотропии для $t \approx 0 \text{ нс}$ связано с мгновенными совпадениями во временных спектрах.

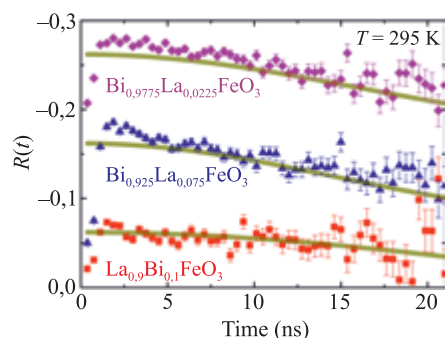


Рис. 1. Экспериментальные спектры ^{140}Ce -ВУК, измеренные при $T = 295 \text{ K}$

Описание спектров по методу наименьших квадратов осуществлялась функцией $A/5[1 + 2 \cos(\omega_L t) + 2 \cos(2\omega_L t)]$ во временном интервале 1–20 нс, где A — амплитуда ($A_{22} = -0,13$), а ω_L — ларморовская частота. Полученные ларморовские частоты составляют $54(2) \text{ Мрад/с}$ для

$\text{Bi}_{0,9775}\text{La}_{0,0225}\text{FeO}_3$ (магнитное сверхтонкое поле $B_{\text{hf}} = 1,15(4) \text{ T}$, $59(3) \text{ Мрад/с}$ ($B_{\text{hf}} = 1,26(6) \text{ T}$) для $\text{Bi}_{0,925}\text{La}_{0,075}\text{FeO}_3$ и $34(5) \text{ Мрад/с}$ ($B_{\text{hf}} = 0,72(11) \text{ T}$) для $\text{La}_{0,9}\text{Bi}_{0,1}\text{FeO}_3$. Последнее значение можно сравнить с $\omega_L \sim 20 \text{ Мрад/с}$ ($B_{\text{hf}} \sim 0,4 \text{ T}$), полученным из измерений ^{140}Ce -ВУК в LaFeO_3 при $T = 77 \text{ K}$ [3]. Спектры ВУК, измеренные при $T = 77 \text{ K}$, не показывают существенных изменений. Значения магнитных сверхтонких полей на сайтах Bi/La указывают на малое сверхперенесенное магнитное сверхтонкое поле в соединениях $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_3$.

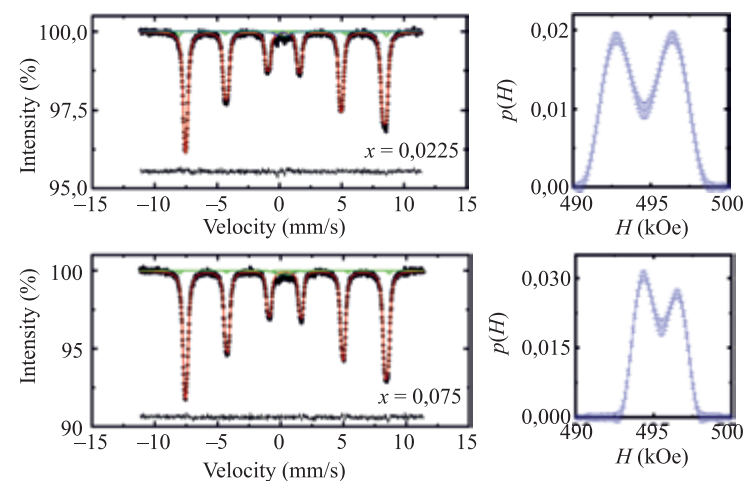


Рис. 2. Мёссбауэровские экспериментальные спектры $\text{Bi}_{0,9775}\text{La}_{0,0225}\text{FeO}_3$ (вверху) и $\text{Bi}_{0,925}\text{La}_{0,075}\text{FeO}_3$ (внизу), измеренные при комнатной температуре на ядрах ^{57}Fe , и их распределения магнитных полей $p(H_{\text{hf}})$ (справа)

Методом мёссбауэровской спектроскопии на ядрах ^{57}Fe была получена информация о сдвиге линии (δ), решеточных (ϵ_{lat}) и магнитных (ϵ_{mag}) вкладах в квадрупольный сдвиг (ϵ), изотропном (H_{is}) и анизотропном (H_{an}) вкладах в сверхтонкое магнитное поле (H_{hf}), а также параметре ангармоничности (m) и распределении сверхтонкого магнитного поля $p(H_{\text{hf}})$ (см. рис. 2). Во всех исследованных соединениях ионы Fe находятся в высокоспиновом трехвалентном состоянии. В соединениях с $x = 0,0225$ и $0,075$ существуют пространственно-модулированные циклои-

дальние магнитные структуры. Обнаружено, что знак эффективной константы магнитной анизотропии (K_{eff}) меняется с изменением x от 0,0225 до 0,075. Замена Bi на La увеличивает величину сверхтонкого магнитного поля на ядрах ^{57}Fe .

Мы благодарны за поддержку в разработке цифрового ВУК-спектрометра польскому представителю в Объединенном институте ядерных исследований.

Список литературы

- [1] Ohkubo Y. et al. *Phys. Rev C*, **87**, 044324 (2013).
- [2] Salamatin D.A. et al. *J. All. Comp.*, **850**, 156601 (2021).
- [3] Dogra R. et al. *Phys. Rev B*, **63**, 224104 (2001).

Исследование магнитных свойств в соединении с 1D-магнитной структурой $\text{Cu}_2(\text{CCl}_3\text{COO})_3(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_5$

К.С. Болобаев^{1,*}, Е.С. Козлякова^{2,3}, И.В. Морозов⁴, А.А. Воробьева⁴,
Т.М. Васильчикова³, Г.В. Раганян³

¹МГУ имени М.В.Ломоносова, ФНМ, г. Москва, Россия

²НИТУ «МИСиС» НИЛ «Функциональные квантовые материалы»,
г. Москва, Россия

³МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, г. Москва, Россия

⁴МГУ имени М.В.Ломоносова, химический факультет, г. Москва, Россия

*E-mail: kirill.bolobaev@gmail.com

Связь разнообразных квантовых кооперативных явлений, например, магнетизма и сверхпроводимости, является одним из краеугольных вопросов современной физики. Не так давно было обнаружено, что сверхпроводимость может наблюдаться в соединениях, родственных квазиодномерным магнетикам с магнитной подсистемой спиновых цепочек [1]. Благодаря ее низкой размерности физические свойства этих соединений

определяются не магнитным дальнодействием (магнитным упорядочением), а корреляциями ближнего магнитного порядка (магнонами), в результате чего даже при сильном обменном магнитном взаимодействии внутри линейной спиновой цепочки соединение не испытывает магнитного упорядочения при любой конечной температуре $T \neq 0$ К.

В данной работе в качестве объекта исследования было выбрано соединение $\text{Cu}_2(\text{CCl}_3\text{COO})_3(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_5$, магнитные свойства которого не были изучены ранее. Магнитная подсистема соединения состоит из медных спиновых цепочек $S = 1/2$ и изолированных магнитных центров Cu^{2+} в соотношении 1:1.

В ходе работы были проведены измерения полевых и температурных зависимостей намагниченности для нашего соединения. Анализ магнитных и структурных данных показал, что обменное взаимодействие в спиновых цепочках ферромагнитно. Это было подтверждено экспериментально 3 фактами: 1) резкий рост зависимостей $M(B)$ в слабых полях (при низких температурах); 2) температура Вейса из обработки законом Кюри–Вейса является положительной ($\theta = 1,88$ К); 3) интеграл обменного взаимодействия из обработки моделью Изинга оценивается как положительная величина ($J = 4-5$ К). Признаков фазовых переходов в области температур от 2 К до 300 К и полей от 0 до 9 Тл обнаружено не было. Также был теоретически рассчитан диамагнитный вклад магнитной восприимчивости $\chi_0 = -3,1 \cdot 10^{-4}$ emu/mol (экспериментальное значение χ_0 получилось $-2,1 \cdot 10^{-2}$ emu/mol).

Также мы провели измерение ЭПР, что позволило определить усредненный фактор Ланде $g = 2,13$, исследовать, какие кристаллографические позиции меди присутствуют в соединении. С высокой вероятностью наша ситуация аналогична соединению $\text{Rb}_2\text{CaCu}_6(\text{PO}_4)_4\text{O}_2$, описанному в статье [2]. В нашем соединении — три кристаллографические позиции меди, отвечающие изолированным ионам, цепочечным ионам и ионам в присутствующей в веществе примеси $\text{Cu}(\text{CCl}_3\text{COO})_2(\text{H}_2\text{O})_3$. Последняя предполагается нами парамагнитной, исходя из анализа кристаллической структуры.

Список литературы

- [1] Maekawa S. Superconductivity in spin ladders.
[2] Aksenov S., Borovikova S., Mironov S., Yamnova S., Volkov S., Ksenofontov D., Gurbanova D., Dimitrova D., Deyneko D., Zvereva E., Maximova E., Krivovichev S., Burns S., Vasiliev S. $\text{Rb}_2\text{CaCu}_6(\text{PO}_4)_4\text{O}_2$, a novel oxophosphate with a shchurovskyite-type topology: synthesis, structure, magnetic properties and crystal chemistry.

Magnetic interaction in doped 2D perovskites with nanoscale inhomogeneity: lattice nonlocal effects vs superexchange

V.A. Gavrichkov, S.I. Polukeev

L.V. Kirensky Institute of Physics, SB RAS, Krasnoyarsk, Russia

The subtle experimental studies STM (Scanning Tunneling Microscope) and SP (Spin polarized) STM using scanning tunneling conductivity, EXAFS (X-ray Absorption Fine Structure) and multiscale scanning nano X-ray diffraction over a wide range of temperature and doping unambiguously indicate that there is a clear connection between the multiscale stripe texture and the quantum coherence of quasiparticles in perovskite high- T_c superconductors. High-temperature superconductivity in copper oxides (cuprates) is also believed to originate from magnetic spin excitations that bind Cooper pairs. We showed that two different stripes can be represented as a superposition of a pair of stripes, $U(\theta_U)$ or $D(\theta_D)$ [1], characterized by perovskite tilts where one of the pair is rotated in relation to the other partner by an angle $\Delta\theta = \pi/2$. Here,

$$\theta_U = \frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}, \frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4} \text{ and } \theta_D = 0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}$$

are the orientation angles of the tilted CuO_6 octahedron in the CuO_2 plane. The spatial distribution of the $U(\theta_U)$ and $D(\theta_D)$ stripes is reduced to all possible maps in the well-known mathematical four-color theorem. Both the periodic striped puddles and random structures can be represented by using planar graphs with a chromatic number $\chi \leq 4$ [2]. Here we turned to the color approach in order to investigate the

superexchange interaction in doped 2D HTSC perovskites. We also used the method of calculating the superexchange interaction developed by us for magnetic oxides of transition elements Cu, Fe, Co, Mn, etc. under pressure [3] and optical pumping [4]. Our conclusions are the following.

1. The nonlocal JT effect (in the positive potential of rock salt LaO layers) only in the $N_-(d^8)$ hole sector along the tilt angle $\varphi_D = 10 \div 14^\circ$ of octahedron CuO_6 at the orientation angle θ_D (b_{1g} — tilting mode) in $D(\theta_D)$ stripes is accompanied by a stripe nanostructure with charge and spin inhomogeneities. Moreover, formally, the maximum hole concentration $x=1$ corresponds to the minimum of the adiabatic potential, and $U(\theta_U)$ stripes with octahedron tilted at the angle $\varphi_U \approx 4^\circ$ and oriented at the angle θ_U (a_{1g} — tilting mode) form dielectric regions. In regular line stripe and checkerboard stripe structures with the chromatic number $\chi=2$ we can form a new JT cell, during the translation of which the CuO_2 layer structure and the number of hole carriers in the JT cell are constants. The state of the JT cell itself is fourfold degenerate in angle θ_n . All four states Ψ_{θ_n} where the phase $\theta_n = 0, \pi/4, \pi/2, 3\pi/4$ can be obtained by simultaneously rotating all CuO_6 octahedra through an angle $\delta\theta = \pi/4$ or the cyclic permutation of colors — differently oriented $U(\theta_U)$ and $D(\theta_D)$ stripes. In particular, the same width of $U(\theta_U)$ and $D(\theta_D)$ stripes, any CuO_6 octahedron can be located simultaneously, both in $U(\theta_U)$ and in $D(\theta_D)$ stripes without a well specific orientation angle $\theta_D(\theta_U)$ of the octahedron with a tilting angle $\varphi_D(\varphi_U)$.

2. At the spontaneous symmetry breaking with respect to the orientation angle θ of the tilted CuO_6 octahedron, a static spatial distribution of the $U(\theta_U)$ and $D(\theta_D)$ stripes in doped $LSCO$ takes place. In the static structure of the CuO_2 layer, the inhomogeneous superexchange interaction has the well-known Anderson form $J_{ij}^{(0)} = 2t^2/U$ for interacting ions Cu^{3+} with spin $1/2$, but is limited in space by $U(\theta_U)$ stripes with zero hole concentration $x=0$.

3. Without spontaneous symmetry breaking with respect to the orientation angle θ of the tilted CuO_6 octahedron, a new JT cell a new cell can be constructed in the periodic stripe structure with the fourfold degenerate ψ_{θ_n} state in phase θ_n and a nonuniform distribution of hole density. The “ideal” CuO_2 structure (without tilting effects) is restored, but with anisotropic effects of nonlocality in the arrangement of oxygen ions. The magnitude of homogeneous superexchange is suppressed from its magnitude $J_{ij}^{(0)}$ in the undoped *LCO* material by the exponential factor $J_{ij} \approx J_{ij}^{(0)} \cdot \exp\left(-\frac{\delta\varphi_D^2 + \delta\theta_D^2}{4}\right)$, where $\delta\varphi_D = \varphi_D - \varphi_U$, and $\delta\theta_D = \theta_D - \theta_U$, due to dynamical quenching [5] for the CuO_6 octahedron surrounded by two symmetrical LaO rock salt layers. In the structure of an “ideal” CuO_2 layer, the percolation concept of the exchange interaction doesn't work anymore, and the concentration dependence of the exchange interaction will be different. The angular θ symmetry breaking and the transition to the inhomogeneous static case can be induced by the effect of different widths of $U(\theta_U)$ and $D(\theta_D)$ stripes (for example, hole concentration) and temperature due to the destruction of phase θ_n coherence in CuO_2 plane.

4. In n-type *LNCO* cuprates, the JT effect in the $N_+(d^{10})$ configuration is impossible, and the $U(\theta_U)$ and $D(\theta_D)$ stripe nanostructure is absent. In contrast to the p-type *LSCO*, the superexchange interaction in n-type *LNCO* cuprates should not be subjected by the dynamic quenching and a concept of percolation is correct.

This work was supported by the RSF grant 22-22-00298.

References

- [1] Bianconi N., Saini L., Lanzara L., Missori L., and Rossetti T., Determination of the local lattice distortions in the CuO_2 plane of $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$. *Phys. Rev. Lett.*, **76**, 3412–3415 (1996).

- [2] Gavrichkov V., Bianconi V. et al. Is there any hidden symmetry in the stripe structure of perovskite high-temperature superconductors? *J. Phys. Chem. Lett.*, **10**, 1840–1844, (2019).
- [3] Gavrichkov V.A., Polukeev S.I., and Ovchinnikov S.G. Cation spin and superexchange interaction in oxide materials below and above spin crossover under high pressure. *Phys. Rev. B* **101**, 094409 (2020).
- [4] Mikhaylovskiy V., Huisman V., Gavrichkov V.A., Polukeev S.I., Ovchinnikov S.G., Afanasiev D., Pisarev D., Rasing D., and Kimel A.V., Resonant pumping of d-d crystal field electronic transitions as a mechanism of ultrafast optical control of the exchange interactions in iron oxides. *Phys. Rev. Lett.*, **125**, 157201 (2020).
- [5] Ham Frank S., Dynamical Jahn–Teller effect in paramagnetic resonance spectra: orbital reduction factors and partial quenching of spin-orbit interaction. *Phys. Rev.*, **138**, A1727 (1965).

Magnetic transition from spiral to ferromagnetic structure in B20 compounds $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$: small angle neutron scattering study

S.V. Grigoriev^{1,2}, O.I. Utesov^{2,1}, N.M. Chubova³, L.A. Azarova^{1,2}, S.-A. Siegfried⁴, A. Heinemann⁴, D. Menzel⁵

¹*Petersburg Nuclear Physics Institute NRC “Kurchatov institute”, Gatchina, St. Petersburg, Russia*

²*Saint-Petersburg State University, Ulyanovskaya 1, St. Petersburg, Russia*

³*National Research Center “Kurchatov institute”, Moscow, Russia*

⁴*Helmholtz Zentrum Hereon, Geesthacht, Germany*

⁵*Technische Universität Braunschweig, Braunschweig, Germany*

The cubic noncentrosymmetric structure of the B20 compounds produces the helical (homochiral) structure with the wave vector $k_s = D/J$ balanced by the competition of two interactions: the large ferromagnetic exchange interaction J and small antisymmetric Dzyaloshinskii–Moriya (DM) interaction D .

A number of mixed Dzyaloshinskii–Moriya helimagnets, which good representative is $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, demonstrate a switch of the sign of magnetic chirality in dependence of concentration x . The sign of magnetic chirality is dictated by the structural chirality and chemical elements (Fe, Co) as well. The switch of chirality is accompanied by transformation of the helix structure to the ferromagnet and is observed at $x_c = 0,65$. Moreover, this transformation (helimagnet – ferromagnet) occurs as a function of temperature. We observe the decrease of the helical wave vector k_s with lowering temperature from $T_c = 17$ K and its abrupt zeroing at $T_f = 7$ K. The magnetic field applied not along the “easy” but along the “hard” anisotropic axis is able to restore the helical structure in the temperature range below T_f . The mechanism of the transformation is theoretically described by a competition between the cubic anisotropy and the DM interaction. We show that anisotropy-induced ferromagnet has nonreciprocal magnon spectrum due to DM interaction even in the absence of the external magnetic field.

Эволюция магнитной структуры $\text{FeP}_{1-x}\text{As}_x$ при замещении фосфора на мышьяк

С.В. Журенко^{1,2,*}, А.В. Ткачѳв¹, Н.Е. Гервиц¹, А.В. Гунбин¹,
И.Г. Силкин³, И.Г. Морозов³, А.С. Москвин⁴, А.А. Гиппиус^{1,2}

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

²Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
физический факультет, г. Москва, Россия

³Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, г. Москва, Россия

⁴Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: Zhurenko@lebedev.ru

В нашей недавней работе с помощью ЯМР-спектроскопии на ярах ^{31}P была подробно исследована геликоидальная магнитная структура поликристаллического и монокристаллического FeP [1, 2]. По данным ЯМР,

магнитная структура FeP гораздо лучше описывается данными дифракции нейтронов [3], чем мѳссбауэровской спектроскопии [4], а именно двумя практически гармоничными геликоидами на двух неэквивалентных атомах железа. Для изучения влияния гомовалентного замещения в немагнитной (фосфорной) позиции бинарного гелимагнетика FeP на его магнитную структуру был синтезирован однофазный поликристаллический образец $\text{FeP}_{0,5}\text{As}_{0,5}$ [5].

Предварительные исследования магнитной структуры $\text{FeP}_{0,5}\text{As}_{0,5}$ методом мѳссбауэровской спектроскопии показали, что гелимагнитная структура $\text{FeP}_{0,5}\text{As}_{0,5}$ аналогична таковой в исходном соединении FeP [4, 5]. Однако из-за высокого квадрупольного расщепления мѳссбауэровских спектров однозначно выявить детали магнитной структуры этого образца не представляется возможным. Поэтому наиболее подходящим методом изучения магнитной структуры этого соединения является спектроскопия ЯМР.

В данной работе мы представляем спектры ЯМР ^{31}P с разверткой по полю на нескольких фиксированных частотах в зависимости от температуры и спектры ЯМР в нулевом поле при 4,2 К, выполненные на однофазном поликристаллическом образце $\text{FeP}_{0,5}\text{As}_{0,5}$ с 50 %-ным замещением P на As. Мы обнаружили, что, в противоположность исходному бинарному гелимагнетиту FeP , геликоидальная магнитная структура в $\text{FeP}_{0,5}\text{As}_{0,5}$ на ядрах фосфора не проявляется. Вместо резкого фазового перехода из парамагнитного в спиральное спиновое состояние при 120 К наблюдается плавный переход в состояние типа спинового стекла в диапазоне температур 20–30 К.

Список литературы

- [1] Gippius A.A., Zhurenko S.V. et al. NMR analysis of the magnetic structure and hyperfine interactions in a FeP binary helimagnetic. *Physics of the Solid State*, **61**(5), 723–727 (2019).
- [2] Gippius A.A., Tkachev A.A., Zhurenko A.A. et al. NMR study of magnetic structure and hyperfine interactions in the binary helimagnet FeP . *Phys. Rev. B*, **102**, 214416–214416 (2020).

- [3] Felcher G.P., Smith G.P., Bellavance D., Wold D. *Phys. Rev. B*, **3** (1971) 3046.
 [4] Sobolev A.V., Presniakov A.V., Gippius A.V. et al. *Journal of Alloys and Compounds*, **675**, p. 277–285 (2016).
 [5] Presniakov I.A. et al. Magnetic structure and anisotropic hyperfine interactions of the $\text{FeP}_{1-x}\text{As}_x$ system ($0 < x < 0,5$). In International Conference on the Applications of the Mossbauer Effect ICAME 2015 — Book of Abstracts, page 165. Hamburg, Germany (2015).

Опрокидывание спинов ромбоэдрического кристалла FeCO_3 под действием внешнего магнитного поля

М.С. Крылов

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

Сидерит (FeCO_3) — широко распространенный на Земле минерал, содержащий в массовом отношении 48 % железа и не содержащий серы или фосфора, что делает его ценным для получения железа. Сидерит по своей симметрии изоструктурен минералам кальцита (CaCO_3) и магнезита (MgCO_3) и относится к тригональной системе с ромбоэдрической формой. Пространственная группа FeCO_3 — $R\bar{3}c$, а кристаллографическая элементарная ячейка содержит два атома железа. Как правило, сидерит считается ионным кристаллом, в котором ионы Fe^{2+} имеют электронную конфигурацию $3d^64s^0$, поэтому ионы Fe^{2+} могут находиться в двух состояниях: высокоспиновом (HS, $S = 2$) или низкоспиновом (LS, $S = 0$). Эксперименты по магнитной восприимчивости и дифракции нейтронов показали, что FeCO_3 представляет собой антиферромагнитное соединение с низкой температурой Нееля 38 К, с магнитными моментами атомов, направленными вдоль тригональной оси [1–4]. Сидерит интересен тем, что переходит из антиферромагнитного состояния HS в немагнитное состояние LS между 40 и 50 ГПа, что сопровождается уменьшением объема в 11 % [5–8].

В этой работе на основе термодинамической теории слабого ферромагнетизма антиферромагнетиков И.Е. Дзялошинского [9], для антиферромагнитного состояния FeCO_3 с магнитными моментами, направленными вдоль тригональной оси (C_3), показано, что во внешнем поле, приложенном в базисной плоскости (перпендикулярно оси C_3), у кристалла появляется антиферромагнитный момент I_{\perp} , также лежащий в базисной плоскости и перпендикулярный полю (см. рис. 1). При некотором определенном значении поля H_c происходит опрокидывание момента I в базисную плоскость. Такие магнитные свойства кристалла, помещенного во внешнее поле, связаны с присутствием в разложении термодинамического потенциала, предложенного Дзялошинским, определенных слагаемых, а именно анизотропного члена $(l_x m_y - l_y m_x)$. На рис. 2 представлены получающиеся характерные зависимости для m_x , l_z , l_y и dm_x/dH_x в случае поля, направленного вдоль оси симметрии второго порядка U_2 (ось x).

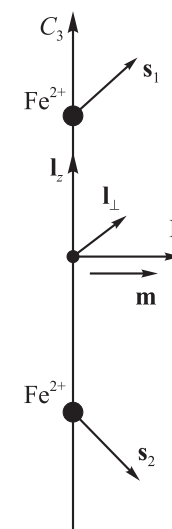


Рис. 1. Направление компонентов антиферромагнитного вектора I во внешнем поле, приложенном в базисной плоскости, перпендикулярно оси C_3

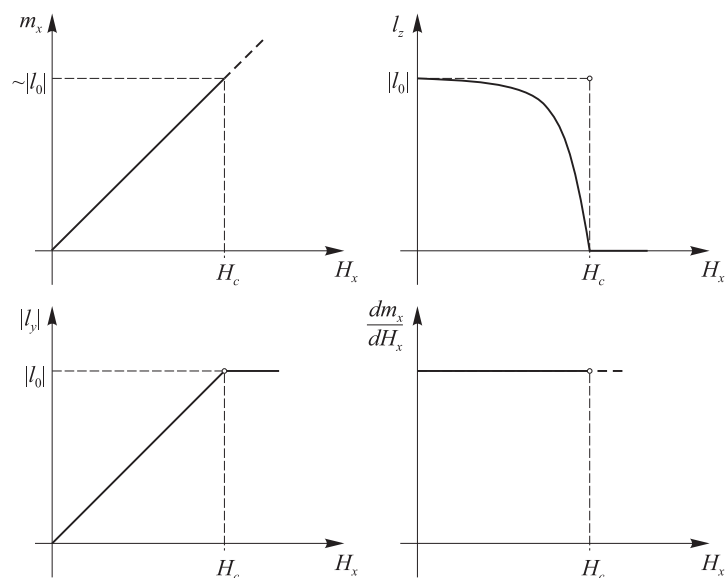


Рис. 2. Характерные зависимости компонентов антиферромагнитного вектора \mathbf{I} и намагниченности \mathbf{m} в поле, приложенном вдоль оси второго порядка U_2

Список литературы

- [1] Jacobs I. *J. Appl. Phys.*, **34**, 1106 (1963).
- [2] Bizette H. *J. Phys. Radium*, **12**, 161 (1951).
- [3] Zhou Y.-Y., Yin C.-H. *Phys. Rev. B*, **47**, 5451 (1993).
- [4] Alikhanov R.A. *Sov. Phys. JETP*, **9**, 1204 (1959).
- [5] Mattila A., Pylkkanen T., Rueff J.-P., Huotari S., Vanko S., Hanfland S., Lehtinen M., Hamalainen K. *J. Phys.: Condens. Matter*, **19**, 386206 (2007).
- [6] Nagai T., Ishido T., Seto Y., Nishio-Hamane D., Sata N., Fujino K. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 215, 012002 (2010).
- [7] Lavina B., Dera P., Downs R.T., Yang W., Sinogeikin S., Meng Y., Shen G., Schiferl D. *Phys. Rev. B*, **82**, 064110 (2010).
- [8] Ming X., Wang X.-L., Du F., Yin J.-W., Wang C.-Z., and Chen G. *J. Alloys Compd.*, 510, LI (2012).
- [9] Dzyaloshinsky I. E. *Sov. Phys. JETP*, **5**, 1259 (1957).

Влияние высокого давления на кристаллические и магнитные структуры ван-дер-ваальсовых магнетиков

О.Н. Лис^{1,2}, Д.П. Козленко¹, С.Е. Кичанов¹, Е.В. Лукин¹

¹Лаборатория нейтронной физики им И.М. Франка,

Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия

²Институт физики, Казанский федеральный университет, г. Казань, Россия

В последнее время активно исследуются так называемые ван-дер-ваальсовы слоистые и двумерные (монослойные) системы, наиболее известными представителями которых являются CrBr_3 и Fe_3GeTe_2 . Магнитные свойства в таких материалах существенно зависят от структуры и количества слоев, а также чувствительны к внешним воздействиям, что обуславливает их практическую перспективность. Недавно обнаружили сохранение магнитного упорядочения в таких системах вплоть до высоких температур и в пределах монослоя. Кроме того, эти системы интересны и с фундаментальной точки зрения, за счет проявляющих интересных физических явлений при изменении термодинамических параметров, например: переход «диэлектрик–металл», спиновые возбуждения, скирмионные состояния, спиновый кроссовер, сверхпроводимость.

По сравнению с другими экспериментальными методами воздействие высокого давления является прямым методом контролируемого изменения магнитных взаимодействий за счет вариации межатомных расстояний и углов. Проведение исследований при высоких давлениях дают уникальную возможность изучения взаимосвязи изменений структурных параметров кристалла с изменениями магнитной структуры, что необходимо для понимания природы и механизмов физических явлений, наблюдаемых в исследуемых объектах.

Настоящая работа посвящена исследованию кристаллических и магнитных структур CrBr_3 и Fe_3GeTe_2 в широких диапазонах температур и давлений. Детальные исследования кристаллической структуры материалов проводились с использованием дифракции нейтронов на дифрактометре ДН-6 импульсного высокопоточного реактора ИБР-2 (ЛНФ,

ОИЯИ, Дубна, Россия) в диапазоне температур 6–300 К и при давлении до 5 ГПа. В дополнение к нейтронной дифракции были проведены исследования этих соединений с помощью методов рамановской спектроскопии и рентгеновской дифракции при изменении термодинамических параметров. Исследования нейтронной дифракции SrVg_3 обнаружили формирование дальнего ферромагнитного упорядочения при $T_c = 37\text{K}$. В области T_c были обнаружены отрицательное тепловое объемное расширение и также аномальное поведение межатомных расстояний и углов. Соответствующие эффекты были обнаружены в колебательных спектрах этого соединения. Заметные аномалии вблизи точки Кюри наблюдаются на температурных зависимостях рамановских сдвигов, что указывает на сильную спин-фононную связь в SrVg_3 . Воздействие высокого давления позволило выявить необычные изменения на дифракционных и рамановских спектрах, которые могут быть связаны с фазовыми превращениями в SrVg_3 . Также были получены барические зависимости параметров элементарной ячейки, длин связей. Рентгеновская дифракция Fe_3GeTe_2 при высоком давлении выявила аномалии в барическом поведении структурных параметров без четкого структурного перехода с изменением симметрии. Исчезновение колебательных мод Fe_3GeTe_2 при высоких давлениях и низкой температуре может быть вызвано подавлением дальнего магнитного порядка.

Синтез и изучение магнитной подсистемы

$\text{Cs}_2\text{Cu}_3(\text{SeO}_3)_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

А.В. Моськин^{1,2}, Е.С. Козлякова^{1,2}, Л.В. Шванская^{1,2}, А.Н. Васильев^{1,2}

¹Московский государственный университет, г. Москва, Россия

²НИТУ «МИСиС», г. Москва, Россия

Изучение взаимосвязи кристаллических мотивов с проявляемыми магнитными свойствами материалов — одна из важных задач физики конденсированного состояния. В системах с пониженной размерностью

решетки из магнитных центров большую роль играют ионы-посредники, через орбитали которых протекает обменное взаимодействие. Установление влияния таких заместителей — глобальная задача нашего исследования.

В данной работе, с целью получить цепочечные соединения кронкитоподобной структуры, был проведен синтез соединения $\text{Cs}_2\text{Cu}_3(\text{SeO}_3)_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, полученный при побочной реакции в гидротермальных условиях. Для получения данного соединения были смешаны порошки малахита $\text{Cu}_2\text{CO}_3(\text{OH})_2$, селенистой кислоты H_2SeO_3 и карбоната цезия Cs_2CO_3 в соотношении 1:3:2, загружены в автоклав с водой (степень заполнения — 20 %), а затем нагревалась в течение 3 дней до температуры в 200 °С. Затем печь с автоклавом медленно охлаждали в течение одного дня. В полученном растворе были обнаружены кристаллы октаэдрической формы. На поверхности кристаллов был обнаружен оксид меди, который был механически отмыт с помощью ультразвуковой обработки в изопропиловом спирте. Полученные кристаллы были охарактеризованы с помощью метода рентгеновской дифракции, а также их структура расшифрована с помощью Лауэ-дифракции. Элементный состав подтвержден данными микрозонда. Кристаллическая структура $\text{Cs}_2\text{Cu}_3(\text{SeO}_3)_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ обладает пространственной группой симметрии $I4_1/a$. Кристаллографическая ось c совпадает с вершиной октаэдра.

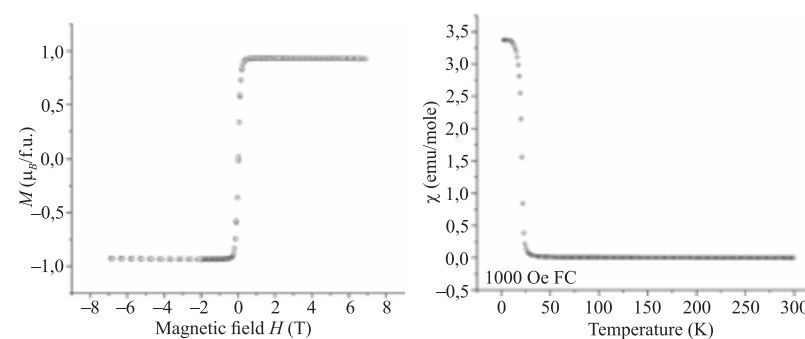


Рис. 1. Слева: полевая зависимость намагниченности при 2 К. Справа: температурная зависимость магнитной восприимчивости $\text{Cs}_2\text{Cu}_3(\text{SeO}_3)_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

С целью изучить магнитную подсистему соединения была измерена температурная зависимость магнитной восприимчивости кристалла вдоль направления c . Оказалось, что соединение испытывает ферромагнитное упорядочение при температуре $T = 25$ К. При измерении полевой зависимости намагниченности при температуре в 2 К наблюдается плато-1/3, что говорит о экзотичности полученной магнитной подсистемы, которая представлена двумя перпендикулярными цепочками Cu-O-Cu, связанными между собой дополнительными атомами меди.

Влияние магнитного поля на спиновый антиферромагнетик с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей

К.Ш. Муртазаев*, А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов

Институт физики ДФИЦ РАН, г. Махачкала, Россия

**E-mail: skurban@mail.ru*

Исследование фазовых переходов (ФП) и критических явлений фрустрированных спиновых систем в настоящее время является одним из наиболее актуальных и сложных задач в области физики конденсированных сред [1, 2]. Это связано с тем, что основное состояние системы сильно вырождено при наличии фрустраций. Строго и последовательно на основе микроскопических гамильтонианов такие системы могут быть изучены методами Монте-Карло (МК) [3–7]. Репличный алгоритм метода МК безусловно является мощным аппаратом для решения таких задач [8]. Поэтому в данном исследовании был использован высокоэффективный репличный обменный алгоритм метода МК.

Гамильтониан антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической (ОЦК) решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей, а также магнитного поля имеет следующий вид:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j) - J_2 \sum_{\langle\langle i,l \rangle\rangle} (S_i \cdot S_l) - H \sum_i S_i,$$

где J_1 и J_2 — константы обменного антиферромагнитного взаимодействия первых ($J_1 = -1$) и вторых ($J_2 = -1$) ближайших соседей, $S_{i,j} = \pm 1$ — изинговский спин, H — величина магнитного поля (величина магнитного поля приводится в единицах $|J_1|$).

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $2 \times L \times L \times L = N$, $L = 12 \div 60$, где L — размер решетки, N — число спинов в системе. Величина значений внешнего магнитного поля менялась в интервале $7,0 \leq H \leq 14,0$. Для анализа природы и характера ФП использовались гистограммный метод и метод кулянтов Биндера [9].

На рисунке 1 видно, что с увеличением значений H наблюдается сдвиг максимумов теплоемкости в сторону более низких температур. Сдвиг максимумов теплоемкости в сторону более низких температур обусловлен тем, что магнитное поле усиливает конкурирующее взаимодействие между первыми и вторыми ближайшими соседями. При значениях магнитного поля $11,0 \leq H \leq 13,0$ в критической области наблюдаются более резкие пики. Более резкие пики обычно характерны для ФП первого рода. Для значения поля $H = 14$ не наблюдается резких пиков. Можно сказать, что при полях $H = 14$ и более магнитное поле подавляет фазовый переход.

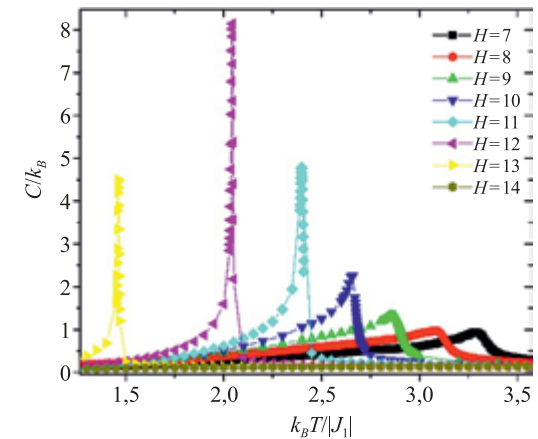


Рис. 1. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T / |J_1|$

На рисунке 2 видно, что гистограмма распределения энергии для систем с линейным размером $L = 60$ при $H = 8,0$ имеет один максимум в критической области $T_N = 3,120$. Это говорит о том, что в системе реализуется ФП первого рода. Такие гистограммы вероятности распределения энергии были построены для всех значений полей в интервале $7,0 \leq H \leq 14,0$ вблизи критических температур.

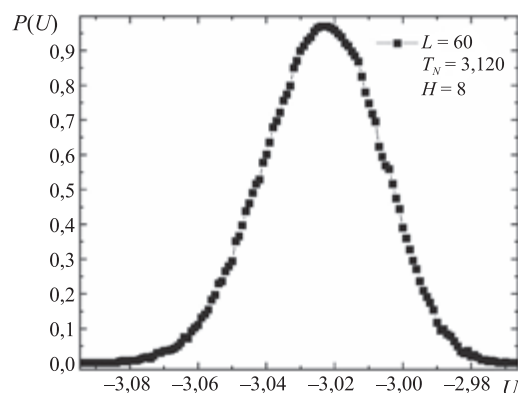


Рис. 2. Гистограмма распределения энергии для $H = 8,0$

Зависимости кумулянта Биндера U_L от температуры при $H = 8$ для разных значений L представлены на рис. 3. На рисунке видна четко выраженная точка пересечения ($T_N = 3,120$), которая является критической температурой и свидетельствует о ФП второго рода.

Выполнено исследование антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с конкурирующими обменными взаимодействиями во внешнем магнитном поле с использованием репличного алгоритма метода Монте-Карло. Рассмотрен интервал значений величины магнитного поля $7,0 \leq H \leq 14,0$.

Показано, что в интервале значений магнитного поля $7,0 \leq H \leq 10,0$ происходит фазовый переход второго рода, а в интервале $11,0 \leq H \leq 13,0$ — фазовый переход первого рода. Установлено, что дальнейшее увеличение величины магнитного поля приводит к подавлению фазового перехода.

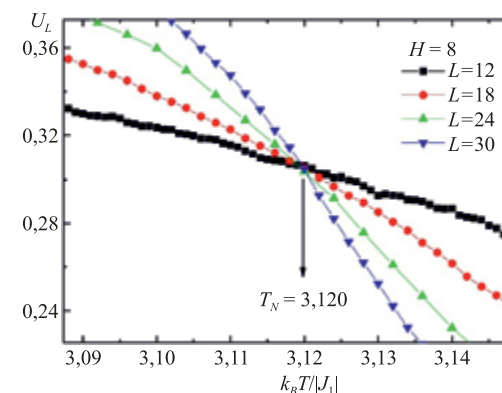


Рис. 3. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T / |J_1|$ для разных L при $H = 8,0$

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90079-аспиранты, а также работа поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

Список литературы

- [1] Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука (1982).
- [2] Ма Ш. Современная теория критических явлений. М.: Мир (1980).
- [3] Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Кассан-Оглы Ф.А., Курбанова Д.Р. *ЖЭТФ*, **147**, 1 (2015).
- [4] Kassin-Ogly F.A., Murtazaev A.K., Zhuravlev A.K., Ramazanov M.K., Proshkin A.I. *J. Mag. Mag. Mater.*, **384**, 247 (2015).
- [5] Муртазаев А.К., Рамазанов М.К. *Письма в ЖЭТФ*, **101** (2015).
- [6] Муртазаев А.К., Рамазанов М.К. Бадиев М.К. *ЖЭТФ*, **142**, 2 (2012).
- [7] Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Badiev M.K. *Physica B: Condensed Matter*, **476**, 1 (2015).
- [8] Mitsutake A., Sugita Y., Okamoto Y. *Biopolymers. Peptide Sci.*, **60**. P. 96 (2001).
- [9] Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Муртазаев К.Ш., Магомедов М.А., Бадиев М.К. *ФТТ*, **62**, 2 (2020).

Исследование спектра спиновых возбуждений 2D-магнетика LiNiPO₄ методом ИК-спектроскопии

М.С. Радионов^{1,*}, С.А. Климин¹, А.В. Песчанский²

¹Институт спектроскопии РАН, г. Москва, Россия

²ФТИИТ им. Б.И. Веркина НАН Украины, г. Харьков, Украина

*E-mail: radionov.ms@phystech.edu

Интерес научного сообщества к соединению LiNiPO₄ вызван как возможным применением этого материала в качестве катода для литий-ионных батарей, так и его магнитными свойствами. При температуре $T_N = 21,8$ К в кристалле происходит фазовый переход, связанный с магнитным упорядочением, а корреляции дальнего порядка наблюдаются в нем при низких температурах вплоть до 35 К [1]. LiNiPO₄ является мультиферроиком с сильным взаимодействием магнитной, зарядовой и решеточной степеней свободы. В частности, сообщается о наблюдении в исследуемом соединении электромагнонов [2], кроме этого, сильное спин-фононное взаимодействие приводит к смещению частот фононов при температуре фазового перехода [3]. Спиновые возбуждения кристалла LiNiPO₄ экспериментально были обнаружены и идентифицированы в работе [2], без подробных температурных зависимостей параметров этих возбуждений.

В данной работе проведено исследование температурных зависимостей спектров пропускания монокристалла LiNiPO₄ с целью получения информации о параметре порядка и о коррелированной фазе. Измерения проводились в поляризованном свете в шести конфигурациях для возможности определения активности магнито- и электродипольных переходов, на Фурье-спектрометре, оснащенный гелиевым криостатом с контроллером, что позволило проводить измерения спектров спиновых возбуждений с шагом по температуре в 1 К. Наблюдение спектров поглощения спиновых возбуждений оказывается возможным, так как благодаря особенностям фононного спектра в кристалле LiNiPO₄ при низких температурах возникает окно прозрачности в области низкочастотного

спектра пропускания [4]. Были обнаружены пять узких линий и широкая полоса поглощения. Все они ярко проявляются только при температурах ниже температуры T_N , а при повышении температуры резко теряют интенсивность и сильно уширяются, а затем и вовсе исчезают при температурах уже выше T_N , что свидетельствует о том, что эти линии и полоса относятся к возбуждениям магнитоупорядоченной фазы, а широкие линии, наблюдаемые выше T_N , доказывают существование корреляций дальнего порядка [1].

Решение уравнения Ландау–Лифшица с гамильтонианом магнитной ячейки, взятым из модели, в которой выделяется четыре магнитные подрешетки [2], позволило получить частоты, интенсивности и правила отбора для четырех спиновых возбуждений. Как результат, из модели следует присутствие в спектре трех магнонов и одного возбуждения, которое не должно иметь отклика на магнитное поле. Этот теоретический результат согласуется с экспериментально измеренными спектрами. Остальные наблюдаемые возбуждения могут быть отнесены к линиям двухмагнонного поглощения либо электромагнонам.

Построенные температурные зависимости корня интенсивности линий поглощения спиновых возбуждений, который можно использовать в качестве параметра магнитного порядка, подтверждают тот факт, что LiNiPO₄ является квазидвумерным магнетиком, поскольку критический показатель совпадает с критическим показателем в двумерной модели Изинга.

Список литературы

- [1] Lewińska S., Szewczyk A., Gutowska M.U. et al. *Phys. Rev. B*, **99**, 214440 (2019).
- [2] Peedu L., Kocsis V., Szaller D. et al. *Phys. Rev. B*, **100**, 024406 (2019).
- [3] Radionov M.S., Klimin S.A., Glamazda A.Yu., Peschanskii A.V. *Low Temperature Physics*, **48**, 246 (2022).
- [4] Klimin S.A., Radionov M.S., Yakovlev V.A., Novikova N.N., Peschanskii A.V. *Optics and Spectroscopy*, **129**, p. 42–46 (2021).

Особенности магнетизма в системах с синглетным основным состоянием: влияние промежуточно-валентных ионов на дальний магнитный порядок

П.С. Савченков^{1,*}, П.А. Алексеев¹, В.Н. Лазуков¹

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

*E-mail: savch92@gmail.com

В работе рассмотрены особенности явления «наведенного» магнитного упорядочения на примере соединений редкоземельных элементов PrNi и EuCu₂Si₂.

Для описания формирования дальнего магнитного порядка в системе с синглетным основным состоянием PrNi предложена реалистичная трехуровневая модель. В рамках модели учтены реальная схема уровней в кристаллическом поле для Pr³⁺, дипольные магнитные матричные элементы переходов между ними, а также наличие двух магнитных атомов в примитивной ячейке. Последнее приводит к формированию акустических и оптических мод для каждого из исходно одноионных возбуждений, соответствующих переходам между синглетами.

Отдельное внимание в работе уделено влиянию дефектов различной природы в редкоземельной подрешетке (немагнитная примесь La — Pr_{1-x}La_xNi [1] и промежуточно-валентная (ПВ) Се — Pr_{1-x}Ce_xNi [2]) на условия возникновения дальнего магнитного порядка (ДМП) в системах на основе PrNi. Предложен и реализован микроскопический подход к структурному моделированию влияния дефектов на ДМП.

Результаты экспериментов по замещению на немагнитную примесь La демонстрируют наличие критического параметра, определяющего температуру перехода. Установлено, что критический параметр формируется в результате конкурирующих взаимодействий: эффектов кристаллического поля и обменного взаимодействия. Переход в ферромагнитную фазу при замещении Pr на La наблюдается вплоть до концентрации La $x = 0,5$ (сплошная линия на рис. 1).

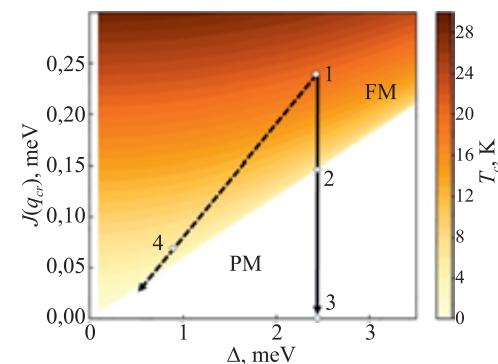


Рис. 1. Диаграмма магнитных состояний систем на основе PrNi. Представлена взаимосвязь между температурой магнитного упорядочения (T_c), параметра обменного взаимодействия $J(q)$ и величиной расщепления в кристаллическом поле (Δ). Сплошной линией отмечено изменение T_c с увеличением концентрации La в Pr_{1-x}La_xNi, пунктирной — изменение T_c с увеличением концентрации Ce в Pr_{1-x}Ce_xNi. Точки соответствуют соединениям: 1) PrNi, 2) Pr_{0,5}La_{0,5}Ni, 3) LaNi, 4) Pr_{0,25}Ce_{0,75}Ni

Замещение Pr на ПВ-ион Се приводит к увеличению области существования ДМП на фазовой диаграмме (пунктирная линия на рис. 1), по сравнению с замещением немагнитной примесью. Переход в упорядоченное состояние в Pr_{1-x}Ce_xNi наблюдается вплоть до $x = 0,9$. Экспериментально установлено, что магнитный момент на ионе Се, находящемся в ПВ-состоянии, себя никак не проявляет, очевидно, ввиду его подавления за счет быстрых спиновых флуктуаций. Основное влияние на температуру магнитного упорядочения от замещения Pr промежуточно-валентным ионом Се обусловлено обнаруженным существенным подавлением расщепления в кристаллическом поле для Pr³⁺.

Для систем с синглетным основным состоянием EuCu₂(Si,Ge)₂ надежно установлено сосуществование однородного ПВ-состояния Eu с ДМП. Опираясь на результаты модели «наведенного магнетизма» для системы типа «синглет–триплет», реально реализующейся в EuCu₂(Si,Ge)₂, предложено реалистичное описание механизмов формирования упорядоченного магнитного состояния.

Список литературы

- [1] Savchenkov P.S., Clementyev E.S., Alekseev P.A. & Lazukov V.N. Induced magnetism and “magnetic hole” in singlet ground state system PrNi. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **489**, 165413 (2019).
- [2] Savchenkov P.S., Clementyev E.S., Lazukov V.N. & Alekseev P.A. Dramatic impact of intermediate-valence impurity on induced magnetism in singlet ground state system PrNi. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **514**, 167187 (2020).

Расслоение магнитной и кристаллической структур в соединениях $\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Ge}$

Д.О. Сканченко¹, Е.В. Алтынбаев^{4,1,2}, А.В. Сидоров^{2,5}, G. Chaboussant³,
N. Martin³, А.Е. Петрова⁵, Д.А. Саламатин^{2,5}, С.В. Григорьев^{1,4},
А.В. Цвященко^{2,5}, Н.М. Щелкачев², М.В. Магнитская^{2,5}

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»,
г. Гатчина, Россия

²Институт физики высоких давлений имени Л.Ф. Верещагина РАН,
г. Троицк, г. Москва, Россия

³Laboratoire Leon Brillouin, CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France

⁴Санкт-Петербургский государственный университет,
г. Санкт-Петербург, Россия

⁵Физический институт имени П.Н. Лебедева РАН, г. Москва, Россия

Методами малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) и СКВИД-магнитометрии была исследована температурная эволюция магнитной структуры соединений $\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Ge}$. Эти соединения, синтезированные при высоком давлении, кристаллизуются в нецентросимметричную кубическую структуру типа B20 [1]. Отсутствие центра инверсии в расположении магнитных атомов приводит к возникновению антисимметричного обменного взаимодействия Дзялошинского–Мории (ДМ) и, как правило, образованию магнитной спирали [2, 3]. В частности, магнитная система соединения FeGe упорядочивается в магнитную спираль при

температурах ниже $T_c = 278$ К [4]. Тем не менее известно, что бинарное соединение RhGe , которое также кристаллизуется в нецентросимметричную кубическую структуру типа B20, демонстрирует слабый ферромагнетизм ниже $T_m = 140$ К и переходит в сверхпроводящее состояние при $T_c = 4,5$ К [5].

Данные, полученные методом порошковой рентгеновской дифракции, показали, что в широком диапазоне концентраций, $x \in [0,25 \div 0,9]$, на дифрактограммах соединений $\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Ge}$ происходит расщепление дифракционных пиков. При этом дополнительных пиков не наблюдается, что указывает на существование одинаковых структур с близкими параметрами ячейки. Соотношение интенсивностей расщепленных пиков, при этом зависит от x , в то время как ширина расщепления остается практически неизменной. Эти факты, вместе с проведенным теоретическим анализом стабильности двух обнаруженных фаз, указывают на то, что структурное расщепление происходит внутри одного кристаллита, а не является следствием кристаллизации соединений с близкими значениями концентрации x .

Метод СКВИД-магнитометрии также указывает на сосуществование двух магнитных структур в каждом из исследованных образцов в указанном диапазоне концентраций с уникальными температурами магнитного упорядочения. Для определения типов магнитных структур были проведены измерения методом малоуглового рассеяния нейтронов.

По результатам проведенных исследований удалось установить, что в диапазоне концентраций $x < 0,25$ соединений $\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Ge}$ наблюдается геликоидальная структура, температура упорядочения которой, как и волновой вектор магнитной спирали, убывает с ростом x . Дальнейшее увеличение концентрации атомов Rh приводит к расслоению системы на два структурных и, как следствие, магнитных фазовых состояния. Одному из них, с большим параметром ячейки, соответствует ферромагнитное состояние при температурах ниже $T_c = 280$ К для $x = 0,25$. Температура магнитного упорядочения ферромагнитной фазы падает до нуля при $x = 0,95$. Для структуры с меньшим параметром ячейки характерно геликоидальное магнитное упорядочение при температуре $T_c = 260$ К для $x = 0,25$, которая обращается в ноль при $x = 0,9$. Величина волнового век-

тора геликоидальной структуры уменьшается с ростом x от значения $k_s = 0,09 \pm 0,005 \text{ nm}^{-1}$ при $x = 0$ до нуля при $x = 0,5$. Это свидетельствует о переходе магнитной системы исследуемых соединений в ферромагнитное состояние. Дальнейшее увеличение параметра x приводит к росту волнового вектора магнитной спирали. Аналогичное поведение волнового вектора было обнаружено при исследовании магнитной структуры соединений $\text{Fe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Ge}$ и $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ge}$ [6, 7]. Это явление было интерпретировано как переверот магнитной киральности с изменением концентрации x и позднее подтверждено расчетами [8].

Список литературы

- [1] Tsvyashchenko A.V., Less-Common J. Met., **99**, L9 (1984).
- [2] Dzyaloshinskii I.E., Zh. Eksp. Teor. Fiz., **46** 1420 (1964).
- [3] Bak P., Jensen M.H., J. Phys. C, **13**, L881 (1980).
- [4] Lebech B. et al. Journal of Physics: Condensed Matter, **1**, 6105 (1989).
- [5] Tsvyashchenko A.V. et al. J. of All. and Comp., **686**, p. 431–437 (2016).
- [6] Grigoriev S.V. et al. Phys. Rev. Lett., **110**, 207201 (2013).
- [7] Grigoriev S.V., Siegfried S.-A. et al. Phys. Rev. B, **90**, 174414 (2014).
- [8] Koretsune T., Nagaosa N. and Arita R. Sci. Rep., **5**, 13302 (2015).

Магнитное дипольное взаимодействие и делокализация элементарных возбуждений в квантовых магнетиках

О.И. Утёсов^{1,2,3}

¹Санкт-Петербургский государственный университет,
г. Санкт-Петербург, Россия

²«Петербургский институт ядерной физики» им. Б.П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», г. Гатчина, Россия

³Санкт-Петербургская школа физико-математических и компьютерных наук,
НИУ «Высшая школа экономики», г. Санкт-Петербург, Россия

Квантовые магнетики вызывают большой интерес в связи с разнообразием физических явлений, которые в них можно наблюдать. В част-

ности, это квантовые фазовые переходы. Примерами таких веществ являются спин-димерные системы и антиферромагнетики с целым спином и большой одноионной анизотропией типа «легкая плоскость». При слабом внешнем магнитном поле они находятся в фазах с щелью в спектре, отделяющей триплетные элементарные возбуждения от немагнитного основного состояния. С увеличением внешнего поля щель в спектре уменьшается, и при критическом поле происходит квантовый фазовый переход в упорядоченную фазу.

Беспорядок может быть введен в эти вещества контролируемым образом за счет замещения немагнитных атомов, участвующих в суперобменном взаимодействии. В таком случае получается эффективный спиновый гамильтониан с разупорядоченными параметрами. Это, в частности, приводит к появлению низколежащих локализованных состояний в спектре триплетов [1, 2] (в щели и/или на дне триплетной зоны), что обуславливает переход в упорядоченную фазу через промежуточную фазу Бозе стекла [3].

В данной работе рассматривается влияние дальнедействующего магнитного дипольного взаимодействия на свойства локализованных состояний. Подобный эффект ранее изучался для локализованных фононов в разупорядоченных кристаллах, где электрическое дипольное взаимодействие приводит к делокализации этих возбуждений [4]. Ключевым свойством дипольного взаимодействия оказывается его поведение на больших расстояниях, для которых волновые функции локализованных состояний можно считать точечными. Следовательно, эффекты дипольного взаимодействия сводятся к появлению матричных элементов перескока между локализованными состояниями, которые убывают как $1/R^3$. С транспортной точки зрения доминируют «резонансные связи», для которых разность энергий состояний меньше дипольного матричного элемента [5]. Из-за $1/R^3$ убывания матричных элементов число резонансов для данного состояния логарифмически расходится с размером системы, каким бы слабым ни было взаимодействие вне зависимости от концентрации дефектов. С другой стороны, вероятность найти три состояния, между которыми есть резонансы, параметрически мала. Отсюда можно

сделать вывод, что случайные блуждания элементарного возбуждения в среднем происходят по графу без замкнутых циклов, то есть дереву.

Свойства системы обсуждаются с использованием идей метода ренорм-группы. Волновые функции элементарных возбуждений оказываются критическими (число занятых узлов имеет степенную зависимость от размера системы с малым показателем), а, следовательно, безмасштабными и делокализованными. Это приводит также к тому, что динамика системы субдиффузионная, $R \propto T^{1/3}$.

Работа выполнена при поддержке гранта Фонда развития теоретической физики и математики «Базис».

Список литературы

- [1] Utesov O.I., Sizanov A.V., and Syromyatnikov A.V. *Phys. Rev. B*, **90**, 155121 (2014).
- [2] Utesov O.I. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **524**, 167616 (2021).
- [3] Fisher M.P. et al. *Phys. Rev. B*, **40**, 546 (1989).
- [4] Levitov L. *Phys. Rev. Letters*, **64**, 547 (1990).
- [5] Thouless D.J. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, **3**, 1559 (1970).

Вклад антиферромагнитных спиновых скосов в закрутку магнитных спиралей в кубических хиральных гелимагнетиках

В.А. Чижиков, В.Е. Дмитриенко

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

В кубических хиральных ферро- и ферримагнетиках типа MnSi и Cu_2OSeO_3 наблюдаются несколько видов магнитных упорядочений, включая скирмионную фазу A с двойной закруткой поля намагниченности [1–4]. Важной характеристикой закрученных магнитных структур яв-

ляется степень закрутки, или волновое число $k = \mathcal{D} / \mathcal{I}$, где константа \mathcal{I} соответствует изотропному обменному взаимодействию спинов, а \mathcal{D} — антисимметричному обменному взаимодействию Дзялошинского–Мории (ДМ), имеющему спин-орбитальную природу. Как было показано, параметры \mathcal{I} и \mathcal{D} континуального приближения выражаются нетривиальным образом через константы J_{ij} и векторы ДМ \mathbf{D}_{ij} отдельных связей между магнитными атомами [5, 6]:

$$\mathcal{I} = \frac{1}{6} \sum_{i,j} J_{ij} |\tilde{\mathbf{r}}_{ij}|^2, \quad \mathcal{D} = -\frac{1}{6} \sum_{i,j} \mathbf{D}_{ij} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{ij}, \quad (1)$$

где сумма по i берется по магнитным атомам внутри элементарной ячейки кристалла. Здесь векторы $\tilde{\mathbf{r}}_{ij}$, играющие роль межатомных расстояний, в действительности соединяют не реальные положения атомов \mathbf{r}_i и \mathbf{r}_j , а некие эффективные («обменные») координаты $\tilde{\mathbf{r}}_i$ и $\tilde{\mathbf{r}}_j$, являющиеся функциями обменных констант J : $\tilde{\mathbf{r}}_i \equiv \tilde{\mathbf{r}}_i(\{J_{ij}\})$. Физический смысл обменных координат заключается в том, что они обнуляют фазовые сдвиги между магнитными спиралями, относящимися к разным магнитным подрешеткам кристалла.

Заметим, что если бы в (1) стояли реальные координаты атомов, то, в случае строгого выполнения правила Кеффера $\mathbf{D}_{ij} \perp \mathbf{r}_{ij}$ [7], константа \mathcal{D} равнялась бы нулю, что соответствовало бы отсутствию закрутки у поля намагниченности. В случае с обменными координатами, поскольку $\tilde{\mathbf{r}}_{ij} \not\perp \mathbf{r}_{ij}$, остается ненулевой вклад в закрутку первого порядка малости по спин-орбитальному взаимодействию (СОВ), определяемый по формулам (1). В работе [5] мы вычисляли волновое число магнитных спиралей в кристалле Cu_2OSeO_3 , используя формулы (1) и результаты расчетов *ab initio* обменных констант связей J_{ij} и \mathbf{D}_{ij} , выполненных другими авторами [8, 9]. В зависимости от входящих наборов констант были получены значения $k = 0,040$ и $k = 0,189$ для данных из [8, 9] соответственно (при известном экспериментальном значении $k = 0,088$). При этом углы между векторами $\tilde{\mathbf{r}}_{ij}$ и \mathbf{r}_{ij} для разных связей лежали в диапазоне 5–25,5°

и в среднем составляли $12,5^\circ$. Последнее означает, что «приближенное правило Кеффера» может вносить дополнительную малость в степень закрутки магнитной структуры и следует учесть вклады в \mathcal{D} следующего порядка по СОВ.

Также было показано, что, наряду с закруткой магнитной структуры хиральных магнетиков, антисимметричный обмен ДМ может приводить к антиферромагнитным скосам отдельных спинов внутри структуры [10, 11]. Эти скосы имеют вид $[\mathbf{p}_i \times \boldsymbol{\mu}(\tilde{\mathbf{r}}_i)]$, где $\boldsymbol{\mu}(\tilde{\mathbf{r}}_i)$ — направление поля намагниченности на i -м атоме, а связанные симметрией кристалла векторы $\boldsymbol{\rho}_\ell(\{J_{ij}, \mathbf{D}_{ij}\})$ имеют тот же порядок малости по СОВ, что и векторы \mathbf{D}_{ij} . Заметим, что, хотя антиферромагнитные скосы прямо предсказываются микроскопическим описанием спиновых структур кубических гелимагнетиков, к настоящему моменту имеется лишь небольшое количество косвенных экспериментальных подтверждений их существования [12], что связано со сложностью наблюдения слабого антиферромагнетизма на фоне сильного ферромагнетизма рассматриваемых кристаллов.

В первом приближении скосы и закрутка выступают как независимые проявления антисимметричного обмена Дзялошинского–Мории, однако при учете вкладов следующего порядка по СОВ именно скосы приводят к дополнительной закрутке или, в зависимости от знака вкладов, раскрутке магнитной структуры. Так, вызываемая скосами поправка к константе \mathcal{D} имеет следующий вид:

$$\mathcal{D}^{(2)} = \frac{1}{12} \sum_{i,j} J_{ij} \tilde{\mathbf{r}}_{ij} \cdot [\mathbf{p}_i \times \mathbf{p}_j] + \frac{1}{12} \sum_{i,j} \mathbf{D}_{ij} \cdot [\tilde{\mathbf{r}}_{ij} \times (\mathbf{p}_i + \mathbf{p}_j)]. \quad (2)$$

С учетом (2) можно провести перерасчет волнового числа магнитных спиралей в Cu_2OSeO_3 в зависимости от наборов параметров J_{ij} , \mathbf{D}_{ij} : $k = 0,035$ [8] и $k = 0,117$ [9]. Отсюда следует, что антиферромагнитные скосы могут драматически влиять на степень закрутки магнитной структуры хиральных кубических гелимагнетиков, и их вклад необходимо учитывать при расчете волнового числа спиралей из первых принципов.

Список литературы

- [1] Grigoriev S.V., Maleyev S.V., Okorokov A.I. et al. *Phys. Rev. B*, **74**, 214414 (2006).
- [2] Mühlbauer S., Binz B., Jonietz F. et al. *Science*, **323**, 915 (2009).
- [3] Seki S., Yu X.Z., Ishiwata S., and Tokura Y. *Science*, **336**, 198 (2012).
- [4] Adams T., Chacon A., Wagner M. et al. *Phys. Rev. Lett.*, **108**, 237204 (2012).
- [5] Chizhikov V.A. and Dmitrienko V.E. *J. Magn. Magn. Mater.*, **382**, 142 (2015).
- [6] Чижиков В.А. *ЖЭТФ*, **159**, 656 (2021).
- [7] Keffer F. *Phys. Rev.*, **126**, 896 (1962).
- [8] Janson O., Rousochatzakis I., Tsirlin A.A. et al. *Nature Comm.*, **5**, 5376 (2014).
- [9] Yang J.H., Li Z.L., Lu X.Z. et al. *Phys. Rev. Lett.*, **109**, 107203 (2012).
- [10] Dmitrienko V.E. and Chizhikov V.A. *Phys. Rev. Lett.*, **108**, 187203 (2012).
- [11] Chizhikov V.A. and Dmitrienko V.E. *Phys. Rev. B*, **85**, 014421 (2012).
- [12] Dalmas de Reotier P., Maisuradze A., Yaouanc A. et al. *Phys. Rev. B*, **93**, 144419 (2016).

Энергия образования пары Френкеля в кубической фазе магнетита в рамках DFT+U

М.И. Шутикова, В.В. Стегайлов

Объединенный институт высоких температур РАН, г. Москва, Россия
Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет), г. Москва, Россия

Магнетит — магнитный оксид железа (Fe_3O_4) с сильными электронными корреляциями; они создают множество трудностей при проведении расчетов его свойств из первых принципов. Кубическая структура становится неустойчивой ниже температуры Вервея. В настоящее время нет единого мнения об электронной структуре кубической фазы (есть ли в ней запрещенная зона, какой тип симметрии волновых функций и зарядовой плотности должен быть использован, каким образом точно учесть сильные электронные корреляции). Применение широко используемого метода DFT+U для *ab initio* моделирования кубической фазы магнетита

требует хорошо обоснованного выбора значения поправки Хаббарда U , удачного начального приближения к волновым функциям и электронной плотности, а также анализа множества локальных минимумов [1].

В докладе представлены результаты расчетов энергии образования вакансии и межузельного атома в кубической фазе магнетита. Проанализирован эффект размера системы на результат расчетов. Оказалось, что ширина запрещенной зоны кубической фазы и энергия образования пары Френкеля зависят от значения поправки Хаббарда U разнонаправленно. Показано, что сравнение измеренной тщательным образом энергии образования пары Френкеля (эта энергия образования была получена в серии экспериментальных работ Р. Дикмана и соавторов в 1977–1986 гг. [2]) с данными, полученными в DFT+ U , может дать ключ к решению всех перечисленных выше трудностей по построению модели кубической фазы в рамках DFT+ U .

Работа выполнена при поддержке РФФИ по гранту № 20-32-90081 и при поддержке РФФИ и Госкорпорации «Росатом» в рамках научного проекта № 20-21-00159.

Список литературы

- [1] Шутикова М.И., Стегайлов В.В., Энергии образования вакансий кубической фазы магнетита в рамках DFT+ U . *Журнал экспериментальной и теоретической физики*, **160**, № 2 (8), с. 249–274 (2021).
- [2] Dieckmann R., Schmalzried H. Defects and cation diffusion in magnetite (VI): point defect relaxation and correlation in cation tracer diffusion. *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie*, **90**, 7, p. 564–575 (1986).

СПИНОВЫЕ ЭФФЕКТЫ И СТРУКТУРЫ. СПИНОВЫЙ ТРАНСПОРТ И ДИНАМИКА

Влияние размера нанокристаллитов на пространственную спин-модулированную структуру

Н.Е. Гервиц¹, А.В. Ткачёв¹, С.В. Журенко¹, А.В. Гунбин¹,
Н.А. Ломанова², Д.П. Данилович³, А.В. Богач⁴, А.А. Гиппиус^{1,5}

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

²Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, г. Санкт-Петербург, Россия

³Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет), г. Санкт-Петербург, Россия

⁴Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, г. Москва, Россия

⁵Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
г. Москва, Россия

Существование несоразмерной магнитной пространственной спин-модулированной структуры (ПСМС) типа циклоиды с периодом $\lambda = 620 \pm 20 \text{ \AA}$ [1] в ортоферрите висмута BiFeO_3 и соединениях на его основе приводит к ухудшению магнитных свойств и, соответственно, перспектив для использования его в качестве мультиферроика. Важным направлением исследований вот уже несколько десятков лет является поиск способов контролируемого разрушения, подавления и модификации ПСМС. Для этого используются замещение атомов в А-подрешетке атомами, отличающимися по характеристикам (магнетизм, ионный радиус, гетеровалентное замещение), магнитные поля, и в том числе переход к наноразмерам. Существование ПСМС возможно только при наличии фазы с ромбоэдрической структурой ($R3c$), однако только наличия ромбоэдри-

ческой структуры недостаточно для подтверждения и характеристики магнитных свойств образца. В литературе существует противоречивая информация о существовании ПСМС при уменьшении размеров нанокристаллита, так как влияние на магнитный момент наночастиц может оказываться за счет не только подавления ПСМС, но и наличия некомпенсированных спинов на поверхности, ограничения размеров, благодаря чему присутствуют некомпенсированные участки циклоиды, и других причин [2].

Исследуемые образцы были синтезированы методом растворного горения. Полученные образцы были охарактеризованы с помощью рентгенографии, были оценены размеры нанокристаллитов: от 170 до менее чем 40 нм. Ранее нами был разработан протокол измерения ЯМР-спектров в нулевом поле на ядрах ^{57}Fe , позволяющий исследовать ПСМС даже в образцах с естественным содержанием железа [3].

ЯМР-спектроскопия обнаружила наличие ПСМС в образцах всех размеров, в том числе в тех случаях, когда линейные размеры нанокристаллита оказывались менее периода циклоиды. Параметр ангармонизма m , характеризующий степень гармоничности ПСМС, монотонно снижается при уменьшении размера нанокристаллитов, а в области размера ~ 50 нм происходит смена типа анизотропии с «легкой оси» на «легкую плоскость».

Список литературы

- [1] Sosnowska I., Neumaier T., Steichele E. Spiral magnetic ordering in bismuth ferrite. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, **15**. 4835 (2000). 10.1088/0022-3719/15/23/020.
- [2] Mazumder R., Devi P., Bhattacharya D., Choudhury P., Sen A., Raja M. Ferromagnetism in Nanoscale BiFeO_3 . *Applied Physics Letters*, **91** (2007) 10.1063/1.2768201.
- [3] Gervits N.E., Tkachev A.V., Zhurenko S.V., Gunbin A.V., Pokatilov V.S., Gippius A.A. Zero-field ^{57}Fe NMR in BiFeO_3 based compounds: Problems, solutions and application to $\text{Bi}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_3$. *Sol. St. Commun.*, **344** (2022), 114682, ISSN 0038-1098, 10.1016/j.ssc.2022.114682.

Soliton excitations in a high-field phase of a strong-rung spin ladder

V.N. Glazkov^{1,*}, Yu.V. Krasnikova¹, S.C. Furuya²,
K.Yu. Povarov³, D. Blosser³, and A. Zheludev³

¹*P.L. Kapitza Institute for Physical Problems, RAS,
Moscow, Russia*

²*Condensed Matter Theory Laboratory, RIKEN, Wako, Saitama, Japan*

³*Laboratory for Solid State Physics, ETH Zürich, Zürich, Switzerland*

*E-mail: glazkov@kapitza.ras.ru

Spin-ladder, a pair of the coupled spin chains, is one of the toy models of the modern magnetism. The excitations of the spin ladder are gapped, the applied magnetic field $B_{c1} = \Delta/(g\mu_B)$ closes the gap, and up to the saturation field B_{c2} spin-ladder remains in a gapless Tomonaga–Luttinger spin liquid (TLL) state with the TLL interaction parameter determined by spin ladder exchange constants [1].

Metal-organic compound $(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N})_2\text{CuBr}_4$ (called BPCB for short) is a well-established strong-rung spin ladder with the couplings $J_{\text{rung}} = 12,7$ K and $J_{\text{leg}} = 3,5$ K [2, 3].

We have performed low-temperature electron spin resonance (ESR) study of this magnet at the temperatures down to 400 mK. We report observation of the low-energy excitation with anomalous energy-vs-field dependency in the fields around 10 T, i.e. in the midst of the TLL phase (see Fig. 1).

Mapping of the Heisenberg strong-rung spin ladder on an equivalent “pseudospin” XXZ-chain [3] predicts equivalence of the magnetized spin ladder at $B^* = (B_{c1} + B_{c2})/2$ to the XXZ chain at zero field, i.e. zero excitation energy at B^* . Instead, we observed anisotropic gap at B^* with the asymptotic slope of $f(H)$ dependence corresponding to $g_{\text{eff}} \approx 3$:

$$2\pi\hbar\nu = \sqrt{\Delta^2 + [g_{\text{eff}}\mu_B(B - B^*)]^2}.$$

This behavior is explained quantitatively by accounting for the Dzyaloshinskii–Moriya (DM). In the case of BPCB DM coupling is uniform

along the legs of the ladder and Dzyaloshinskii vectors on the ladder's legs are exactly opposite. The ladder-to-chain mapping then yields XXZ-chain with uniform DM interaction. Excitations of the spin chain with uniform DM interaction are known to be gapped at $q = 0$ [4] in agreement with our observations.

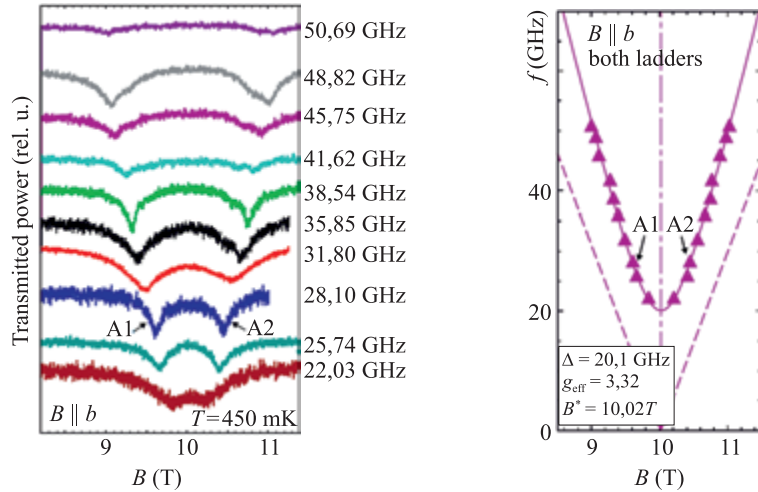


Fig. 1. Left: examples of low-temperature ESR absorption curves in BPCB at various microwave frequencies. Right: ESR frequency-field diagram. Symbols — experimental data, dashed lines — excitations of isotropic model, solid curves — fit as described in the text. A1 and A2 marks indicate positions of the same absorption components on both panels

However, the observed excitations turn out to be much more interesting. In the presence of DM interaction equivalent strongly anisotropic chain demonstrate transverse ordering of the “pseudospin” at B^* which allows for solitonic excitations of this anisotropic model. Our analysis proves that due to “real spins” to “pseudospin” transformation along the ladder-to-chain mapping only the solitonic “pseudospin” excitations remains ESR-active. Their frequency-field dependence is [5]

$$2\pi\hbar\nu = \sqrt{M^2 + [2Kg\mu_B(B - B^*)]^2},$$

here the soliton “mass” M is proportional to the squared component of Dzyaloshinskii vector transverse to the applied field and the asymptotic slope depends on Luttinger parameter K , which is equal to $3/4$ for the BPCP exchange couplings constants. The predicted effective g -factor value $g_{eff} = 2Kg$ is in perfect agreement with the observed value (see Fig. 1) without any additional fitting parameter [6].

Authors acknowledge support from Russian Science Foundation via Grant No. 17-12-01505. Work at ETHZ was supported by Swiss National Science Foundation, Division II.

References

- [1] Jeong M. et al. *Phys. Rev. Lett.*, **117**, 106402 (2016).
- [2] Klanjšek M. et al. *Phys. Status Solidi C*, **247**, 656 (2010).
- [3] Bouillot P. et al. *Phys. Rev. B*, **83**, 054407 (2011).
- [4] Povarov K.Y. et al. *Phys. Rev. Lett.*, **107**, 037204 (2011).
- [5] Furuya S.C. and Momoi T. *Phys. Rev. B*, **97**, 104411 (2018).
- [6] Krasnikova Yu.V. et al. *Phys. Rev. Lett.*, **125**, 027204 (2020).

Зеемановское спин-орбитальное взаимодействие и эффективный g -фактор электронов, наблюдаемый из квантовых осцилляций в антиферромагнитных металлах

П.Д. Григорьев^{1,2,*}, Р. Рамазашвили³, М.В. Карцовник⁴

¹Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН,
г. Черноголовка, Россия

²НИТУ «МИСИС», г. Москва, Россия

³Laboratoire de Physique Theorique, Universite de Toulouse, CNRS, UPS, France

⁴Walther-Meißner-Institut, Garching, Germany

*E-mail: grigorev@itp.ac.ru

С использованием симметричных аргументов теоретически показано [1], что во многих металлах с антиферромагнитным упорядочением

эффективный g -фактор носителей заряда, например измеренный по магнитным квантовым осцилляциям, равен нулю. Этот эффект [1] обнуления эффективного g -фактора электронов происходит из-за его сильной зависимости от импульса и даже смены знака на границе магнитной зоны Брлюэна, образованной антиферромагнитным упорядочением. Эту смену знака и зависимость от импульса g -фактора электронов из-за взаимодействия с соизмеримым антиферромагнитным порядком можно получить прямой диагонализацией электронного гамильтониана в магнитном поле \mathbf{B} в антиферромагнетике, который распадается на сумму матриц 4×4 :

$$\hat{H} = \sum_k \hat{H}_k, \quad \hat{H}_k = \begin{pmatrix} \varepsilon_k - \mu_B (\mathbf{B} \cdot \hat{\sigma}) & (\Delta_Q \cdot \hat{\sigma}) \\ (\Delta_Q \cdot \hat{\sigma}) & \varepsilon_{k+Q} - \mu_B (\mathbf{B} \cdot \hat{\sigma}) \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где ε_k — исходный закон дисперсии электронов, μ_B — магнетон Бора, $\hat{\sigma}$ — вектор матриц Паули. Когда магнитное поле $\mathbf{B} \perp \Delta_Q$, эта матрица 4×4 распадается на две матрицы 2×2 , диагонализация которых дает необычную антисимметричную зависимость g -фактора $g(\mathbf{k})$ от импульса электронов, отсчитанного от границы магнитной зоны Бриллюэна.

В результате, если замкнутая циклотронная орбита электронов в магнитном поле состоит из двух симметричных половинок траектории (см. рис. 1), для которых g -фактор противоположен, то итоговый g -фактор в таком квантовом состоянии электронов будет равен нулю. Понимание этого эффекта важно для правильной интерпретации экспериментальных данных по магнитным квантовым осцилляциям.

Экспериментальное исследование этого эффекта проводится [1] нами 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 не-

елевского порядка в этом сверхпроводнике даже при оптимальном легировании.

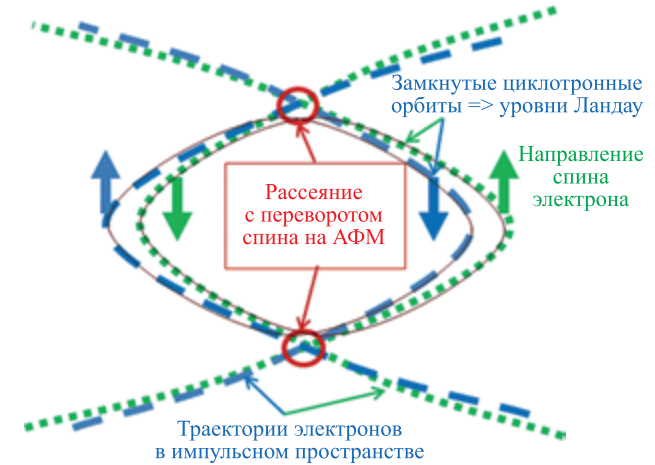


Рис. 1. Иллюстрация движения электронов в импульсном пространстве в магнитном поле с рассеянием на спин-зависящем потенциале антиферромагнетика. Левые (или правые) части орбиты получаются смещением на АФМ-вектор исходной поверхности Ферми

Наблюдаемый эффект впервые экспериментально демонстрирует еще так называемое зеемановское спин-орбитальное взаимодействие — связь спина электронов с их орбитальным движением из-за зависимости $g(\mathbf{k})$. Вблизи границы магнитной зоны Бриллюэна оно оказывается намного сильнее обычного спин-орбитального взаимодействия, что может иметь потенциальные приложения в спинтронике.

Работа поддержана РФФИ № 21-52-12027 и 21-52-12043.

Список литературы

- [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. *npj Quantum Materials*, **6**, 11 (2021).

Спиновый транспорт на границе гетероструктуры иридат/манганит

Г.А. Овсянников^{1,*}, К.И. Константиныч¹, Е.А. Калачев², А.А. Климов^{1,2},
А.В. Шадрин^{1,3}, В.А. Шмаков¹

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

²Российский технологический университет — МИРЭА,
г. Москва, Россия

³Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет), г. Долгопрудный, Россия
*E-mail: gena@hitech.cplire.ru

При возбуждении ферромагнитного резонанса (ФМР) в пленке ферромагнетика возникает спиновый ток поперек границы гетероструктуры «ферромагнетик/нормальный (немагнитный) металл». В эксперименте этот спиновый ток обычно регистрируют по электрическому напряжению, возникающему за счет обратного спинового эффекта Холла. Плотность спинового тока через границу раздела гетероструктур определяется реальной ($\text{Re } g^{\uparrow\downarrow}$) и мнимой ($\text{Im } g^{\uparrow\downarrow}$) компонентами спиновой проводимости (spin mixing conductance) границы гетероструктуры [1–4]. Обычно $\text{Im } g^{\uparrow\downarrow}$ пренебрегают в диффузионных или баллистических контактах. Учет мнимой части спиновой проводимости был проведен для двухслойной структуры Ru/Pt, гетероструктур Pt/YIG и Pt/финемет ($\text{Fe}_{66,5}\text{CuNb}_3\text{Si}_{13,5}\text{B}_6\text{Al}_{17}$) в работах [5–7]. Было экспериментально показано, что мнимая часть спиновой проводимости границы, определяемая межслойным спин-орбитальным взаимодействием, по порядку величины равна реальной части [7].

Эпитаксиальные пленки иридата стронция SrIrO_3 и манганита $\text{La}_{0,7}\text{Sr}_{0,3}\text{MnO}_3$ нанометровой толщины осаждались на монокристаллические подложки галата неодима $(110)\text{NdGaO}_3$. Рост эпитаксиальных пленок осуществлялся методом магнетронного напыления при температурах

подложки 770–800 °С в смеси газов Ar и O_2 с общим давлением 0,3–0,5 mBar [4].

Форма спектра $S_{12}(H)$ (вставка к рис. 1) аппроксимировалась с помощью линии Лоренца для учета мнимой компоненты магнитной восприимчивости ферромагнетика и дисперсионной зависимостью для ее действительной части. Из подгонки экспериментальных кривых суммой этих двух компонентов, а также линейно зависящей от магнитного поля $S_{12}(H)$ удается определить резонансное поле H_0 и ширину линии Лоренца ΔH .

На рис. 1 представлены полученные из спектров зависимости ΔH от частоты СВЧ-воздействия для пленки $\text{La}_{0,7}\text{Sr}_{0,3}\text{MnO}_3$ и гетероструктуры. Параметр спинового затухания Гильберта α и уширение линии, вызванной неоднородностями ΔH_0 , удается определить, используя выражение $\Delta H(F) = 4\pi\alpha F/\gamma + \Delta H_0$ для аппроксимации зависимости. При этом пренебрегаем другими источниками спинового затухания.

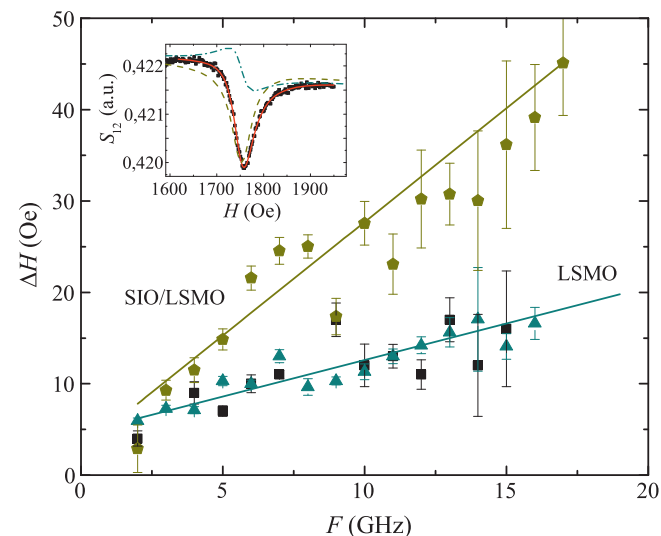


Рис. 1. Зависимость от частоты F ширины линии ФМР ΔH для пленки $\text{La}_{0,7}\text{Sr}_{0,3}\text{MnO}_3$ (квадраты и треугольники) и гетероструктуры $\text{SrIrO}_3/\text{La}_{0,7}\text{Sr}_{0,3}\text{MnO}_3$ (пятиугольники). На вставке показан спектр $S_{12}(H)$ гетероструктуры при СВЧ-воздействии на частоте $F = 9$ GHz

Как видно из рис. 1, для пленки $\text{La}_{0,7}\text{Sr}_{0,3}\text{MnO}_3$ $\alpha_{\text{LSMO}} = 2,0 \pm 0,2 \cdot 10^{-4}$, при напылении SrIrO_3 увеличивается до значений $\alpha_{\text{SIO/SMO}} = 6,7 \pm 0,8 \cdot 10^{-4}$. Величина реальной части спиновой проводимости определяется из следующего выражения [1–3]:

$$\text{Re } g^{\uparrow\downarrow} = \frac{4\pi M_0 d_F}{g_0 \mu_B} (\alpha_{\text{SIO/LSMO}} - \alpha_{\text{LSMO}}),$$

где $d_F = 30 \text{ nm}$ — толщина $\text{La}_{0,7}\text{Sr}_{0,3}\text{MnO}_3$ пленки, M_0 — намагниченность насыщения, величина разности $\alpha_{\text{SIO/LSMO}} - \alpha_{\text{LSMO}}$ для $\text{SrIrO}_3/\text{La}_{0,7}\text{Sr}_{0,3}\text{MnO}_3$ гетероструктуры дает $\text{Re } g^{\uparrow\downarrow} = (3,5 \pm 0,5) \cdot 10^{19} \text{ m}^{-2}$. Отметим, что $\text{Re } g^{\uparrow\downarrow} = 1,3 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-2}$ было получено в [8] для такой же гетероструктуры $\text{SrIrO}_3/\text{La}_{0,7}\text{Sr}_{0,3}\text{MnO}_3$. Согласно [9] при изменении толщины SrIrO_3 пленки от 10 до 40 nm $\text{Re } g^{\uparrow\downarrow}$ гетероструктуры меняется от 1,3 до $3,6 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-2}$ соответственно, что совпадает с нашим значением.

Как показано в теоретически в [7] $\text{Re } g^{\uparrow\downarrow}$ в основном определяется параметрами нормального металла: удельным сопротивлением ρ_{SIO} и длиной спиновой диффузии λ_{SIO} : $\text{Re } g^{\uparrow\downarrow} \approx h/(e^2 \rho_{\text{SIO}} \lambda_{\text{SIO}}) = 6 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-2}$. В то же время $\text{Im } g^{\uparrow\downarrow}$ зависит от электронных свойств границы раздела между ферромагнетиком и нормальным металлом, в частности спин-орбитальным взаимодействием [7].

Величина спинового угла Холла $\theta_{\text{SH}} \approx 0,2$, определенная из измерений спинового магнитосопротивления гетероструктур $\text{SrIrO}_3/\text{La}_{0,7}\text{Sr}_{0,3}\text{MnO}_3$ и пленок $\text{La}_{0,7}\text{Sr}_{0,3}\text{MnO}_3$, на порядок превышает значение θ_{SH} для гетероструктуры Pt/ $\text{La}_{0,7}\text{Sr}_{0,3}\text{MnO}_3$.

Исследования проводились с использованием оборудования Уникальной научной установки #352529 «Криоинтеграл» (соглашение МОН РФ № 075-15-2021-667).

Список литературы

- [1] Saitoh E. et al. *Appl. Phys. Lett.*, **88**, 182509 (2006).
[2] Mosendz O. et al. *Phys. Rev. B*, **82**, 214403 (2010).

- [3] Tserkovnyak Ya., Brataas A., Bauer G.E.W. *Phys. Rev. Lett.*, **88**, 117601 (2002).
[4] Ovsyannikov G.A. et al. *Phys. Rev. B*, **102**: 14440 (2020).
[5] Nan T. et al. *Phys. Rev. B*, **91**, 214416 (2015).
[6] Sun Y. et al. *Phys. Rev. Lett.*, **111**, 106601 (2013).
[7] Dubowik J. et al. *Physical Review Applied*, **13**, 054011 (2020).
[8] Crossley S. et al. *Phys. Rev. B*, **100**, 115163 (2019).
[9] Huang X. et al. *Adv. Mater.*, 20082 (2021).

Особенности спиновых кроссоверов в магнитных материалах

Ю.С. Орлов^{1,2}, С.В. Николаев^{2,1}, В.А. Дудников¹,
В.А. Гавричков¹, С.Г. Овчинников^{1,2}

¹Институт физики им. Л.В. Киренского,
Федеральный исследовательский центр

«Красноярский научный центр Сибирского отделения РАН,
г. Красноярск, Россия

²Сибирский федеральный университет, г. Красноярск, Россия

Предлагается обзор экспериментальных и теоретических результатов по исследованию спиновых кроссоверов в магнитоупорядоченных материалах.

Простейшая модель спинового кроссовера вследствие пересечения многоэлектронных термов катиона при внешнем воздействии (давление и пр.) приводит к картине квантового фазового перехода при нулевой температуре, который плавно размывается при конечных температурах [1]. Наличие межатомного обменного взаимодействия приводит к кооперативному характеру спиновых кроссоверов, проявляющемуся в виде фазовых переходов первого рода при высоких давлениях [2]. Рассмотрено влияние спиновых кроссоверов на электронную структуру окислов переходных металлов и на бозе-конденсацию спиновых экситонов в окрестности спинового кроссовера. Показано, что эффективный параметр Хаб-

барда U_{eff} скачком меняется в точке кроссовера, причем эти изменения немонотонны: U_{eff} увеличивается для материалов с d^3 , d^6 ионными конфигурациями, U_{eff} уменьшается для материалов с d^5 катионами и не меняется для других конфигураций [3]. Обсуждается новый метод расчета межатомного суперобменного взаимодействия в оксидах переходных металлов, позволяющий рассматривать селективные вклады от возбужденных термов магнитных катионов. Предсказаны изменения знака обменного взаимодействия при спиновых кроссоверах для d^5 , d^6 ионов [4].

В семействе редкоземельных кобальтитов $R\text{CoO}_3$ основное состояние немагнитно, но с ростом температуры тепловые возбуждения высокоспиновых состояний приводят в комплексе наблюдаемых экспериментально аномалий магнитных, электрических, термодинамических, упругих и оптических свойств, достигающих максимальных значений при температурах, растущих с номером редкоземельного иона [5]. На поверхности решетки в пленке $R\text{CoO}_3$ с растягивающей подложкой возможны стабилизация высокоспинового терма и ферромагнитное упорядочение.

Обсуждаются также динамические кроссоверы под действием внешней накачки, в результате которых также может изменяться знак обменного взаимодействия с участием возбужденных ионов. Рассматривается динамика мультиплетности, намагниченности и локальных искажений решетки. Показано, что внезапное возмущение, переводящее основное высокоспиновое состояние в низкоспиновое, релаксирует за пикосекундные времена к исходному высокоспиновому, и эту релаксацию видно по динамике концентрации спиновых состояний, по намагниченности высокоспинового состояния и по длине катион-анионной связи. На фоне плавной релаксации наблюдаются высокочастотные осцилляции, обусловленные резонансами Франка–Кондона. При подходе намагниченности к равновесному состоянию обнаружены долгоживущие фемто-секундные осцилляции [6].

Обсуждаются геофизические следствия спиновых кроссоверов и металлизации в ферропериклазе при давлениях и температурах, соответствующих нижней мантии Земли. Концентрация ферропериклаза

в нижней мантии выше порога протекания, поэтому металлизация ферропериклаза приводит к металлическим свойствам мантии на глубине от 1400 до 1800 км (рис. 1). Резкое увеличение проводимости с ростом глубины согласуется с данными геофизических наблюдений. Благодаря различию ионных радиусов высокоспинового и низкоспинового состояний возникают также упругие аномалии, которые измерены по распространению сейсмических волн в области глубин 1660–2000 км, где имеется максимум производной концентрации низкоспиновых состояний по давлению.

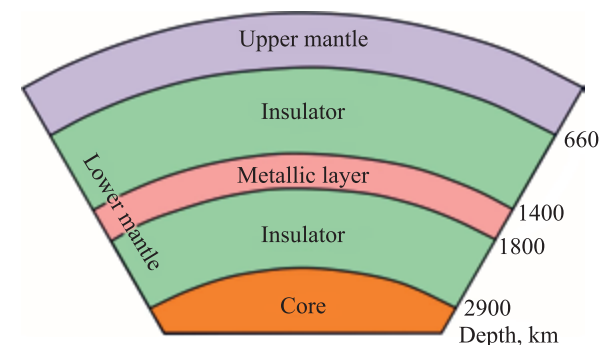


Рис. 1. Структура электрических свойств нижней мантии Земли с металлическим слоем на глубинах 1400–1800 км [7]

Мы благодарим Российский научный фонд за финансовую поддержку в рамках проекта 18-12-00022.

Список литературы

- [1] Nesterov A.I., Ovchinnikov S.G. *Pis'ma v ZhETF*, **90**, 580 (2009).
- [2] Nesterov A.I., Orlov Yu.S., Ovchinnikov S.G., Nikolaev S.V. *Phys. Rev. B*, **96**, 134103 (2017).
- [3] Овчинников С.Г., *ЖЭТФ*, **143**, 141 (2013).
- [4] Mikhaylovskiy R.V., Huisman T.J., Gavrichkov V.A., Polukeev S.I., Ovchinnikov S.G., Afanasiev D., Pisarev R.V., Rasing Th., and Kimel A.V. *Physical Review Letters*, **125**, 157201 (2020).

- [5] Orlov Yu.S., Solovyev L.A., Dudnikov V.A., Fedorov A.S., Kuzubov A.A., Kazak N.V., Voronov V.N., Molokeev M.S., Vereshchagin S.N., Shishkina N.N., Perov N.S., Babkin R.Yu., Lamonova K.V., Pashkevich Yu.G., Anshits A.G., Ovchinnikov S.G. *Phys. Rev. B*, **88**, 235105, (2013).
- [6] Орлов Ю.С., Николаев С.В., Нестеров А.И., Овчинников С.Г. *ЖЭТФ*, **159**, 479 (2021).
- [7] Овчинников С.Г., Овчинникова Т.М., Дядьков П.Г., Плоткин В.В., Литасов К.Д. *Письма в ЖЭТФ*, **96**, 135 (2012).

Взаимодействие спинов в цепочечном антиферромагнетике. Наблюдение с помощью магнитного резонанса

А.И. Смирнов^{1,*}, Т.А. Солдатов¹, К.Ю. Поваров², О.А. Старых³

¹Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, г. Москва, Россия

²ETH Zurich, Switzerland

³Utah University, Salt Lake City, USA

*E-mail: smirnov@kapitza.ras.ru

Цепочки спинов $S = 1/2$ с антиферромагнитным гейзенберговским обменом демонстрируют основное состояние с отсутствием упорядоченных спиновых компонентов и затуханием спиновой корреляционной функции по степенному закону. Это квантово-критическое основное состояние, а также возбужденные состояния в этой модели могут быть описаны в терминах квантующихся динамических структур с дробным спином, называемых спинонами. Концепция спинов формулируется в терминах нейтральных фермионов со спином $S = 1/2$ (см., например, [1, 2]). Концепция свободных фермионов-спинов подтверждается многочисленными экспериментами, например наблюдением континуума возбуждений с проекцией спина $S_z = \pm 1$ в экспериментах по рассеянию нейтронов [3] и обнаружением несоизмеримых мягких мод, возникающих в континууме продольных колебаний в магнитном поле [2]. Указанный континуум возбуждений стали называть двухспионным континуу-

мом, поскольку он объясняется возбуждением двух спионов в одном акте рассеяния нейтрона или поглощения фотона.

В данной работе мы сообщаем о спектроскопическом наблюдении эффекта взаимодействия спинов, аналогичного взаимодействию фермионов в ферми-жидкости. Это взаимодействие приводит к добавочному сдвигу границ континуума. Сдвиг обладает характерной зависимостью от магнитного поля. Эта зависимость определена теоретически в работе [4]. Эксперимент, выполненный методом магнитного резонанса, обнаруживает хорошее соответствие с теорией [4] и позволяет определить основной параметр ферми-жидкостного взаимодействия u , описывающий вероятность рассеяния «назад» для спинов [4, 6]. Идея эксперимента основана на том, что для кристалла с цепочечной спиновой структурой, антиферромагнитным обменом и однородным взаимодействием Дзялошинского–Мории метод магнитного резонанса позволяет определить положение границ спионного континуума на малом волновом векторе $q_{DM} = D/(Ja)$ [4]. Здесь D — параметр взаимодействия Дзялошинского–Мории, J — обменный интеграл, a — межспиновое расстояние. Проведение измерений для малого, но ненулевого волнового вектора является существенным, так как для нулевого волнового вектора эффект спектрального сдвига, вызванного взаимодействием, исчезает. Измерение зависимости сдвига частот специфического магнитного резонанса от магнитного поля позволяет непосредственно определить параметр взаимодействия u .

Мы провели измерения для образцов цепочечного $S = 1/2$ антиферромагнетика $K_2CuSO_4Br_2$, который хорошо соответствует модели одномерного магнетика (отношение внутрицепочечного обмена к межцепочечному примерно равно 600) и демонстрирует наличие однородного взаимодействия Дзялошинского–Мории с параметром $D = 0,27$ К [5]. При температуре $T = 0,5$ К ($T \ll J = 20$ К) сдвиг резонансных частот компонентов так называемого спионного дублета относительно частот, соответствующих невзаимодействующим спинонам, достигает нескольких гигагерц и приводит к значительной величине $u = 2,4J$. Наличие указанного взаимодействия также количественно объясняет различное поведение интенсивностей поглощения на верхней и нижней границах двух-

спинонного континуума, наблюдаемое экспериментально в сильном магнитном поле, в частности исчезновение верхнего компонента дублета в сильном поле.

Описанные экспериментальные следствия взаимодействия спинов указывают на ферми-жидкостное (то есть не ферми-газовое) поведение квазичастиц в одномерном квантовом антиферромагнетике. Возбуждения в одномерном $S = 1/2$ антиферромагетике демонстрируют удивительную аналогию с ансамблем электронов в неферромагнитном металле и специфическими спиновыми волнами В.П. Силина [7], которые наблюдаются благодаря ферми-жидкостному взаимодействию электронов в металлах.

Работа поддержана грантом РФФИ 17-02-01505.

Список литературы

- [1] Faddeev L. and Takhtajan L., *Physics Letters A*, **85**, 375 (1981).
- [2] Dender D.C. et al., *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 1750 (1997).
- [3] Tennant D.A., et al. *Phys. Rev. B*, **52**, 13368 (1995).
- [4] Keselman A., Balents L., and Starykh O.A., *Phys. Rev. Lett.*, **125** (2020).
- [5] Smirnov A.I. et al., *Phys. Rev. B*, **92**, 134417 (2015).
- [6] Povarov K.Yu. et al. arXiv:2108.02835.
- [7] Silin V.P., *Sov. Phys. JETP* **6**, 945 (1958); Silin V.P., *Sov. Phys. JETP*, **8**, 870 (1959).

Спиновая динамика фрустрированного квантового магнетика $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$

Т.А. Солдатов, А.И. Смирнов

Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, г. Москва, Россия

Фрустрированные квантовые магнетики в настоящее время вызывают большой интерес в связи с проявлением необычных низкотемпературных свойств, которые определяются сильными квантовыми колеба-

ниями спинов. Исследования показывают [1], что особый тип фрустрации в магнетиках с конкурирующими ферро- и антиферромагнитными обменными взаимодействиями может привести к формированию состояния спинового нематика вблизи поля насыщения. Такое состояние характеризуется отсутствием дальнего магнитного порядка и демонстрирует анизотропные спин-спиновые корреляции.

В последних работах [2–4] в кристаллах $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$ было обнаружено несколько индуцированных полем фазовых переходов вблизи поля насыщения. $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$ представляет собой низкотемпературный антиферромагнетик со слоистой магнитной структурой на искаженной квадратной решетке. Магнитные ионы V^{4+} этого вещества имеют спин $1/2$, располагаются на искаженной квадратной решетке и связаны конкурирующими ферро- и антиферромагнитными обменами. Температура Нееля равна 1,05 К, а спины в основном состоянии упорядочены коллинеарно. Нейтронные эксперименты, а также измерения намагниченности, теплоемкости и магнетокалорического эффекта показывают, что при низких температурах антиферромагнитное упорядочение спинов исчезает в поле $H_{c1} = 4$ Т, а в более сильных полях обнаруживаются квантовые фазовые переходы при $H^* = 5,5$ Т и $H_{c2} = H_{\text{sat}} = 6,5$ Т. Причем в поле H_{c1} магнетик оказывается намагниченным на 98 % от полного насыщения.

В нашей работе мы изучили спектры антиферромагнитного резонанса в $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$ в широком диапазоне полей и частот, включая область полей от H_{c1} до H_{sat} , в которой предположительно ожидается формирование спин-нематической фазы [2–4]. Частотно-полевые зависимости спектров магнитного резонанса, измеренных при $T = 0,5$ К в полях $\mathbf{H} \parallel a, b, c$, показаны на рис. 1, 2. Спектр содержит две резонансные моды с щелями $\Delta_1 = 12,8$ ГГц и $\Delta_2 = 17,3$ ГГц и полностью соответствует спектру коллинеарного антиферромагнетика с двухосной анизотропией, в котором ось a является легкой осью.

Примечательным в нашем исследовании является обнаружение спин-флип моды, которая демонстрирует смягчение в поле $H_{c1} = 4$ Т, а не в поле насыщения $H_{\text{sat}} = 6,5$ Т. Теория спиновых возбуждений в спино-

вых нематиках [5] показывает, что все макроскопические уравнения, описывающие в них спектры спиновых волн, совпадают с точностью до перенормировок с соответствующими уравнениями для упорядоченных антиферромагнетиков. Поэтому спектр магнитного резонанса в спин-нематической фазе должен быть аналогичным спектру антиферромагнитного резонанса и при переходе через поле $H_{c1} = 4$ Т в $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$ из упорядоченной в предполагаемую спин-нематическую фазу должен сопровождаться незначительной перестройкой. Мы же наблюдаем полное зануление частоты антиферромагнитного резонанса. Это может означать, что переход в спин-нематическую фазу сопровождается резким уменьшением поперечных компонентов спинов. Альтернативная гипотеза состоит в том, что магнитная эволюция системы в интервале полей между H_{c1} и H_{sat} вовсе не сопровождается формированием состояния спинового нематика, как это предполагается в работах [2–4], а связана с наличием в кристаллах $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$ малого количества дефектов типа спиновых вакансий, которые в сильных полях вносят свой вклад в намагниченность.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 17-12-01505. Благодарим К.Ю. Поварова и А. Желудева за предоставление образцов и обсуждения.

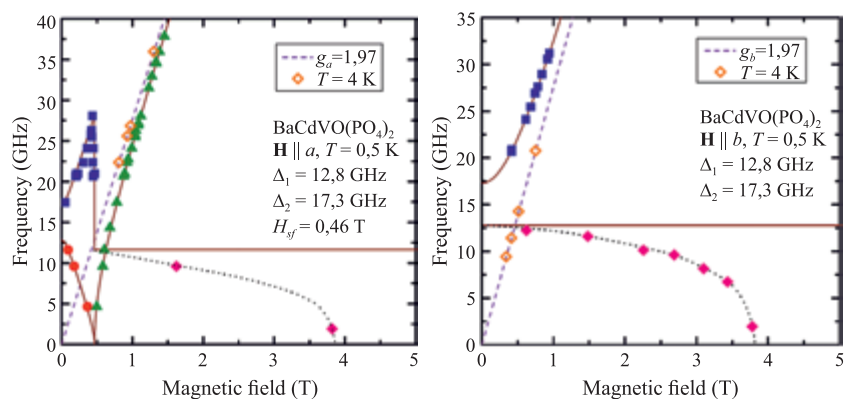


Рис. 1. Частотно-полевые зависимости спектров ЭСР в полях $\mathbf{H} \parallel a, b$

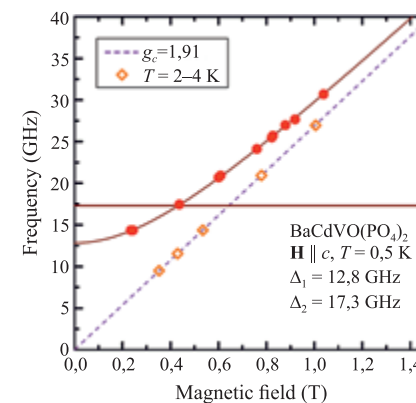


Рис. 2. Частотно-полевая зависимость спектра ЭСР в поле $\mathbf{H} \parallel c$

Список литературы

- [1] Zhitomirsky M.E., Tsunetsugu H. *Europhys. Lett.*, **92**, 37001 (2010).
- [2] Povarov K.Yu., Bhartiya V.K., Yan Z., Zheludev A. *Phys. Rev. B*, **99**, 024413 (2019).
- [3] Bhartiya V.K., Povarov K.Yu., Blosser D., Bettler S., Yan Z., Gvasaliya S., Raymond S., Ressouche E., Beauvois E., Xu E., Yokaichiya E., Zheludev A. *Phys. Rev. Research*, **1**, 033078 (2019).
- [4] Bhartiya V.K., Hayashida V.K., Povarov K.Yu., Yan Z., Qiu Z., Raymond S., Zheludev S. *Phys. Rev. B*, **103**, 144402 (2021).
- [5] Andreev A.F., Grishchuk A.F. *Sov. Phys. JETP*, **60**, 267 (1984).

Interplay between Jahn–Teller effect and spin-orbit coupling

S.V. Streltsov^{1,*}, D.I. Khomskii²

¹*Institute of Metal Physics, Ekaterinburg, Russia*

²*University of Cologne, Cologne, Germany*

*E-mail: streltsov@imp.uran.ru

The Jahn–Teller effect is one of the most fundamental phenomena important not only for physics, but also for chemistry and material science. Solv-

ing the Jahn–Teller problem and taking into account strong electron correlations we show that quantum entanglement of the spin and orbital degrees of freedom via spin-orbit coupling strongly affects this effect. Depending on the number of d -electrons it may quench (electronic configurations t_{2g}^2 , t_{2g}^4 , and t_{2g}^5), partially suppress (t_{2g}^1) or in contrast induce (t_{2g}^3) Jahn–Teller distortions. Moreover, in certain situations, interplay between the Jahn–Teller effect and spin-orbit coupling promotes formation of the “Mexican hat” energy surface facilitating various quantum phenomena [1, 2].

This work was supported by the Russian Science Foundation through project RSF 20-62-46047.

References

- [1] Streltsov S.V. and Khomskii D.I. *Phys. Rev. X*, **10**, 031043 (2020).
- [2] Khomskii D.I. and Streltsov S.V. *Chemical Reviews*, **121**, 2992 (2021).

Новые элементарные возбуждения в антиферромагнетике со спином 1/2 на треугольной решетке

А.В. Сыромятников

*ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»,
г. Санкт-Петербург, Россия*

В современной теории сильно коррелированных систем множество коллективных явлений описывается в терминах элементарных возбуждений (квазичастиц). Поэтому поиск и характеристика элементарных возбуждений имеют принципиальное значение. Интерпретация численных и экспериментальных данных в значительной степени основывается на выводах существующих аналитических подходов, оперирующих подходами квазичастицами.

Можно сказать, что на сегодняшний день свойства длинноволновых элементарных возбуждений (магнонов) в упорядоченных фазах квантовых спиновых систем хорошо поняты. Однако в последнее время появляется все больше экспериментальных и численных свидетельств того, что в (квази-)двумерных коллинеарных и неколлинеарных квантовых системах стандартные аналитические методы даже качественно не описывают коротковолновые спиновые возбуждения. Например, в серии недавних экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов, проведенных сразу тремя группами в $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$, была продемонстрирована полная неспособность стандартных теоретических подходов к описанию коротковолновых спиновых возбуждений в антиферромагнетике Гейзенберга (АФГ) со спином 1/2 на треугольной решетке [1, 2, 3]. В частности, в сечении рассеяния на границе зоны Бриллюэна можно выделить как минимум четыре пика, тогда как, например, спин-волновая теория предсказывает только два магнонных пика и высокоэнергетический континуум возбуждений.

Чтобы устранить этот и ряд других пробелов в теории, мы недавно предложили и апробировали на ряде систем новый метод, основанный на кластерном представлении спиновых операторов 1/2 через бозе-операторы [4, 5, 6, 7]. Этот подход очень близок по духу к стандартной спин-волновой теории, но он точнее учитывает коротковолновые спиновые корреляции и дает возможность наряду с магнонами довольно просто изучать и высокоэнергетические возбуждения, возникающие в стандартной спин-волновой теории, как связанные состояния нескольких магнонов.

В основе метода лежит идея расширения элементарной ячейки, с тем чтобы учесть все спиновые степени свободы в ней. Предлагаемое кластерное спиновое представление содержит не один бозе-оператор, как хорошо известное представление Голдстейна–Примакова для одного спина, а несколько бозе-операторов, каждый из которых рождает или уничтожает одно из квантовых состояний всей ячейки. Подчеркнем, что такое представление воспроизводит коммутационную алгебру всех спиновых операторов в ячейке. [4] Кроме того, оно содержит формальный

параметр n , максимальное количество бозонов, которое может находиться в одной ячейке. Этот параметр играет в кластерном представлении ту же роль, что и величина спина S в представлении Голдстейна–Примакова: все наблюдаемые величины можно представить в виде рядов по $1/n$, которые находятся при помощи стандартной диаграммной техники. Конечно, ценность такого подхода может показаться сомнительной, поскольку физические результаты соответствуют случаю $n = 1$ (впрочем, ценность спин-волновой теории, оперирующей рядами по $1/S$ при $S \sim 1$, из этих же соображений также должна быть невелика). Однако сравнение результатов, полученных нашим методом, с многочисленными результатами численных расчетов, проведенных ранее в простых моделях, показало, что ряды для наблюдаемых по $1/n$ удивительно быстро сходятся: зачастую уже первых членов ряда по $1/n$ достаточно для получения количественного согласия с численными результатами.

В докладе будут представлены результаты работы [7], в которой мы использовали трех-спиновый вариант предложенного в [4] кластерного спинового представления (для трех спинов в магнитной элементарной ячейке) для изучения АФГ на треугольной решетке. При этом возникает семь бозе-операторов, три из которых отвечают обычным магнонам. Наши вычисления успешно воспроизвели двадцатиградусную структуру, которую образуют магнитные моменты, а намагниченность трех магнитных подрешеток, найденная в первом порядке по $1/n$, находится в прекрасном согласии с предыдущими численными результатами. Наши вычисления динамических спиновых корреляторов показали, что квантовые флуктуации снимают вырождение спектра магнонов вдоль некоторых направлений в зоне Бриллюэна и приводят к появлению новой квазичастицы. Мы продемонстрировали также появление новых хорошо определенных высокоэнергетических квазичастиц, построенных из возбужденных состояний магнитной ячейки, которые дают яркую аномалию при высоких энергиях в нейтронных спектрах. Эти выводы находятся в хорошем согласии с результатами недавних нейтронных исследований (см. рис. 1).

Работа поддержана грантом РНФ № 22-22-00028.

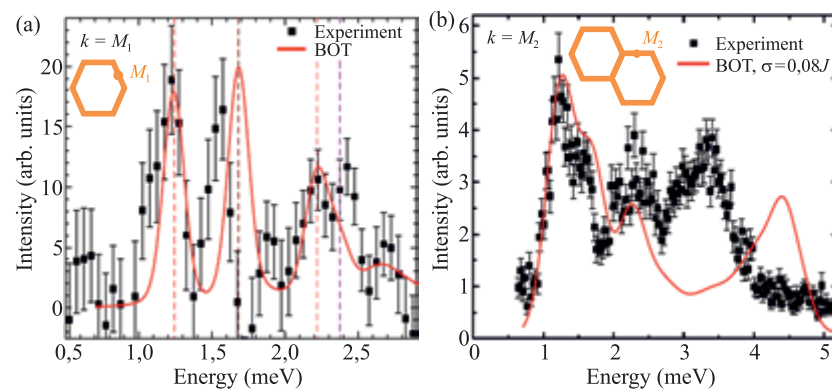


Рис. 1. Нейтронные данные, полученные в $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ в точках M на границе зоны Бриллюэна в работах [1] (слева) и с меньшим разрешением, но в большем диапазоне по энергии [2] (справа). Это соединение хорошо описывается моделью АФГ со спином $1/2$ на треугольной решетке. Спин-волновая теория не может объяснить эти экспериментальные результаты даже качественно. Напротив, предложенный нами подход хорошо описывает эти эксперименты (красная линия на графиках): можно считать, что согласие количественное при $\omega < 2,4$ meV и качественное при больших ω

Список литературы

- [1] Ma J. et al. *Phys. Rev. Lett.*, **116**, 087201 (2016).
- [2] Ito S., Kurita N., Tanaka H. et al. *Nature Communications*, **8**, 235 (2017).
- [3] Macdougall D., Williams D., Prabhakaran D. et al. *Phys. Rev. B*, **102**, 064421 (2020).
- [4] Syromyatnikov A.V. *Phys. Rev. B*, **98**, 184421 (2018).
- [5] Syromyatnikov A.V. and Aktersky A.Yu. *Phys. Rev. B*, **99**, 224402 (2019).
- [6] Syromyatnikov A.V. *Phys. Rev. B*, **102**, 014409 (2020).
- [7] Syromyatnikov A.V. arXiv:2107.00256, принято в *Phys. Rev. B*.

Автоколебания кристаллизации солей металлов из водных растворов в электрическом поле

С.А. Винокуров, Н.В. Классен, А.Д. Орлов, И.С. Цебрук

Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия

Данная работа относится к взаимодействию неорганических соединений с водой. Эта тема тесно связана с природными процессами образования многих минералов. Например, производные кварца, типа горного хрусталя и камней-самоцветов, возникли в результате кристаллизации из горячих водных растворов под действием высокого давления. Напротив, выращивание искусственных кристаллов из водных растворов является весьма распространенным методом получения материалов для оптики и электроники. Эта тематика касается и медицины, к примеру в области понимания образования камней в органах человека, вызванного процессами кристаллизации в организме. Также обширное применение бетона в строительстве относится к взаимодействию неорганических веществ с водой, так как превращение цементного раствора в твердый и прочный бетон — результат формирования кристаллогидратов при связывании воды с производными оксидов кальция, алюминия и железа. Характерная черта большинства водных растворов — высокая электрическая активность. Вода имеет высокую электрическую поляризуемость, поэтому она хорошо растворяет ионные кристаллы, например галогениды металлов, сульфаты, нитраты и др. В связи с этим естественно ожидать сильного влияния электрического поля на кристаллизацию ионных кристаллов из водных растворов, что и представлено в данной работе.

Следует отметить индуцирование постоянным электрическим полем порядка 100 В/см пространственно-временных автоколебаний кристаллизации. Прежде всего это относится к бромиду лантана, который за последние 20 лет стал одним из самых востребованных сцинтилляторов (материалов, применяемых для регистрации ионизирующих излучений) благодаря сочетанию высокой чувствительности и широкого энергетического разрешения. С другой стороны, бромид лантана — один из самых дорогих кристаллов, имеющих практическое применение. Это обусловлено высокой степенью хрупкости и гигроскопичности, которые многократно усложняют технологии его изготовления. Мы попытались превратить исключительно сильное взаимодействие бромида лантана с водой из серьезного недостатка в основу новой технологии формирования эффективных радиационных детекторов, используя воздействие электрического поля. Оказалось, что электрическое поле сильно влияет не только на водные растворы бромида лантана, но и на его твердое состояние. Во-первых, обнаружилось выделение воды из кристаллогидрата бромида лантана, в котором при равновесии на одну молекулу LaBr_3 приходится 7 молекул воды. Но наложение на слой такого кристаллогидрата толщиной в 2 мм сравнительно слабого поля приводит к образованию на его поверхности капель свободной воды. Этот процесс носит автоколебательный характер с периодом, зависящим от величины поля. В поле порядка 100 В/см появившаяся капля впитывается назад в кристаллический слой приблизительно через 20 секунд после появления, но практически сразу же в соседней области слоя возникает и начинает расти новая капля. Этот колебательный процесс повторяется многократно. По существу, зеркально симметричное явление наблюдается при наложении поля той же величины на насыщенный водный раствор бромида лантана. Сразу же после включения поля возникают иглообразные монокристаллы (рис. 1, левая сторона), растущие с высокой скоростью порядка 20–30 микрон в секунду. Но по достижении ими длины в 400–500 микрон рост прекращается и начинается растворение. Общая продолжительность цикла «рост–растворение» составляет 20–30 секунд.

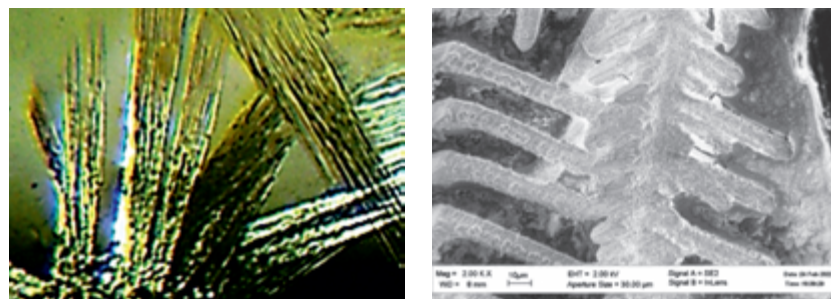


Рис. 1. Оптическая и электронная микроскопии игольчатых микрокристаллов бромиды лантана, образованных из водного раствора при наложении электрического поля

Далее этот процесс повторяется несколько раз до тех пор, когда за счет испарения воды из пересыщенного раствора не высаживается сплошная поликристаллическая пленка. Толщина иглообразных кристаллов и скорость их роста регулируются амплитудой поля. Важно подчеркнуть, что автоколебания во времени сопровождаются формированием пространственно-периодического распределения иглообразных кристаллов. Это показано на правой стороне рис. 1, где процесс растворения был остановлен и иглы стабилизировались нанесением на них раствора полистирола в бензоле. Обнаруженные автоколебания можно объяснить влиянием электрического поля на равновесный уровень концентрации насыщенного раствора бромиды лантана. В этом растворе значительная часть молекул воды связана в гидратных оболочках, окружающих молекулы бромиды лантана. Поэтому они не принимают участия в формировании электрической поляризуемости воды, которая в основном происходит за счет переориентации свободных молекул. Но для минимизации электростатической энергии требуется увеличение доли свободных молекул воды, и поэтому часть гидратных оболочек разрушается. Молекулы бромиды лантана, лишённые гидратных оболочек, оказываются энергетически невыгодными компонентами раствора, что и приводит к образованию кристаллов. Но в окрестности этих кристаллов внешнее электрическое поле оказывается ослабленным, что в конечном итоге вызыва-

ет их растворение. Похожие колебательные процессы происходят и при воздействии электрического поля на кристаллогидраты для освобождения связанной в них воды. Характеристики вызванных электрическим полем автоколебаний кристаллизации определяются сочетанием динамик распада гидратных оболочек, диффузии освобождённых ионов лантана и брома, их коллективного объединения в кристаллы, экранирования электрического поля и растворения кристаллов после ослабления поля с формированием новых гидратов.

Сильное влияние электрического поля обнаружено также при росте кристаллов сульфата и йодида цезия. Если без поля из водных растворов со скоростями кристаллизации порядка 20 микрон в час вырастают хорошо ограненные монокристаллы, то при наложении электрического поля формируются со значительно увеличенными скоростями (порядка 20 микрон в секунду) кристаллы в виде игл и периодических дендритов.

Корреляции оптических и структурных превращений при многофотонном возбуждении молекулярных сред

Н.В. Классен, П.В. Провоторов, И.С. Цебрук

Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия

Процессы многофотонных возбуждений конденсированных сред, приводящие к люминесценции при более высоких энергиях фотонов и ряду других явлений, изначально требуют сильных корреляций между электронными и фотонными подсистемами. В данной работе, где исследуются воздействия многофотонных возбуждений на весьма различающиеся по составу и агрегатному состоянию молекулярные системы (жидкий азот с молекулами N_2) и органические молекулы полистирола с молекулярными активаторами люминесценции 2,5-дифенил-оксазолом (РРО) и 1,4-бис(5-фенилоксазол-2-ил) бензолом (РОРОР), получены данные, указывающие на дополнительное участие в многофотонном возбу-

ждении люминесценции структурных превращений в атомно-молекулярных подсистемах указанных сред. Такая общность реакций на лазерное облучение проявляется в изучаемых средах, несмотря на существенные различия в их агрегатных состояниях и химических составах.

В экспериментах использовался импульсный инфракрасный лазер YbG:Nd , длина волны — 1,06 мкм, длительность импульса — 20 нс, средняя мощность — 0,3 Вт. Для возбуждения люминесценции лазерный луч фокусировался на объекте линзами с фокусными расстояниями от 35 до 150 нм. Жидкий азот размещался в прозрачном стеклянном дьюаре, а пленки полистирола толщиной 200–300 микрон при наблюдении люминесценции либо размещались на открытом воздухе, либо погружались в жидкий азот. Спектры люминесценции регистрировались спектрометром со спектральным разрешением 0,1 нм.

Наблюдаемая люминесценция жидкого азота проявила несколько признаков когерентной сверхлюминесценции. Зависимость ее интенсивности от интенсивности возбуждающего лазера была существенно сверхлинейной, с отчетливым порогом возбуждения, т. е. при ослаблении интенсивности ниже его люминесценция скачком спадала до нуля. Излучаемый свет имел узкое угловое распределение в виде конуса, причем чем короче была длина волны излучения, тем больше был угол у вершины конуса. Соседние конусы разделялись четкими границами (рис. 1, слева). Каждому конусу соответствовала полоса излучения весьма малой спектральной ширины (рис. 2). Длины волн конических излучений от внешнего до внутреннего составляли 534,7 нм (зеленое), дублет — 610,3 и 610,9 нм (оранжевое), 711,7 нм (красное) и 852 нм (инфракрасное). Следует подчеркнуть, что длины волн всех зарегистрированных линий короче, чем длина волны возбуждения, т. е. процесс возбуждения носит многофотонный характер. Судя по литературным данным, жидкий азот в спектральной области обнаруженной люминесценции имеет большое количество полос излучения. И тот факт, что в данном случае зарегистрировано только четыре узких линии, является еще одним свидетельством в пользу того, что возбужденные многофотонным образом молекулы излучают коллективно и взаимосогласованно (т. е. практически од-

новременно), а генерация этого излучения происходит в весьма ограниченном числе самых сильных линий. Кроме того, очень важный факт четкой угловой «привязки» направлений излучения к направлению возбуждающего луча говорит о том, что при излучении фотонов определенной длины волны разными молекулами происходит не только согласование фаз фотонов от разных молекул друг с другом, но и согласование их фаз с фазами возбуждающих фотонов. Это означает, что должен выполняться закон сохранения импульса, т. е. проекции волновых векторов излучаемых потоков на направление возбуждающего потока должны быть равны удвоенному волновому вектору возбуждающего инфракрасного света. Такое требование, присущее именно когерентной сверхлюминесценции, и задает четкое разграничение излучаемых длин волн по конусам.

Следует подчеркнуть, что возбуждаемая многофотонным образом люминесценция активированного полистирола в видимой области также демонстрирует нелинейную пороговую зависимость от интенсивности возбуждения. Более того, она возбуждается не сразу с началом облучения пленки лазером, а с задержкой в несколько десятков секунд. А при погружении пленки в жидкий азот это многофотонное возбуждение вообще не наблюдается. При обследовании же морфологии пленки после вспышки ее люминесценции на ней обнаруживается появление новых систем концентрических колец (рис. 1, справа). При облучении пленки в азоте такие кольца не появляются. Отсюда можно заключить, что образование колец связано с взаимно скоррелированными процессами перестройки внутренней структуры пластифицированной нагревом пленки и вызванными этими перестройками перераспределениями фотонных потоков, что вызывает усиление их локальных интенсивностей и многофотонное возбуждение молекул. В жидком азоте похожее усиление локальных интенсивностей может быть обусловлено образованием микропузырьков, служащих резонаторами для возбуждающих фотонов.

Различия в угловых распределениях люминесценций азота и пленки, где признаки когерентности не наблюдаются, можно объяснить тем, что толщина пленки слишком мала для формирования требуемого синхронизма возбуждающих и излучаемых фотонов.

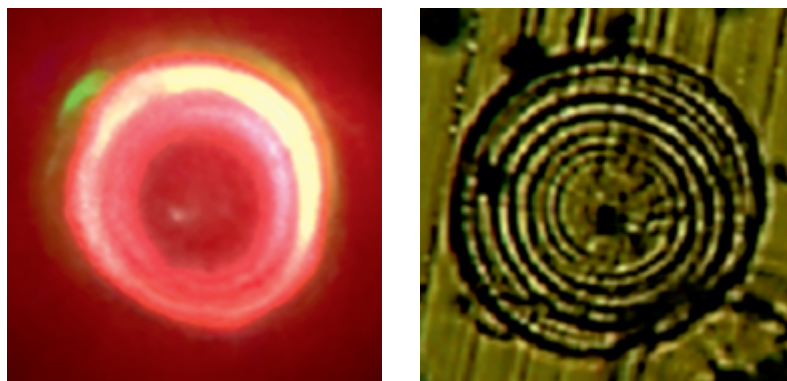


Рис. 1. Слева: пространственное распределение поперечных сечений конусов потоков люминесценции жидкого азота для разных длин волн: от края в центре — 534,7 нм (зеленая), дублет — 610,3 и 610,9 нм (оранжевая), 711,7 нм (красная) и 852 нм (инфракрасная). Справа: микрофотография следа лазерного пробоя пленки полистирола, при котором возникало сине-фиолетовое свечение пленки. Поперечный размер кадра — 300 микрон

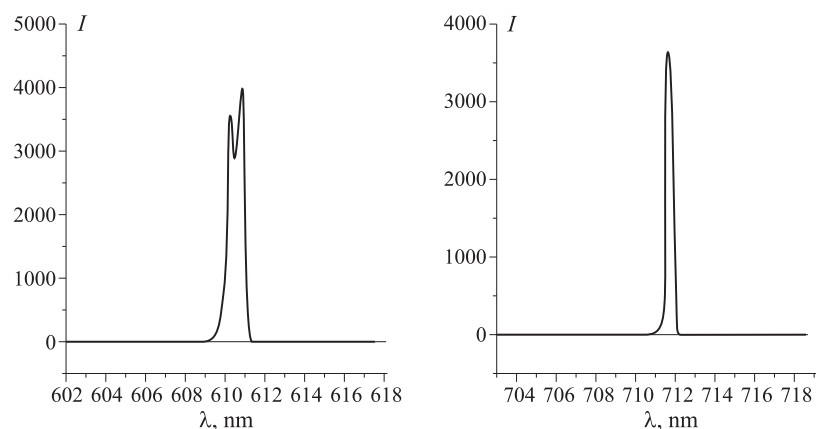


Рис. 2. Спектры люминесценции двух самых ярких линий жидкого азота: оранжевого дублета (слева) и красной линии (справа)

Плазмон-фононное взаимодействие в кристаллах GaSb, легированных теллуром

Н.Н. Новикова¹, В.А. Яковлев¹, А.Г. Белов², Е.В. Молодцова²,
Р.Ю. Козлов², С.А. Климин¹

¹Институт спектроскопии РАН, г. Троицк, г. Москва, Россия

²АО «Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности «Гиредмет», г. Москва, Россия

Методом оптической спектроскопии ИК-отражения исследованы монокристаллы антимонида галлия GaSb, легированные теллуром. GaSb является прямозонным полупроводником ($E_g = 0,726$ eV) [1] и представляет интерес для применений в оптоэлектронике. Монокристаллы GaSb:Te были выращены модернизированным методом Чохральского. Были исследованы образцы с различной концентрацией легирующей примеси. Кристаллическая структура антимонида галлия имеет тип сфалерита и принадлежит кубической пространственной группе $F\bar{4}3m$ (№ 216). ИК-спектр кристалла характеризуется наличием единственного фонона с частотой продольных колебаний вблизи 240 cm^{-1} [2]. Теллур в качестве легирующей примеси обеспечивает проводимость n -типа. Свободные электроны участвуют в плазменных колебаниях, характеризующихся плазменной частотой ν_p , квадрат которой пропорционален концентрации электронов. В результате взаимодействия ЛО-фонона и плазмона образуются связанные состояния с частотами ν_+ и ν_- , определение которых и являлось целью данной работы.

Измерения спектров ИК-отражения были проведены при помощи фурье-спектрометра BRUKER IFS66. Полученные спектры приведены на рис. 1 (в низкочастотной области) для двух из исследованных образцов, а именно для образцов с наименьшей и наибольшей концентрацией свободных электронов. Моделирование спектров позволило получить оптические параметры исследуемых образцов. По максимумам функции потерь были получены значения частот ν_+ и ν_- , из которых была оценена по оригинальной методике [3–5] концентрация свободных носителей заряда.

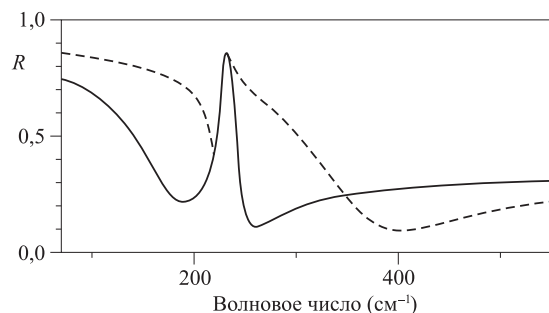


Рис. 1. Спектры отражения для двух образцов GaSb:Te, с наименьшей (сплошная линия) и наибольшей (штриховая линия) концентрацией свободных электронов

Список литературы

- [1] Dubey S.K. et al. *Nuc. Instr. Meth. Phys. Res. B*, **244** 141 (2006).
- [2] McCarthy D.E. *Applied Optics*, **7** 1997 (1968).
- [3] Белова И.М., Белов А.Г., Каневский А.Г., Лысенко А.П. *Известия ВУЗов. Электроника*, **22** 201 (2017).
- [4] Югова Т.Г., Белов А.Г., Каневский В.Е., Кладова Е.И., Князев С.Н. *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники*, **23** 27 (2020).
- [5] Yugova T.G., Belov T.G., Kanevskii V.E., Kladova E.I., Knyazev S.N., Parfent'eva I.B. *Modern Electronic Materials*, **7** 79 (2021).

Dissociative electron attachment

S.A. Pozdneevev

*P.N. Lebedev Physical Institute, Department Quantum Radiophysics,
Laboratory of Photochemical Processes, Moscow, Russia
E-mail: pozdneevev@sci.lebedev.ru*

The dissociative attachment processes is the simplest chemical reaction induced by electrons and therefore a subject of rather theoretical and experimental research works [1–5]. However, it is only recently that papers have ap-

peared investigating The dissociative attachment processes to molecules in preliminary prescribed excited rotational-vibrational states [1], threshold singularities [3] and resonances [2, 3] of these reactions have been examined.

The cross sections dissociative attachment reactions of electron to diatomic molecules H₂, HD, D₂, HCl, DCl, F₂, HF, DF, Cl₂, Br₂, HBr, DBr, I₂, DI, HI, N₂, Li₂, Na₂ have been calculated.

The main approximation in this approach consists in the fact that the interaction of an incident electron with electrons and nuclei a target molecule is replaced by interaction of an incident electron with each atoms as a whole and atom is considered to be the field center. So, the complicated many particle problem of calculation of the cross sections of electron scattering by diatomic molecules is reduced to a three-particle problem which is solved by method of quantum few-body theory of scattering proposed L.D. Faddeev and O.Y. Yakubovskii [4].

This method is applicable for the description of both the direct processes and the processes proceeding without the formation of intermediate long-lived states. Therefore, this approach is applied here to calculate the cross sections of an electron collision with diatomic molecules in the ground state and preliminarily prescribed arbitrary rotational-vibrational states. The results of calculations are presented and compared with the available experimental data and with the results of calculation using other approximation. Comparison of the performed calculations with experimental data shows that simulation of the interaction, in the framework of present above gives satisfactory agreement with experiment [1], coincidence of the orders of magnitude of cross sections, including the isotopic effects [5], and confirms the existence of the Efimov [3] effect in dissociative attachment processes.

References

- [1] Schultz G.J. *Rev. Mod. Phys.*, **45**, p. 423 (1973); Gallup G.A., Fabricant I.I. *Phys. Rev.*, **A57**, p. 2596 (1998).
- [2] Pozdneevev S. Application of quantum theory of scattering to the calculations of different processes in nuclear, atomic and molecular physics, Moscow, Janus-K, 412 p. (2001).

- [3] Efimov V. *Nucl. Phys.*, A362, 45 (1981); A378, 581 (1982); *Phys. Rev.*, C47, 1876 (1993); Vugalter S. A., Zislin G. M. *Dokl AN USSR*, **267**, p. 784 (1982).
- [4] Faddeev L.D., Merkuriev S.P. Quantum scattering theory for several particles systems, Kluwer, London (1993).
- [5] Demkov Yu.N., Ostrovskii V.N. Zero-range potentials and their application in atomic physics, Plenum (1998).

Bound and scattering states in three noble gas atoms in three body approximation

S.A. Pozdneev

*P.N. Lebedev Physical Institute, Department Quantum Radiophysics,
Laboratory of Photochemical Processes, Moscow, Russia
E-mail: pozdneev@sci.lebedev.ru*

Results of the calculations of the Efimov states [1] and scattering states in molecular systems three noble gas atoms based on the three body approximation [2] are present [3]. A mechanisms of appearances and disappearances of the Efimov states of the noble gas trimer in threebody approximation is present when the force of interatomic interaction is changed. It is shown that these states arise from virtual levels which are in turn formed from quasis resonances settled on the real axis. The resonances including virtual levels are calculates by the method based on the solution of the boundary value problem at complex energies based on the Faddeev differential equations. All calculations are performing with the well known interatomic potential [3] in which a strong repulsive component at short distances between helium atoms is approximated by a hard core. Geometric structures of the noble gas trimer are presented. A special attention is devoted to the substantiation of the method used for calculations resonances and to the investigations of its applicability range.

The calculations of the scattering and bound states of noble gas trimer were performed on the basis of the most advanced few-body calculation techniques both in boundary condition model (BCM) [1–4] approximation and without BCM approximation. In all considered pair wise potential support only two bound states approximately, but the properties of these states are very different:

- the ground states is strongly bound, whereas the binding energy of the excited state is comparable with binding energy of dimer;
- the sizes of these two states also very different.

The characteristic size of the ground state estimated by $\langle r \rangle$ or $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ is approximately 10 times less than the size of dimer molecule, but the size of the excited state has the same order magnitude of the dimer's one.

References

- [1] Efimov V. *Nucl. Phys.*, A362, 45 (1981); A378, 581 (1982); *Phys. Rev.*, C47, 1876 (1993); Vugalter S.A., Zislin G.M. *Dokl AN USSR*, **267**, p. 784 (1982).
- [2] Faddeev L.D., Merkuriev S.P. Quantum scattering theory for several particles systems. Kluwer, London, 1993.
- [3] Pozdneev S. Application of quantum theory of scattering to the calculations of different processes in nuclear, atomic and molecular physics. Moscow, Janus-K, 2001; *Dynamics of Elementary Atomic-Molecular Processes in Gas and Plasma, Nova Sci. Publ.*, **212** (1996); Pozdneev S. *JETP*, **99**, No. 5, p. 915–933 (2004); *J. Rus. Las. Res.*, **22**, p. 175 (2001); *Bull. Lebedev Phys. Inst.*, No. 5, p. 1 (2003).
- [4] Motovilov A.K., Kalganova E.A., Sofianos S.A. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **31**, 1279 (1998); *J. Chem. Phys.*, **275**, 168 (1997); *Phys. Rev.*, A56, No. 3, R1686 (1997). Rudnev V., Yakovlev S. *Chem. Phys. Lett.*, **22**, 97 (2000); *Physics of Atomic Nuclei*, **63**, No. 1, 61, 77; No. 2, 271, 278; No. 3, 402, 409; No. 5, 830 (2000).

**Application of the few-body quantum theory
of scattering for guided control of chemical reaction
and creation of the new molecular structures**

S.A. Pozdneev

*P.N. Lebedev Physical Institute, Department Quantum Radiophysics,
Laboratory of Photochemical Processes, Moscow, Russia
E-mail: pozdneev@sci.lebedev.ru*

Guided control of molecular processes and creation of the new molecular structure is a subject of active research in molecular and chemical physics. One of the most natural and general approaches in this area is a quantum few-body theory based on the Faddeev–Yakubovsky equations [1, 2]. It is based on the idea, that the possible mechanisms of occurrence of chemical reactions based on a specific multiparticle interaction under condition of low coupling energy between clusters of the system [3, 4].

In addition to the quantum approaches classical control theory based on the classical mechanics have also been developed [5]. However phase effects as essential [2–5], and classical treatment cannot be good enough.

Investigation of the methods and tools for creation of the new molecular structures with new properties and control of chemical reaction on the base quantum theory of few-body system are presented.

A general method for study three-body recombination reactions base on Faddeev–Yakubovsky equations is developed. Calculations of the three-body recombination rate of the reactions [2-5] $H + H + H \rightarrow H_2 + H$, $He + He + He \rightarrow He_2 + He$, $Cs^+ + Br^- R \rightarrow CsBr + R$ for low energies are compare with classical results and other approximations.

References

- [1] Faddeev L.D., Merkuriev S.P., Quantum scattering theory for several particles systems. Kluwer, London (1993).
- [2] Pozdneev S. Application of quantum theory of scattering to the calculations of different processes in nuclear, atomic and molecular physics. Moscow, Janus-K,

- 2001; Dynamics of Elementary Atomic-Molecular Processes in Gas and Plasma. *Nova Sci. Publ.*, **212** (1996).
- [3] Efimov V. *Nucl. Phys.*, A362, 45 (1981); A378, 581 (1982); *Phys. Rev. C*, **47**, 1876 (1993); Vugalter S.A., Zislin G.M. *Dokl AN USSR*, **267**, p. 784 (1982).
- [4] Pozdneev S. *JETP*, **99**, No. 5 (2004), p. 915–933; *J. Rus. Las. Res.*, **22** (2001), p. 175; *Bull. Lebedev Phys. Inst.*, No. 5, p. 1 (2003).
- [5] Ostrovsky V.N., *J. Phys. B:At. Mol. Opt. Phys.*, B28, p. 3901 (1995); Solov'ev E.A. *Sov. Phys.-Uspekhi*, **32**, p. 228 (1989); Vriens L. Case studies in Atomic Physics. North-Holland, v. 1, p. 335 (1969).

Resonances in electron scattering by molecules

S.A. Pozdneev

*P.N. Lebedev Physical Institute, Moscow, Russia
E-mail: pozdneev@sci.lebedev.ru*

The methods of the quantum theory few-body scattering based on the Faddeev–Yakubovsky equations [1] in momentum and configuration space are present [1, 2].

Scattering states properties of three-body resonantly interacting particles are considered and are shown to be independent of a form of two-body forces, being determined only presence of resonances. The resonances produce an effective long range interaction between three particles [3].

This methods are applied to the calculation of the dissociative electron attachment to hydrogen and hydrogen-halide diatomic initial rovibrational exiting molecules H_2 , N_2 , Li_2 , Na_2 , HCl , DCl , HBr , DBr , HJ , DJ .

The results of this calculations are compared with available experimental data [5] and other calculation [2–4].

References

- [1] Faddeev L.D. and Merkuriev S.P. Quantum scattering theory for several particles systems. Kluwer, London (1983).

- [2] Pozdnev 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).
- [3] Efimov V. *Nucl. Phys.*, A362, 45 (1981); A378, 581 (1982); *Phys. Rev. C*, **47**, 1876 (1993).
- [4] Pozdnev S.A. *JEPT*, **126**, No. 5(11), 1109 (2004).
- [5] Schultz G.J. *Rev. Mod. Phys.*, **45**, 423 (1973).

Научное издание

**XIX Конференция
«Сильно коррелированные электронные
системы и квантовые критические явления»**

ФИАН, г. Москва
26 мая 2022 г.

Сборник тезисов

Технический редактор А. В. Бакиев

Подписано в печать 11.05.2022. Формат 60×84¹/₁₆.
Усл. печ. л. 15,23. Уч.-изд. л. 16,11. Гарнитура «Таймс».
Бумага офсетная № 1. Печать цифровая. Заказ № 22-15.

АНО «Ижевский институт компьютерных исследований»
426053, г. Ижевск, ул. Ворошилова, д. 123.
<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».
