

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

ФИАН, г. Москва
25 мая 2023 г.

СБОРНИК ТЕЗИСОВ



Москва ♦ Ижевск

2023

УДК 530.1(065)

ББК 22.31я43

XX Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления» : сборник тезисов. — М.–Ижевск : Институт компьютерных исследований, 2023. — 198 с.

ISBN 978-5-4344-0993-3

Настоящий сборник содержит тезисы докладов, заявленных на XX конференцию «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления». В докладах представлены оригинальные научные результаты как экспериментальных, так и теоретических исследований, охватывающие 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:

1. Квантовые и классические фазовые переходы
2. Магнетизм. Магнитные структуры. Кондо-системы
3. Сверхпроводимость, сверхтекучесть
4. Сильно коррелированные системы
5. 2D- и 1D-системы
6. Топологически нетривиальные материалы и структуры
7. Электрический и оптический отклик неоднородных систем и метаматериалов
8. Экспериментальная техника, методы исследований и создания материалов
9. Разное

География научных учреждений, в которых работают авторы докладов, включает в себя большинство крупных научных организаций 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, 2023

ISBN 978-5-4344-0993-3

Программный комитет

- С.М. Стишов (ФИАН), председатель
- В.М. Пудалов (ФИАН), зам. председателя
- П.А. Алексеев (НИЦ «КИ»)
- С.И. Веденеев (ФИАН)
- М.М. Глазов (ФТИ РАН)
- В.Е. Дмитриенко (ИК РАН)
- 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)
- С.Г. Тиходеев (МГУ)

Оргкомитет

- А.Е. Петрова (ФИАН), председатель
- О.И. Акинфиева (ФИАН), зам. председателя
- О.М. Иваненко (ФИАН)
- Е.В. Кулебякина (ФИАН)
- Д.А. Саламатин (ИФВД)
- В.А. Степанов (ФИАН)
- Ю.Е. Чечукова (ФИАН)

Предисловие

Настоящий сборник содержит тезисы докладов, представленных на XX юбилейную конференцию «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления», которая проводится в Физическом институте имени П. Н. Лебедева в Москве. Предыдущая XIX конференция, проведенная в ФИАНе в 2022 г., привлекла рекордное количество участников. Представленные тезисы были изданы и вручены всем авторам и участникам. Настоящая конференция также оказалась достаточно популярной, несмотря на несколько измененный формат, и организаторы надеются на ее успех.



Председатель оргкомитета, академик Л. В. Келдыш делает доклад на первой конференции 11 апреля 2003 г.

Содержание

Предисловие	4
-------------------	---

Квантовые и классические фазовые переходы

М. Г. Васин

Критическая динамика перехода Березинского–Костерлица–Таулеса вблизи абсолютного нуля температуры	14
--	----

В. Э. Валулин, Н. М. Щелкачев, А. В. Михеенков, К. И. Кугель

Квантовая запутанность в спин-орбитальных моделях	15
---	----

П. А. Максимов, А. Л. Чернышев

Легкоплоскостные китаевские магнетики на решетке «пчелиные соты»: квантовые эффекты и сингулярности	17
--	----

А. С. Семакин, И. Р. Мухамедишин, С. Г. Зыбцев, В. Я. Покровский

Загадки низкотемпературной ВЗП в моноклинной фазе NbS_3	18
--	----

Yu. S. Ponomov

Pressure driven structural evolutions of AuAgTe_4 single crystal through Raman spectroscopy	21
---	----

S. M. Stishov, A. E. Petrova, A. M. Belemuk

Quantum criticality features in the Co doped MnSi	23
--	----

В. Р. Шагинян

Квантовый фазовый переход в CeCoIn_5 : Экспериментальные факты и теория	27
---	----

Магнетизм. Магнитные структуры. Кондо-системы

М. Anisimov, V. Voronov, S. Gavrilkin, A. Tsvetkov, K. Mitsen,

N. Shitsevalova, G. Levchenko, V. Filipov

Phonon, defect and magnetic contributions to heat capacity of $\text{Eu}_x\text{Yb}_{1-x}\text{B}_6$ solid solutions	29
---	----

<i>A. V. Gribanov, E. A. Ptashkina, S. F. Dunaev, S. V. Gribanova, M. Anisimov, A. V. Bogach, N. A. Samarin</i> Transport properties of novel ternary germanide with high palladium content $CePd_{12}Ge_2$	30
<i>A. M. Белемук, С. М. Стишов</i> Магнитные свойства киральных магнетиков с примесями.....	32
<i>B. H. Глазков, С. С. Сосин, А. Ф. Яфарова, Г. Ю. Андреев, Р. Г. Батулин, С. Л. Кораблева, О. А. Морозов, И. В. Романова</i> Фрустрация взаимодействий в дипольно-гейзенберговском магнетике $LiGdF_4$	33
<i>С. В. Григорьев, Н. М. Чубова, О. И. Утесов</i> Как величина и знак взаимодействия Дзялошинского–Мория влияет на магнитную структуру в гелимагнетиках $Fe_{1-x}Co_xSi$ и $Fe_{1-x}Co_xGe$	34
<i>B. E. Дмитриенко, В. А. Чижиков</i> <i>Ab initio</i> изучение возможных магнитных структур в сверхпроводящем рении при нарушении симметрии обращения времени	36
<i>К. Ш. Муртазаев, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. К. Рамазанов</i> Фазовая диаграмма антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с конкурирующими взаимодействиями и магнитным полем	37
<i>Л. В. Бегунович, М. М. Кориунов, С. Г. Овчинников</i> Магнитный коллапс в Fe_3Se_4 под давлением.....	40
<i>Н. С. Павлов, И. Р. Шеин, И. Р. Некрасов</i> Магнитные фазовые переходы при давлении в $BaMn_2P_2$ и $BaMn_2As_2$: GGA+U.....	41
<i>Н. А. Богословский, П. В. Петров, Н. С. Аверкиев</i> Прямой обмен между примесями и природа феррромагнетизма в $GaAs:Mn$	43
<i>Д. А. Саламатин, С. Е. Кичанов, И. Е. Костылева, Л. Ф. Куликова, А. В. Боков, И. П. Зибров, Д. П. Козленко, А. В. Цвяценко</i> Структурные изменения в мультиферроиках $W_{1-x}Tb_xFeO_3$ при высоком давлении.....	46
<i>Ю. А. Сахратов, А. Р. Reyes, Л. Е. Свистов</i> ЯМР исследования высокополевых магнитных фаз в треугольном $RbFe(MoO_4)_2$	47

<i>В. А. Сидоров, Е. В. Стерхов, С. Г. Титова</i> Влияние высокого давления на магнитные и электронные свойства двойного манганита $\text{NdBaMn}_2\text{O}_6$	49
<i>Т. А. Солдатов, А. И. Смирнов</i> Низкочастотная спиновая динамика квазидвумерного магнетика $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$	51
<i>С. В. Стрельцов</i> Китаевские ли кобальтиты?	54
<i>Е. Д. Чернов, А. В. Лукоянов</i> Влияние давления на электронную структуру и магнитные свойства MnS и MnTe	55
<i>В. А. Чижиков, В. Е. Дмитриенко</i> Расчёт волнового числа магнитных геликоид в Cu_2OSeO_3 из обменных констант связей: сравнение численного моделирования и аналитических вычислений	56
Сверхпроводимость. Сверхтекучесть	
<i>А. Ф. Аминов, А. А. Соколик, Ю. Е. Лозовик</i> Эффект сверхтекучего увлечения между экситон-поляритонами и сверхпроводящим электронным газом	60
<i>П. Д. Григорьев, В. Д. Кочев, А. А. Синченко, А. В. Фролов, А. П. Орлов</i> Исследование неоднородной сверхпроводимости с помощью транспортных измерений в FeSe и других соединениях	63
<i>А. Ю. Дегтяренко, С. Ю. Гаврилкин, И. В. Морозов, А. Ю. Цветков, А. И. Шилов, Е. О. Рахманов, С. А. Кузьмичев, Т. Е. Кузьмичева</i> Микроструктура и сверхпроводящие свойства монокристалла $\text{NaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$	66
<i>К. Мицен, О. Иваненко</i> Локальная трансформация электронной структуры и генерация свободных носителей в купратах и пниктидах при гетеро- и изовалентном допировании	68
<i>А. Д. Ильина, С. А. Кузьмичев, В. М. Михайлов, И. А. Никитченко, И. В. Морозов, А. И. Болталин, А. И. Шилов, Т. Е. Кузьмичева</i> Спектроскопия многократных андреевских отражений сверхпроводящего селенида $(\text{K,Na})\text{Fe}_2\text{Se}_2$	70

<i>А. В. Ключник, О. А. Соболевский, А. В. Садаков, А. С. Усольцев, Л. А. Моргун</i> Исследование особенностей первого критического поля в соединении BaPd ₂ As ₂ при сверхнизких температурах	71
<i>М. М. Кориунов, Ю. Н. Тогушова, С. Д. Казанина</i> Роль нематичности в формировании сверхпроводящего состояния в монослоях FeSe	74
<i>С. А. Кузьмичев, К. С. Перваков, В. А. Власенко, А. Ю. Дегтяренко, С. Ю. Гаврилкин, Т. Е. Кузьмичева</i> Сверхпроводящий параметр порядка в арсениде железа EuCsFe ₄ As ₄ (семейство 1144) методом создания планарных контактов на микротрешине	76
<i>Т. Е. Кузьмичева, С. А. Кузьмичев, И. В. Морозов, Е. О. Рахманов, А. И. Шилов</i> Спектроскопия эффекта многократных андреевских отражений в монокристаллах NaFe _{1-x} Co _x As	79
<i>А. А. Kopasov, A. S. Mel'nikov</i> Nonlocal interlayer pairing and induced superconductivity in layered hybrid structures	82
<i>И. В. Жувагин, Л. А. Моргун, А. Ю. Дегтяренко, С. Ю. Гаврилкин, А. В. Муратов, А. И. Шилов, С. А. Кузьмичев, Е. О. Рахманов, И. В. Морозов, Т. Е. Кузьмичева</i> Температурные зависимости H_{c2} и удельной теплоёмкости железосодержащего сверхпроводника NaFe _{1-x} Co _x As	86
<i>N. P. Netesova</i> Dense plasma electron superconducting model	88
<i>С. Л. Скорняков, В. И. Анисимов</i> Кулоновские корреляции в сверхпроводнике на основе железа YFe ₂ Ge ₂	92
<i>В. В. Дмитриев, М. С. Кутузов, А. А. Солдатов, А. Н. Юдин</i> Влияние магнитного рассеяния на сверхтекучий переход в ³ He в нематическом аэрогеле	93
<i>Я. В. Туркин, Н. Г. Пугач</i> Спиновая накачка в гибридных структурах сверхпроводник/ ферромагнитный диэлектрик	95

И. А. Фомин

Магнитные примеси и состояние Ларкина Имри Ма при триплетном куперовском спаривании.....97

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

Детектирование граничных условий для сверхтекучего ^3He в нематическом аэрогеле.....98

Сильно коррелированные системы

Л. Б. Дубовский, С. Н. Бурмистров

Модель Хаббарда во внешнем магнитном поле в приближении Гинзбурга–Ландау101

D. M. Korotin, D. Y. Novoselov, V. I. Anisimov

Low-dimentional spin lattices in Cu_2F_5 and $\text{Cu}_2\text{F}_{5-x}$102

А. В. Лукоянов, С. Т. Байдак, Ю. В. Князев, Ю. И. Кузьмин

Магнитные и спектральные свойства антимонидов редкоземельных элементов.....104

Р. Д. Мухачев, А. В. Лукоянов

Магнитные свойства и электронная структура интерметаллидов $\text{GdMn}_{1-x}\text{Ru}_x\text{Si}$ с учетом электронных корреляций.....105

Д. Ю. Новосёлов, Д. М. Коротин, М. А. Мазанникова, А. О. Шориков, В. И. Анисимов

Взаимодействующие межузельные электроны в электриде $[\text{Ca}_{12}\text{Al}_{14}\text{O}_{32}]^{2+}(\text{e}^-)_2$107

В. Г. Орлов, Г. С. Сергеев

Электронная зонная структура и антиферромагнетизм в La_2CuO_4109

В. С. Рюмишн, В. А. Улитко, Ю. Д. Панов

Исследование двумерной модели локальных бозонов квантовым методом Монте-Карло.....113

О. Г. Садыкова, К. К. Кешарпу, Е. А. Кочетов

Эффект тепловых флуктуаций спиновой структуры в фракционированных топологических изоляторах: метод функционального интеграла $su(2)$ 114

Л. С. Таран, С. В. Стрельцов

Орбитальный порядок в двойном перовските $\text{Pb}_2\text{CuMoO}_6$116

F. V. Temnikov, S. V. Streltsov, K. I. Kugel, D. I. Khomskii
Interplay of the Jahn–Teller effect and spin-orbit coupling:
The case of trigonal vibrations118

H. A. Фоминых, В. В. Стегайлов
Изменение орбитального упорядочения в $\text{Fe-Fe}_{2-x}\text{Cr}_x\text{O}_4$119

2D- и 1D-системы

*A. Н. Афанасиев, П. С. Алексеев, А. А. Даниленко,
А. А. Грешинов, М. А. Семина*
Спиновый резонанс в течении вязкой жидкости
из двумерных электронов121

М. М. Глазов, Д. В. Мамедов, М. А. Семина
Экситоны и трионы с отрицательной приведенной массой
в двумерных полупроводниках124

А. В. Горбунов, А. В. Ларионов, Л. В. Кулик, В. Б. Тимофеев
Новые особенности растекания магнитоэкситонного конденсата
в квантово-холловском диэлектрике126

И. Г. Горлова, С. А. Никонов, С. Г. Зыбцев, В. Я. Покровский
Логарифмическая релаксация фотопроводимости в вискерах
слоистого квазиодномерного полупроводника TiS_3 129

О. А. Дмитриева, Н. А. Гиппиус, С. Г. Тиходеев
Мультистабильность экситон-поляритонов в хиральном
полупроводниковом микрорезонаторе132

И. В. Загороднев, Д. А. Родионов, А. А. Заболотных
Плазменные резонансы в ограниченных двумерных электронных
системах133

*Е. В. Кулебякина, М. Л. Скориков, Е. В. Колобкова,
М. С. Кузнецова, Д. Р. Яковлев, В. В. Белых*
Многокомпонентная динамика фотолюминесценции экситонов
в нанокристаллах металлогалогенидных перовскитов
в матрице фторфосфатного стекла.....134

Т. И. Могилюк, П. Д. Григорьев
Тензоры внутрислоевых проводимости и сопротивления
в магнитном поле в квазидвумерных слоистых металлах.....137

<i>М. В. Никитин, В. Я. Покровский, Д. А. Кай, С. Г. Зыбцев, В. В. Колесов, В. В. Кашин</i> Ступеньки Шапиро при синхронизации волны зарядовой плотности акустическими волнами	138
<i>В. Н. Манцевич, Д. С. Смирнов</i> Усиление спиновой поляризации, созданной током, в квантовой точке за счёт эффекта Кондо.....	140
<i>И. Ю. Смирнов, И. Л. Дричко, А. В. Сулов, L. N. Pfeiffer, K. W. West, Ю. М. Гальперин</i> Коллективная локализация дырок в сильно-коррелированном p-GaAs/AlGaAs с высокой подвижностью	142
<i>Э. И. Хасанова, А. В. Кузьмин</i> Разупорядоченность в структуре кристаллов органического проводника κ -(BEDT-TTF) ₂ Cu[N(CN) ₂]Cl ₂ и его влияние на проводящие свойства	145
<i>С. В. Аксенов, А. Д. Федосеев, М. С. Шустин, А. О. Злотников</i> Угловые майорановские моды в двумерном сильно коррелированном топологическом сверхпроводнике высокого порядка	148
<i>З. А. Яковлев, М. М. Глазов</i> Тонкая структура ферми-поляронов в двумерных полупроводниках	151
Топологически нетривиальные материалы и структуры	
<i>З. З. Алисултанов, Э. Г. Идрисов, Н. А. Демиров</i> Эффекты межзонного перекрытия в дираковском гамильтониане: наклон, анизотропия и псевдоэрмитовость.....	154
<i>К. К. Кешиарпу, Е. А. Кочетов, О. Г. Садыкова</i> $SU(2)$ интегральный подход для фракционированного топологического изолятора	155
<i>А. С. Апрелева, В. Г. Кытин, В. А. Кульбачинский</i> Термоэлектрические свойства топологических изоляторов теллуридов висмута-мышьяка	156
<i>Р. А. Ниязов, Д. Н. Аристов, В. Ю. Качоровский</i> Геликоидальные кристаллы: зонная структура, мультикритическое поведение и топологические дефекты.....	159

A. E. Petrova, O. A. Sobolevskiy, S. M. Stishov
Magnetoresistance and Kohler rule in the topological chiral
semimetals CoSi161

*С. Н. Чмырь, А. С. Казаков, А. В. Галеева, Д. Е. Долженко,
А. И. Артамкин, А. В. Иконников, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов,
М. И. Банников, Л. И. Рябова, Д. Р. Хохлов*
РТ-симметричная микроволновая фотопроводимость в толстых
пленках на основе топологической фазы $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 164

Электрический и оптический отклик неоднородных систем и метаматериалов

Е. Е. Куприянов, В. Г. Кытин, В. А. Кульбачинский, И. Е. Корсаков
Эффект Зеебека и электропроводность поликристаллического
хромита меди (I) легированного магнием168

*Ф. А. Пудонин, И. А. Шерстнев, Д. С. Косцов, Д. Д. Носкова,
А. П. Болтаев*
Хиральные свойства многослойных систем $[Ag-Al_2O_3]N$ 171

*А. А. Топоркова, Т. А. Аксенова, С. А. Винокуров, Н. В. Классен,
И. С. Цебрук*
О коррелированных взаимодействиях свободных и связанных
зарядов в растительных биоматериалах175

И. С. Цебрук, Т. А. Аксенова, Н. В. Классен, В. В. Кедров, А. П. Покидов
Лазерная генерация взаимосвязанных электронных, фононных
и фотонных волн в линейных полимерах178

Экспериментальная техника, методы исследований и создания материалов

*А. В. Боков, Д. А. Саламатин, А. П. Новиков, С. Г. Ляпин,
А. В. Цвященко*
Камера высокого давления с алмазными наковальнями
и устройством нагрева образца для *in situ* рентгеновских
и оптических исследований фазовых переходов182

<i>Е. А. Екимов, А. А. Ширяев, В. А. Сидоров, М. В. Кондрин, Ю. В. Григорьев, Р. А. Хмельницкий, С. Г. Ляпин, Н. Н. Мельник</i> Электропроводность, оптические свойства и термическая стабильность легированных бором наноалмазов	183
<i>Ю. В. Кислинский, К. И. Константиан, И. Е. Москаль, А. М. Петржик, А. В. Шадрин, Г. А. Овсянников</i> Тонкие пленки иридатов стронция, получаемые распылением на постоянном токе и лазерной абляцией: сравнение технологий.....	186
<i>И. Е. Костылева, Д. А. Саламатин, Л. Ф. Куликова, А. В. Боков, И. П. Зибров, А. В. Цвященко</i> Синтез мультиферроика $Vi_{1-x}Tb_xFeO_3$ при высоком давлении	188

Разное

<i>С. А. Позднеев</i> Эффект Ефимова в квантовых системах	191
<i>S. Pozdneeв</i> Application of multiple scattering approximation.....	194
<i>Д. А. Саламатин, А. В. Боков, М. Г. Козин, И. Л. Ромашкина, А. В. Саламатин, М. В. Михин, А. Е. Петрова, В. А. Сидоров, А. В. Николаев, З. Фиск, А. В. Цвященко</i> Образование связанного состояния позитрон + электрон в монокристалле вейлевского полуметалла CoSi.....	195

КВАНТОВЫЕ И КЛАССИЧЕСКИЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

Критическая динамика перехода Березинского– Костерлица–Тулеса вблизи абсолютного нуля температуры

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 до недавнего времени была подробно описана лишь недиссипативная квантовая динамика, применение которой в случае сложной многочастичной системы ограничено временем когерентности. При этом оставался 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].

Подход, основанный на технике Келдыша–Швингера, позволяющий описать непрерывное изменение критических индексов вблизи квантовой критической точки, был предложен в работе [6], а за тем развит в [7]. Предложенная теория дала единую картину квантовых критических явлений, учитывающую как классическую, так и квантовую диссипацию, и позволила описать наблюдаемый вблизи квантовой критической точки квантово-классический кроссовер критических показателей.

В докладе обсуждается использование данного теоретического подхода к описанию переходов Березинского–Костерлица–Тулеса (БКТ) вблизи абсолютного нуля температуры [8]. Показано, что для системы с низкой концентрацией вихрей переход БКТ неизбежно происходит при

температуре выше температуры перехода от режима тепловых флуктуаций к квантовому режиму. В результате, при малых температурах критическая экспонента перехода БКТ, $\eta = 1/4$, остается неизменной. Однако, вследствие близости температуры перехода к точке квантово-классического кроссовера, универсальное соотношение плотности сверхтекучей жидкости немного отличается от известного соотношения Нельсона и Костерлица (4.16×10^{-9} [8] vs 3.52×10^{-9} г/см²К [9]).

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).
- [8] Vasin M. G., *Eur. Phys. J. Plus* **137**, 1049 (2022).
- [9] Nelson D. R., Kosterlitz J. M., *Phys. Rev. Lett.* **39**, 1201 (1977).

Квантовая запутанность в спин-орбитальных моделях

В. Э. Валиулин¹, Н. М. Щелкачев¹, А. В. Михеенков¹, К. И. Кугель^{2,*}

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

²*Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН,
г. Москва, Россия*

**E-mail: klimkugel@gmail.com*

Рассматривается проблема квантовой запутанности на примере модели, включающей два типа спиновых переменных (спин-орбитальная модель), и обсуждаются основные количественные характеристики запутанного состояния. Отметим, что варианты рассматриваемой модели

возникают не только в спин-орбитальной физике, характерной для соединений переходных металлов, но и в такой актуальной области, как ультрахолодные атомы в ловушках.

В работе методом точной диагонализации изучается запутанность двух подсистем для конечной одномерной цепочки с гамильтонианом

$$H = \mathcal{J} \sum S_i S_j + \mathcal{I} \sum T_i T_j + K \sum (S_i S_j)(T_i T_j), \quad (1)$$

где S_i и T_i — операторы спина и псевдоспина ($S = 1/2$, $T = 1/2$), все суммы берутся по связям ближайших узлов.

Кроме гамильтонианов вида (1), запутанность вычислялась также для альтернативных видов спин-псевдоспинового взаимодействия, например, $(S_i S_j)(T_i^z T_j^z)$. Рассмотрены также родственные модели, в которых слагаемое межподсистемного взаимодействия имеет изинговский вид для одной или обеих подсистем. Такого рода выражения возникают в разных физических реализациях спин-псевдоспиновой модели.

Для характеристики степени запутанности при нулевой температуре используется один из наиболее популярных критериев — concurrence (перевода термина пока нет, а буквальный перевод — «совпадение», «согласованность» — не вполне адекватен). Поскольку вычисляется точная матрица плотности, может, разумеется, быть определён и любой другой критерий.

Показано, в частности, что при нулевой температуре внешнее поле может как уменьшать запутанность (что интуитивно очевидно), так и усиливать её. Существенно, что, в зависимости от физической реализации модели, природа внешнего поля не обязательно должна быть магнитной. Кроме того, предложен (эмпирический) локальный критерий определения области запутанности, не требующий нахождения полной матрицы плотности.

При ненулевой температуре concurrence не является адекватной количественной характеристикой запутанности, в этом случае используются другие меры. В работе выбрана logarithmic negativity (у этого термина тоже отсутствует принятый русский перевод). При температуре $T \rightarrow 0$ эти две меры сшиваются. Отметим, что, поскольку все меры запутанности исходят из точной матрицы плотности (отвечающей основному состоянию или температурной), пересчитать одну меру в другую не составляет труда.

Среди эффектов, возникающих при конечной температуре, обратим внимание на два.

Во-первых, при некоторых значениях параметров модели запутанность оказывается немонотонной функцией температуры. С ростом T она сначала растёт (в том числе может расти от исходно нулевой величины), проходит через максимум и лишь затем убывает.

И, во-вторых, на некоторых участках пространства параметров запутанность оказывается чрезвычайно устойчивой к изменению температуры, образуя «острова стабильности».

Часть результатов работы изложена в статьях [1, 2].

Список литературы

- [1] Valiulin V. E., Mikheyenkov A. V., Chtchelkatchev A. V., Kugel K. I., *Phys. Rev. B* **102**, 155125, (2020).
- [2] Valiulin V. E., Mikheyenkov A. V., Chtchelkatchev N. M., Kugel K. I., ArXiv: 2203.08254 (2022).

Легкоплоскостные китаевские магнетики на решетке «пчелиные соты»: квантовые эффекты и сингулярности

П. А. Максимов¹, А. Л. Чернышев²

¹*Лаборатория теоретической физики им. Боголюбова,
Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия*
²*Department of Physics and Astronomy, University of California, Irvine,
California 92697, USA*

В данной работе мы аналитически и численно приводим расчеты фазовой диаграммы и спектральных свойств расширенной модели Китаева–Гейзенберга [1,2] на решетке «пчелиные соты» в легкоплоскостном пределе, где взаимодействия существенны только между компонентами спина, лежащими в плоскости решетки. Такой выбор подпространства обменных параметров позволяет систематически исследовать магнитные возбуждения в упорядоченных фазах. Так, мы рассчитываем магнотонно-магнетонные взаимодействия в фазе «зигзаг» в нулевом поле, а также в по-

ляризованной фазе. В номинально «классической» поляризованной фазе мы предлагаем схему регуляризацию нефизических расходимостей вблизи поля насыщения, которые нарушают применимость $1/S$ разложения в данном классе моделей. Примечательно, что для исследуемого подпространства обменных параметров все члены расширенной модели Китаева–Гейзенберга, такие как K , J и Γ , велики, что делает наши выводы достаточно общими для модели в целом. Это подтверждается расчетом динамического структурного фактора в парамагнитной фазе вблизи поля насыщения, который имеет особенности, похожие на те, что наблюдаются в экспериментах с α - RuCl_3 [3]. Таким образом, наши результаты являются достаточно общими и применимыми для широкого разброса параметров модели, и как следствие для различных материалов.

Список литературы

- [1] Kitaev A., *Ann. Phys.* 321, 2 (2006), january Special Issue.
- [2] Jackeli G. and Khaliullin G., *Phys. Rev. Lett.* 102, 017205 (2009).
- [3] Wulferding D., Choi Y., Do S.-H., Lee C. H., Lemmens P., Faugeras C., Gallais Y., and Choi K.-Y., *Nat. Commun.* 11, 1603 (2020).

Загадки низкотемпературной ВЗП в моноклинной фазе NbS_3

А. С. Семакин¹, И. Р. Мухамедшин², С. Г. Зыбцев³, В. Я. Покровский³

¹Физическая лаборатория Вуххури, Университет Турку, г. Турку, Финляндия

²Université Paris-Saclay, CNRS, Laboratoire de Physique des Solides,
Orsay, France

³ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН, г. Москва, Россия
E-mail: vadim.pokrovskiy@mail.ru

Моноклинная фаза NbS_3 (NbS_3 -II) примечательна существованием в ней двух ВЗП при комнатной температуре — ВЗП-0 и ВЗП-1. Установлены температуры их формирования, $T_{P0} \approx 470$ К и $T_{P1} \approx 360$ К, а также — волновые векторы: $\mathbf{q}_0 = (0, 0.352, 0)$ и $\mathbf{q}_1 = (0, 0.298, 0)$.

Формирование «низкотемпературной» ВЗП-2 видно по ступеньке удельной проводимости, $\delta\sigma_{s2}$, при температуре $T_{P2} \approx 150$ К. Ниже T_{P2} на-

блюдается нелинейная проводимость, связанная со скольжением ВЗП-2. В этом смысле переход при T_{P2} аналогичен переходам, наблюдаемым при T_{P1} и T_{P0} , однако искажения решётки ниже T_{P2} до сих пор наблюдать не удалось. Соответственно, величина q_2 неизвестна.

Отличие ВЗП-2 состоит ещё в том, что она наблюдается только в низкоомных образцах [1]. Число цепочек в элементарной ячейке, дающих вклад в ток ВЗП-2, то есть, величина $s_0 j_{CDW}/(2ef)$, варьируется в диапазоне $1/3-10^{-3}$ [1]: во всех случаях на элементарную ячейку приходится существенно менее одной цепочки. (В приведённом соотношении s_0 — площадь элементарной ячейки в плоскости, перпендикулярной цепочкам, j_{CDW} — плотность тока ВЗП-2, f — фундаментальная частота скольжения ВЗП-2.) Сравнение образцов с разной удельной проводимостью привело нас к выводу, что плотность заряда ВЗП-2, $q_2 j_{CDW}/(2\pi f)$, оказывается пропорциональной скачку $\delta\sigma_s$ [1]. Также установлено, что в низкоомных образцах наблюдается дефицит серы [1].

В результате сложилась следующая картина: ВЗП-2 формируется на дефектах кристалла, на которых собираются вакансии серы [2]. Чем больше вакансий, тем выше концентрация дефектов и, соответственно, плотность заряда ВЗП-2. Наблюдение дефектов упаковки (ДУ) в СТМ и СПЭМ [2,3] подвело нас к выводу, что ВЗП-2 формируется на ДУ и представляет собой слои атомной толщины параллельные ab . И мы были уже готовы объявить о первом наблюдении 2D ВЗП, встроенной в кристалл, но тут нас остановили два облачка на ясном небосклоне данной модели:

1) **Вид нелинейных ВАХ высокоомных образцов.** Зависимость $\sigma_s(T)$ таких образцов следует активационному закону от 330 К до, как минимум, 75 К. Тем не менее, ниже 150 К на ВАХ наблюдается размытие порога: срыв ВЗП-1 становится менее резким. Это видно из рис. 1, на котором приведены зависимости дифференциальной проводимости σ_d от напряжения V для одного из образцов. Количественное описание размытия показало, что эффект начинается именно при 150 К (вставка к рис.1).

2) **Данные ЯМР ^{93}Nb .** Переход при T_{P1} хорошо виден по температурной зависимости найтовского сдвига [1]_{a.i.[1]}. При T_{P2} изменения величины найтовского сдвига не обнаружено, однако на температурной зависимости скорости релаксации поперечной ядерной намагниченности, $1/T_2$, несколько ниже T_{P2} наблюдается максимум [1]_{a.i.[1]} (рис. 2). Аналогичный максимум наблюдался в NbSe_3 чуть ниже точки образования

низкотемпературной ВЗП, 59 К [4]. Подобная зависимость $T_2(T)$ свидетельствует о вымерзании флуктуационных колебаний в кристалле и является доказательством возникновения нового упорядочения. Неожиданным является наблюдение максимума на двух линиях ЯМР ^{93}Nb , частоты которых соответствуют двум *основным* положениям Nb в элементарной ячейке (рис. 2). Это значит, что переход затрагивает, как минимум, две из 4-х пар цепочек Nb во *всех* элементарных ячейках NbS_3 , а не только вблизи дефектов кристалла. Добавим, что максимум $1/T_2(T)$ наблюдается на образцах из партий, в которых преобладают как низкоомные, так и высокоомные образцы.

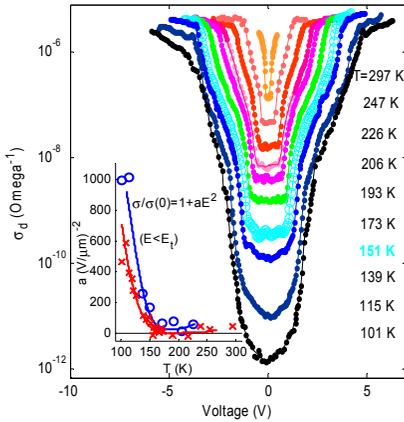


Рис. 1. Зависимости дифференциальной проводимости σ_d от напряжения V высокоомного образца при разных T . Кривая при $T = 151$ К выделена кружками. Размеры образца $18 \mu\text{m} \times 0.01 \mu\text{m}^2$. Вставка: температурная зависимость параметра a , отражающего степень размытия ВАХ ниже E_i для того же образца (○) и другого высокоомного с размерами $30 \mu\text{m} \times 0.0073 \mu\text{m}^2$ (×)

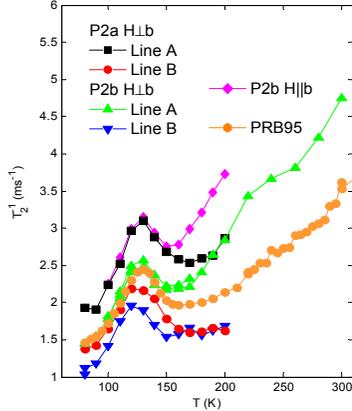


Рис. 2. Температурные зависимости скорости релаксации поперечной ядерной намагниченности ^{93}Nb для двух наборов образцов, P2a и P2b, в диапазоне температур 80–200 К при различной ориентации магнитного поля H относительно кристаллографической оси b . Также приведены ранее измеренные нами данные в неориентированном образце [1]

В поисках непротиворечивого объяснения экспериментальных данных мы пришли к предположению, что во *всех* образцах NbS_3 -II при

150 К происходит фазовый переход с образованием сверхструктуры, механизм которого не является пайерлсовским. Это может быть, например, переход Яна-Теллера. В высокоомных образцах он оказывает слабое влияние на транспортные свойства. Так, размытие порогового поля ВЗП-1 ниже 150 К может быть связано с понижением симметрии решётки. В низкоомных же образцах волновой вектор искажения решётки \mathbf{q}_2 оказывается близким к удвоенному фермиевскому волновому числу для электронов, остающихся свободными ниже T_{P1} . Эти электроны могут быть связаны с вакансиями серы и находиться в минизонах («карманах»), связанных с дефектами решётки. Таким образом, ниже T_{P2} эти электроны оказываются в диэлектрическом состоянии и формируют ВЗП-2.

При этом остаётся ряд вопросов. Так, неясно, почему особенность скорости ядерной релаксации наблюдается в поперечной намагниченности, но не видна в продольной, как в NbSe₃ [4]. Непонятно также, почему в области T_{P2} не видно особенности найтовского сдвига. Эти вопросы будут рассмотрены в докладе.

Работа выполнена при поддержке РФФ, проект № 22-12-00319.

Список литературы

- [1] Zybtshev S. G. et al., *Phys. Rev. B* **95**, 035110 (2017).
- [2] Zupanić E. et al., *Phys. Rev. B* **98**, 174113 (2018)
- [3] Зыбцев С. Г. и др., *Письма в ЖЭТФ* **114**, 36 (2021)
- [4] Suits B. H. and Slichter C. P., *Phys. Rev. B* **29**, 41 (1984).

Pressure driven structural evolutions of AuAgTe₄ single crystal through Raman spectroscopy

Yu. S. Ponosov

*Институт физики металлов имени М. Н. Михеева УрО РАН,
г. Екатеринбург, Россия*

Mineral sylvanite AuAgTe₄, in which Ag replaces half of Au in the original incommensurate calaverite AuTe₂, is also characterized by the formation of Te-Te dimers, but, unlike AuTe₂, it has a regular commensurate ordering of

Au and Ag in the P2/c monoclinic structure. The formation of such dimers can give a sufficiently strong bond between MTe₂ planes (M = Ag, Au), so that AuAgTe₄ (and also AuTe₂) should not be considered as a van der Waals system. A recent theoretical study [1] predicted that at a pressure of P~5 GPa, a structural transition to the P2/m structure is possible. It was assumed that it is accompanied by the disappearance of Te-Te dimers and results in superconductivity, which has been really confirmed in experiments [2].

In our Raman study [3] a structural phase transition in AuAgTe₄ was recorded in the pressure range of 4–6 GPa, in accordance with theoretical predictions. At higher pressures, evidences of local structural disorder were found that made it possible to observe experimentally the spectrum of the density of vibrational states of AuAgTe₄. It has been suggested that this fully reversible order-disorder transition could be initiated by non-hydrostatic effects when using KCl as the pressure-transmitting medium (PTM).

To test this assumption, we performed experiments under hydrostatic loading conditions using a 4:1 mixture of methanol-ethanol as the PTM. The spectra obtained in the pressure range of 4–6 GPa coincided with those measured earlier under nonhydrostatic conditions, but at higher pressures, a sharp transition to a new phase was observed with the appearance of 4 narrow lines, apparently of A_g symmetry, which are allowed for the P/2m HP structure. In an earlier experiment with KCl, a sharp transition to a disordered state was recorded at the same pressure range with the appearance of a spectrum of the density of phonon states. Thus, in the range of 6–7 GPa, depending on the hydrostaticity of PTM, two scenarios can be realized: either the transition to the P/2m structure, or the appearance of disorder, presumably due to distortions of the Te sublattice of the HP phase under nonhydrostatic loading.

The new experiment also raised the question of the existence of an intermediate phase, since the new lines that appeared in the region of 4–6 GPa disappeared upon transition to the HP P/2m phase at higher pressures. In addition, under hydrostatic loading, a significant increase in low-frequency background intensity was clearly observed. A distinct broad peak with superimposed phonon lines is located in the region of 100 cm⁻¹. If this scattering is due to intraband electronic transitions, such a low carrier's relaxation frequency at room temperature cannot be correlated with rather large value of electron-phonon scattering, which, according to calculations [2], increases significantly under pressure and determines a superconductivity arising. This, in turn, re-

news the question of the mechanism of the observed superconductivity in AuAgTe₄.

References

- [1] Ushakov A. V., Streltsov S. V. and Khomskii D. I., *J. Phys.: Condens. Matter.*, **31**, 235601 (2019).
- [2] Amiel Y., Kafle G. P., Komleva E. V., Greenberg E., Ponosov Yu. S., Chariton S., Lavina B., Zhang D., Palevski A., Ushakov A. V., Khomskii D. I., Mazin I. I., Streltsov S. V., Margine E. R., Rozenberg G., Rozenberg Kh., *arXiv preprint*, **2301**, 08033 2023.
- [3] Zamyatin D., Pankrushina E., Streltsov S. and Ponosov Yu., *Inorganics*, **11(3)**, 99 2023; <https://doi.org/10.3390/inorganics11030099>

Quantum criticality features in the Co doped MnSi

S. M. Stishov¹, A. E. Petrova¹, A. M. Belemuk²

¹*P. N. Lebedev Physical Institute, Leninsky pr., 53, 119991 Moscow, Russia*

²*Institute for High Pressure Physics of RAS, 108840 Troitsk, Moscow, Russia*

E-mail: stishovsm@lebedev.ru

Quantum critical phenomena are expected when a second order phase transition line reaches zero temperature.

A quantum critical point (QCP) occurs at variation of a control parameter, which can be pressure, magnetic field or chemical concentration. The QCP is situated at the zero-temperature end of a singular critical trajectory along which the correlation length and correlation time both diverge. In case of metallic magnets, the ratio C_p/T also diverge along the critical trajectory that indicates a diverging electron effective mass “dressed” by spin fluctuations.

In the current paper some analysis of the experimental data [1–3] on MnSi phase diagram doped with Co an Fe as a control parameter is given. As was discovered some years ago helical magnet MnSi experiences a quantum phase transition at pressure about 14 kbar [4–6], but it is still not clear whether this transition is quantum critical [7]. So it was suggested that a doping MnSi with suitable impurities may shed a new light on this problem.

However, it was found in the recent study of MnSi doped with Co [1, 2] that in this case there is no a singular critical trajectory. Instead, a cloud of the helical fluctuations with a diverging ratio C_p/T spreading over a significant range of concentrations and temperatures arise at large concentration of Co close to 0 K. Yet, a mysterious universal line revealing an independence of spin fluctuation contributions to the heat capacity of (Mn,Co)Si on impurity contents and its nature is discovered. The specifics of heat capacity behavior in (Mn,Co)Si requires a further consideration.

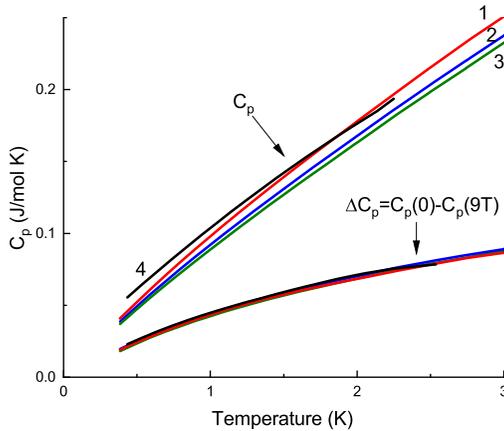


Fig. 1. Two sets of heat capacity data. Designations shown in the plot. The data were moderately smoothed for better viewing. $(\text{Mn}_{1-x}\text{Co}_x)\text{Si}$: (1, 2, 3)-0.09, 0.063, 0.057, $(\text{Mn}_{0.83}\text{Fe}_{0.17})\text{Si}$

Some magnetic and heat capacity measurements were performed to characterize the (Mn,Co)Si samples. All measurements were made by use the Quantum Design PPMS system with the heat capacity and vibrating magnetometer moduli and the He-3 Refrigerator.

The samples were prepared by arc melting under argon atmosphere and subsequently the triarc Czochralski technique. The electron-probe microanalysis shows that compositions are: $\text{Mn}_{0.93}\text{Co}_{0.057}\text{Si}$, $\text{Mn}_{0.92}\text{Co}_{0.063}\text{Si}$, $\text{Mn}_{0.89}\text{Co}_{0.09}\text{Si}$, $\text{Mn}_{0.83}\text{Fe}_{0.17}\text{Si}$.

For comparison purpose the classical Monte Carlo (MC) calculations were made to describe the behavior of magnetization of a spin system in an

applied magnetic field. We use an approach involving localized spins coupled by the exchange and Dzyloshinski-Moriya (DM) spin-spin interactions. A standard lattice spin Hamiltonian for localized spins in an applied magnetic field reads [8–10]. To discuss the mentioned specifics of the heat capacity let us turn to Fig. 1, where two sets of the heat capacity curves are shown. One of the sets includes heat capacity data for (Mn,Co)Si [1] and (Mn,Fe)Si [3] with appending new experimental data on (Mn,Co)Si below 2 K [2]. The other set illustrates the difference between heat capacity at zero magnetic field $C_p(0)$ and heat capacity at 9 T $C_p(9T)$ for (Mn,Co)Si samples and the sample of (Mn,Fe)Si. As was mentioned in Ref. [1] this manipulation implies a subtraction of some of background contribution, including phonon and electron ones to the heat capacity leaving its fluctuation part intact. As is seen in Fig. 1 the mentioned procedure results in a puzzling universal line exposing an independence of the fluctuation contributions to the heat capacity on impurity contents and its nature. This situation suggests an invariance of this contribution despite the all changes caused by doping. This bold guess seems to contradict the observations. Indeed, the fluctuations under discussions are spin fluctuations and they should be connected with a general spin number in a system. The saturation magnetization data clearly indicate a progressive magnetic moment (spins?) loss on doping. The latter is supported by the Monte Carlo calculations of the saturation magnetization of the classical chiral spin system with isomorphic impurities. However, the volume decrease on doping may keep the energy of spin subsystem almost compensated for the spin loss and therefore makes spin fluctuation abundance not quite sensitive to the spin replacements.

The fluctuation contribution to the heat capacity can be described with a single power function of temperature for all four data sets: $\Delta C_p \sim T^{0.335}$. Correspondingly, the ratio $\Delta C_p/T$ diverge as $T^{-0.665}$, therefore, confirming that just the spin fluctuations are responsible for the divergence of $\Delta C_p/T$. In this connection we are reminded that for metallic systems at $T \rightarrow 0$, $\Delta C_p = \gamma T$ or $\Delta C_p/T = \gamma$, where $\gamma \sim m^*$, m^* is the effective electron mass. So, the effective electron mass diverges at $T \rightarrow 0$, being “dressed” by the spin fluctuations. The mysterious universal line revealing an independence of spin fluctuation contributions to the heat capacity of (Mn,Co)Si on impurity contents and its nature is discovered. This situation probably declares an invariance of the spin subsystem energy that may be provided by the response of itinerant electron system at the volume change at doping.

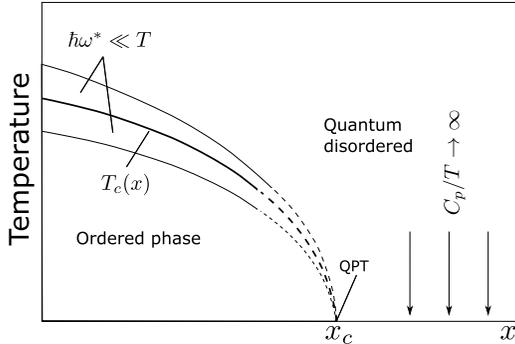


Fig. 2. Proposed schematic phase diagram of $\text{Mn}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$. Dashed lines indicate that at large impurity concentration the phase transition is strongly smeared out. The phase transition at x_c can be quantum critical point or quantum first order phase transition

The current data are revealing once again that a singular quantum critical point does not exist in the system under study. In its place, one can see some sort of a quantum critical cloud covering a significant range of dopant concentrations.

This finding suggests a phase diagram for metal magnet with doping as a control parameter, presented in Fig. 2, where there is no a singular quantum critical trajectory. One can see here a parallel to the T - P phase diagram of pure MnSi with pressure as a control parameter, where an extended paramagnetic region with specific properties beyond the phase transition point was found in Ref. [13, 14].

References

- [1] Petrova A. E., Gavrilkin A. E., Rybalchenko G. V., Menzel D., Zibrov I. P., Stishov S. M., *Phys. Rev. B* **103**, L180401 (2021).
- [2] Petrova A. E., Gavrilkin S. Y., Tsvetkov A. Yu., Menzel D., Grefe J., Khasanov S., S. M. Stishov, *Phys. Rev.* **106** 014406 (2022).
- [3] Petrova A. E., Gavrilkin A. E., Menzel D., Stishov S. M., *Phys. Rev. B* **100**, 094403 (2019).
- [4] Thompson J. D., Fisk Z., Lonzarich Z., *Phys. B (Amsterdam, Neth.)* **161**, 317 (1989).

- [5] Pfeleiderer C., McMullan G. J., Lonzarich G. G., *Phys. B* (Amsterdam, Neth.) **206**, 847 (1995).
- [6] Thessieu C., Flouquet J., Lapertot G., Stepanov A. N., Jaccard D., *Solid State Commun.* **95**, 707 (1995).
- [7] Stishov S. M., Petrova A. E., *Physics-Usppekhi*, **60** (12), 1268 (2017).
- [8] Yi S. D., Onoda S., Nagaosa N., Hoon Han J., *Phys. Rev. B* **80**, 054416 (2009).
- [9] Hamann A., Lamago D., Wolf Th., v. Löhneysen H., Reznik D., *Phys. Rev. Lett.* **107**, 037207 (2011).
- [10] Buhrandt S., Fritz L., *Phys. Rev. B* **88**, 195137 (2013).
- [11] Belemuk A. M., Stishov S. M., *Phys. Rev. B* **104**, 064404 (2021).
- [12] Belemuk A. M., *Solid State Commun.* **351**, 114787 (2022).
- [13] Pfeleiderer C., Julian S. R., Lonzarich G. G., *Nature* **414**, 427 (2001).
- [14] Pfeleiderer C., Reznik D., Pintschovius L., v. Löhneysen H., Garst M., Rosch A., *Nature* **427**, 227 (2004).

Квантовый фазовый переход в CeCoIn_5 : Экспериментальные факты и теория

В. Р. Шагинян

*Петербургский институт ядерной физики, РИЦ Курчатовский институт
E-mail: vrshag@thd.pnpi.spb.ru*

Сообщество специалистов по конденсированным средам ведет горячие споры о природе квантовых фазовых переходов, определяющих низкотемпературные свойства металлов с тяжелыми фермионами [1]. Размзанный скачок при квантовом фазовом переходе в CeCoIn_5 , обнаруженный как в остаточном сопротивлении, так и в холловском сопротивлении R_H , наряду с нарушением симметрии временной инвариантности T и зарядовой инвариантности C , включая нарушение квазичастично-дырочной симметрии, и дают важные сведения о происхождении как неферми-жидкостного поведения, так и квантового фазового перехода. Впервые на основе ряда важных экспериментальных данных и их объяснения показано, что наши наблюдения однозначно указывают, что квантовый фазовый переход в CeCoIn_5 сопровождается нарушением симмет-

рии, а сам квантовый переход представлен топологическим ферми-конденсатным квантовым фазовым переходом, соединяющим две ферми-поверхности разных топологических зарядов и формирующим плоскую зону в CeCoIn_5 .

Список литературы

- [1] Maksimovic N., Eilbott D. H., Cookmeyer T., Wan T., Ruzs J. *et al.*, *Science* **375**, 76 (2022).
- [2] Shaginyan V. R., Amusia M. Ya., Msezane A. Z., and Popov K. G., *Phys. Rep.* **492**, 31 (2010).

МАГНЕТИЗМ. МАГНИТНЫЕ СТРУКТУРЫ. КОНДО-СИСТЕМЫ

Phonon, defect and magnetic contributions to heat capacity of $\text{Eu}_x\text{Yb}_{1-x}\text{B}_6$ solid solutions

M. Anisimov¹, V. Voronov¹, S. Gavrilkin², A. Tsvetkov², K. Mitsen²,
N. Shitsevalova³, G. Levchenko³, V. Filipov³

¹*Prokhorov General Physics Institute of the RAS, Moscow, Russia*

²*Lebedev Physical Institute of the RAS, Moscow, Russia*

³*Frantsevich Institute for Problems of Materials Science, NASU, Kyiv, Ukraine*

The investigation of both EuB_6 and YbB_6 host materials is on top of modern physics. In particular YbB_6 is discussed to be a member of a new class of 3D topological insulators [1]. EuB_6 shows electronic and magnetic phase separation between $T_C \leq T \leq T_M$ [2] accompanied by the effect of negative colossal magnetoresistance. Moreover EuB_6 is considered now as a Weyl semimetal with several topological states [3].

Here we study zero-field heat capacity of $\text{Eu}_x\text{Yb}_{1-x}\text{B}_6$ ($x = 0, 0.127, 1$) family. The measurements were performed by using Quantum Design installation PPMS-9 at temperatures 1.9–300 K. High quality single ($x = 0, 1$) and polycrystals ($x = 0.127$) under investigation were grown by vertical crucible-free inductive zone melting in argon atmosphere at parameters fixed individually for each compound. In all compounds rare-earth (RE) ions are weakly bound with rigid boron cage and may be treated as independent Einstein oscillators [4]. The data obtained allow estimating correctly phonon components including (i) the Debye term from rigid boron cage ($\Theta_D \approx 1160$ K) and (ii) the contribution from quasilocal vibrational mode of RE ions

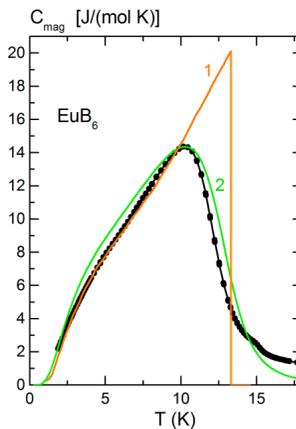


Fig. 1

with different Einstein temperatures. Our results confirm considerable difference between Einstein temperatures in end-point compounds EuB_6 ($\Theta_E \approx 125$ K) and YbB_6 ($\Theta_E \approx 91.6$ K) similar to the effect reported previously in [5]. Additional (iii) low-temperature defect mode [6] identified for Eu-low systems ($x \leq 0.127$) is related to the presence of 1.15–1.3 % vacancies at boron position. (iv) Magnetic contribution to heat capacity of EuB_6 ($C_{\text{mag}} = C - C_{\text{ph}}$) was analyzed in the framework of mean-field theory (MFT). The analysis presented in Fig.1 displays MFT approximation with different values of both demagnetization factor and demagnetization field. Our estimates show that 97 % of the spin entropy, associated with the $^8S_{7/2}$ -state of Eu^{2+} ion, is frozen out at Curie point T_C . The finding that short-range magnetic ordering in the paramagnetic phase is restricted by no more than 3 % of EuB_6 spin entropy should be taken into account in modern approaches for electronic and magnetic phase separation in this extraordinary compound.

The study of YbB_6 was supported by a grant from the Russian Science Foundation № 22-22-00990, <https://rscf.ru/project/22-22-00990>.

References

- [1] Xia M. et al., *Sci. Rep.* **4**, 5999 (2014).
- [2] Süllow S. et al., *Phys. Rev. B* **62**, 11626 (2000).
- [3] Gao S.-Y. et al., *Phys. Rev. X* **11**, 021016 (2021).
- [4] Mandrus D. et al., *Phys. Rev. B* **64**, 0123 (2001).
- [5] Takahashi Y. et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 2304 (1999).
- [6] Anisimov M. et al., *JETP* **116**, 760 (2013).

Transport properties of novel ternary germanide with high palladium content $\text{CePd}_{12}\text{Ge}_2$

A. V. Gribanov¹, E. A. Ptashkina¹, S. F. Dunaev¹, S. V. Gribanova²,
M. Anisimov³, A. V. Bogach³, N. A. Samarin³

¹*Department of Chemistry, Moscow Lomonosov State University, Moscow, Russia*

²*Sechenov First Moscow State Medical University, Moscow, Russia*

³*Prokhorov General Physics Institute of the RAS, Moscow, Russia*

To date, the Ce-Pd-Ge ternary system cannot be called completely studied, despite the fact that a number of researchers have already discovered almost

twenty ternary intermetallic compounds in it. A critical review of this system published in 2006 [1] reported the chemical compositions of eighteen ternary compounds. The crystal structures of eleven of them have been determined and also given in the review. The review was based on the first published information on the isothermal cross-section of the ternary state diagram of the Ce-Pd-Ge system [2], as well as on numerous original papers devoted to individual compounds. In current work we investigate novel ternary germanide $\text{CePd}_{12}\text{Ge}_2$. A polycrystalline alloy (ca. 1 g) with a nominal composition $\text{Ce}_7\text{Pd}_{81}\text{Ge}_{12}$ (at. %) was synthesized in Department of Chemistry of Moscow Lomonosov State University via standard arc-melting the elemental constituents (Ce — 99.85 wt %, Pd — 99.90 wt %, Ge — 99.9999 wt %) under purified argon atmosphere using Zr as a getter.

The crystal structure of $\text{CePd}_{12}\text{Ge}_2$ intermetallic was determined and refined from single-crystal X-ray diffraction data. The compound crystallizes in a tetragonal structure of a new type: space group $I4_1md$ (No. 109), cell parameters $a = b = 12.0819(9)$ Å, $c = 6.4554(7)$ Å, $V = 942.3(2)$ Å³, $Z = 4$. In a crystallographic unit cell, Ce atoms occupy one Wyckoff site ($4a$). Two ($16c$) sites and two ($8b$) sites are filled with Pd atoms. One more position ($8b$) is occupied by Ge atoms. An analysis of the features of the crystal structure revealed its relationship with the known binary type BaCd_{11} .

Transport properties were measured by four-probe dc -technique at temperatures 1.8–300 K in applied magnetic fields up to 82 kOe (Fig.1). Electrical resistivity has a metallic character with logarithmic rise $\rho(T) \sim \ln(T)$ at low temperatures ($T < 9$ K) which allows classifying $\text{CePd}_{12}\text{Ge}_2$ as a Kondo system. We also establish unusual scaling behavior of positive transverse

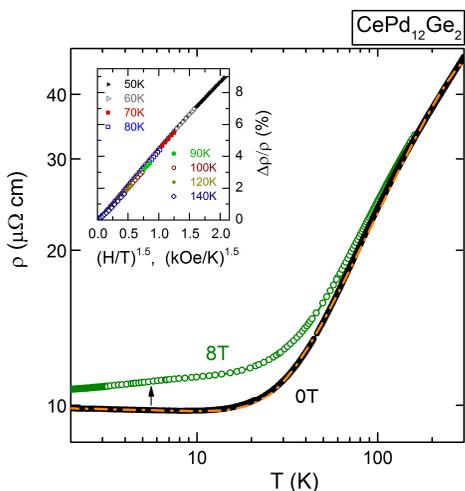


Fig. 1

magnetoresistance $\Delta\rho/\rho = f [(H/T)^{1.5}]$ in a wide interval of temperatures far outside of Kondo region (see the inset in Fig. 1). The overlap between 8 iso-therms exists in the range of almost 100 K.

Further information about transport and structural properties of $\text{CePd}_{12}\text{Ge}_2$ may be obtained from [3] and from: «The Cambridge Crystallographic Data Centre» (CCDC, <https://www.ccdc.cam.ac.uk/>) on quoting the deposition number 2150997.

References

- [1] Kuznetsov V., Ce-Ge-Pd (Cerium - Germanium - Palladium), in: Ternary Alloy Systems: Phase Diagrams, Crystallographic and Thermodynamic Data critically evaluated by MSIT[®] Noble Metal Systems. *Selected Systems from Ag-Al-Zn to Rh-Ru-Sc, Landolt-Börnstein — Group IV Physical Chemistry*, 11B, (2006).
- [2] Seropegin Yu. D., Griбанov A. V. et al., *J. Alloys Compd.* **269**, 157 (1998).
- [3] Griбанov A. V. et al., *Intermetallics* **149**, 107652 (2022).

Магнитные свойства киральных магнетиков с примесями

А. М. Белемук¹, С. М. Стишов²

¹*Институт физики высоких давлений РАН, г. Москва, Россия*

²*Физический институт Академии наук, г. Москва, Россия*

Исследуется эволюция магнитной восприимчивости в магнитном поле и индуцированного магнитного момента в киральных магнетиках с примесями. Вычисления проводятся на основе спин-решеточной модели с помощью классического метода моделирования Монте Карло. Анализ ведется для MnSi допированного Fe и Co. В гамильтониане учитываются два способа расположения примесей в образце. Результаты обеих моделей сравниваются с экспериментальными данными и предсказывают быстрое подавление признаков магнитного фазового перехода с увеличением как допирования так и магнитного поля. Характер эволюции флуктуационного максимума восприимчивости зависит от величины магнитного поля. Анализ интенсивности Брэгговского рассеяния для этих двух моделей показывает, что резкий пик восприимчивости возникает при переходе между состояниями с различной спиральностью.

Фрустрация взаимодействий в дипольно-гейзенберговском магнетике LiGdF_4

В. Н. Глазков^{1,2}, С. С. Сосин^{1,2}, А. Ф. Яфарова^{1,2}, Г. Ю. Андреев³,
Р. Г. Батулин³, С. Л. Кораблева³, О. А. Морозов³, И. В. Романова³

¹*Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, г. Москва, Россия*

²*Факультет физики, НИУ ВШЭ, г. Москва, Россия*

³*Казанский федеральный университет, г. Казань, Россия*

При помощи спектроскопии магнитного резонанса и измерений намагниченности показано, что соединение LiGdF_4 является примером необычной фрустрации взаимодействий между магнитными ионами: характерные параметры диполь-дипольного и гейзенберговского обменного взаимодействий оказываются близкими по величине. Вклад одноионной анизотропии для магнитных ионов Gd^{3+} также оказывается сравним с характерной энергией спин-спиновых взаимодействий.

Анализ спектров магнитного резонанса в диамагнитно разбавленных образцах LiGdF_4 позволил выделить как линии поглощения, связанные с тонкой структурой спектра ЭПР изолированных магнитных ионов, так и линии поглощения от обменно связанных пар. В результате удалось точно установить соотношение между различными взаимодействиями. Компенсация взаимодействий оказывается наиболее полной при $\text{H} \parallel c$ — в этой ориентации приложенного магнитного поля температура Кюри–Вейса оказывается практически равной нулю и LiGdF_4 , оставаясь концентрированным магнетиком, ведёт себя как почти идеальный парамагнетик. [1]

Этот случайно сложившийся баланс взаимодействий, с почти полной компенсацией взаимодействий для некоторых ориентаций приложенного поля, приводит к усиленному магнетокалорическому эффекту в LiGdF_4 : концентрированная магнитная система оказывается в расчёте на спин столь же эффективна для адиабатического размагничивания как и разбавленный парамагнетик.

Работа поддержана грантом РФФ 22-12-00259 (рост образцов и ЭПР измерения) и в рамках Программы стратегического академического лидерства Казанского федерального университета PRIORITY-2030 (измерения намагниченности и теплоёмкости).

Список литературы

[1] Сосин С. С. и др., *Письма в ЖЭТФ* **116**, 747 (2022).

Как величина и знак взаимодействия Дзялошинского– Мория влияет на магнитную структуру в гелимагнетиках $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ и $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ge}$

С. В. Григорьев¹, Н. М. Чубова², О. И. Утесов¹

¹*Петербургский институт ядерной физики, НИЦ «Курчатовский институт»,
Гатчина, Россия*

²*Национальный исследовательский центр
«Курчатовский институт», г. Москва, Россия*

Кубическая нецентросимметричная структура соединений B20 формирует спиральную структуру с волновым вектором $k_s = D/J$, уравновешенную конкуренцией двух взаимодействий: ферромагнитного обменного взаимодействия J и антисимметричного взаимодействия Дзялошинского–Мория (ДМ) D [1,2]. Знак магнитной хиральности определяется знаком ДМ взаимодействия D , который диктуется, с одной стороны, структурной хиральностью, а с другой стороны химическими элементами (Fe, Co). Твердые растворы гелимагнетиков соединений $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ge}$ и $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, демонстрируют переключение знака магнитной хиральности в зависимости от концентрации x . Переключение хиральности сопровождается преобразованием спиральной структуры в ферромагнитную при $x_c = 0.60$ для $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ge}$ [3] и при $x_c = 0.65$ для $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ [4].

Магнитная структура соединений для богатых железом соединений ($x < x_c$) описывается моделью Бака–Йенсена [1], в которой строго соблюдается иерархия взаимодействий — обменного (ферромагнитного), второго по величине ДМ взаимодействия и совсем малой кубической анизотропии и/или анизотропного обмена. При этом волновой вектор k_s слабо зависит от температуры, демонстрируя тем самым, что J и D от температуры практически не зависят.

При $x = x_c$ ДМ взаимодействие стремится к нулю из-за различных знаков для таких соединений с Fe и Co. Оказалось, что существенным фактором в формировании ферромагнитной структуры является кубическая анизотропия, которая превалирует над ДМ взаимодействием [2,5,6]. Причем в соединении с $x = x_c$ происходит температурный фазовый переход, при котором высокотемпературная фаза ниже T_c является гелимагнитной с волновым вектором k_s , уменьшающимся с температурой пропорционально T и скачком обращающимся в ноль при некоторой температуре T_f . Такое поведение обусловлено сильной зависимостью кубической анизотропии от температуры. Магнитное поле, приложенное не по «легкой», а по «жесткой» оси анизотропии, способно восстановить спиральную структуру при температурах ниже T_f .

При концентрациях с $x > x_c$ ДМ взаимодействие другого знака (по сравнению с $x < x_c$) восстанавливает геликоидальную структуру. Однако, во-первых, кубическая анизотропия оказывается одного порядка с величиной ДМ взаимодействия, и, во-вторых, волновой вектор спирали теперь сильно растет с понижением температуры, как если бы кубическая анизотропия способствовала появлению геликоидальной структуры, усиливая ДМ взаимодействие. Учитывая тот факт, что соединения CoGe и CoSi являются немагнитными изоляторами, мы рассматриваем перколяционную модель ферромагнетика на основе атомов Fe, состояние которого возмущает ДМ взаимодействие, определяемое главным образом немагнитными атомами Co.

Список литературы

- [1] Bak P., Jensen M. H., *J. Phys.* C13 (1980) L881.
- [2] Nakanishi O., Yanase A., Hasegawa A., Kataoka M., *Solid State Commun.* 35 (1980) 995.
- [3] Siegfried S.-A., Altyntbaev E. V., Chubova N. M., Dyadkin V., Chernyshov D., Moskvina E. V., Menzel D., Heinemann A., Schreyer A., and Grigoriev S. V., *Phys. Rev. B* 91 (2015) 184406.
- [4] Grigoriev S. V., Siegfried S.-A., Altyntbaev E. V., Potapova N. M., Dyadkin V., Moskvina E. V., Menzel D., Heinemann A., Axenov S. N., Fomicheva L. N., and Tsvyashchenko A. V., *Phys. Rev. B* 90 (2014) 174414.
- [5] Grigoriev S. V., Sukhanov A. S., and Maleyev S. V., *Phys. Rev. B* 91 224429 (2015).
- [6] Grigoriev S. V., Chubova N. M., Azarova L. A., Utesov O.I., *Annals of Physics*, Volume 447, Part 2, (2022) 169132.

Ab initio изучение возможных магнитных структур в сверхпроводящем рении при нарушении симметрии обращения времени

В. Е. Дмитриенко, В. А. Чижиков

*Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

Недавно в сверхпроводящих кристаллах рения с помощью μ SR была обнаружена спонтанная намагниченность [1, 2], связанная с нарушением симметрии обращения времени. Однако метод μ SR даёт информацию о намагниченности только в отдельных точках элементарной ячейки, где происходит остановка мюона. Сверхпроводимость не нарушает пространственную симметрию рения (группа $P6_3/mmc$, два атома в элементарной ячейке). Мы изучили симметрию и провели первопринципные расчёты возможных магнитных структур в рении с помощью пакета Quantum ESPRESSO.

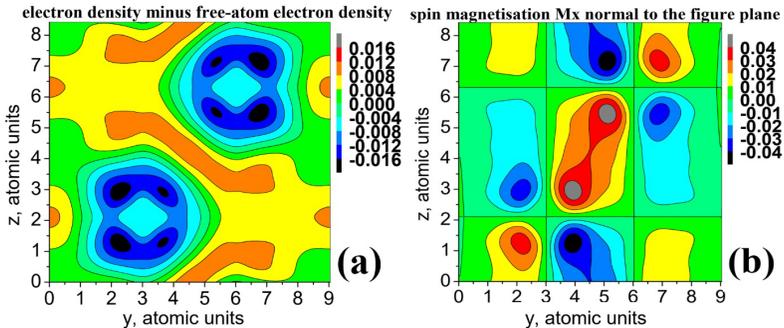


Рис. 1. Электронная (а) и магнитная (б) структура кристалла рения в плоскости, проходящей через два соседних атома. Электронная плотность кристалла показана за вычетом электронной плотности свободных атомов, чтобы были яснее видны эффекты кристаллического окружения. Компонента M_x спиновой намагниченности (б) в красных (синих) областях направлена к (от) смотрящего, компоненты M_y и M_z равны нулю в этой плоскости. При обращении времени намагниченность меняет знак, и получающаяся магнитная структура не может быть совмещена с исходной никакой операцией пространственной симметрии (похожая ситуация имеет место в URu_2Si_2 [3])

На рис. 1 приведены результаты расчётов для одной из структур с магнитной симметрией $P6_3/mmc$, когда нарушается только симметрия обращения времени. В этой структуре атомы рения представляют собой магнитные анти-тороидные вихри с нулевым магнитным моментом, как в URu_2Si_2 [3], но заметная намагничённость \mathbf{M} есть и между атомами (рис. 1,b). Вычисленная абсолютная намагничённость $|(M_x, M_y, M_z)|$ около трёх магнетонов Бора на ячейку. Детали структуры этих вихрей можно исследовать, используя магнитную рентгеновскую и нейтронную дифракцию для двух типов запрещённых брэгговских рефлексов. Чисто магнитные рефлексы возбуждаются исключительно из-за магнитного упорядочения (рис. 1,b), а в возбуждение смешанных рефлексов даёт вклад ещё и несферичность электронной плотности атомов (рис. 1,a).

Список литературы

- [1] Huddart B.M., et al., Intrinsic Nature of Spontaneous Magnetic Fields in Superconductors with Time-Reversal Symmetry Breaking, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 237002 (2021).
- [2] Csire G., et al. Magnetically textured superconductivity in elemental rhenium. *Phys. Rev. B.* **106**, L020501 (2022).
- [3] Dmitrienko V. E., Chizhikov V. A., Hidden order in URu_2Si_2 : Symmetry-induced antitoroidal vortices. *Phys. Rev. B.* **98**, 165118 (2018).

Фазовая диаграмма антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с конкурирующими взаимодействиями и магнитным полем

К. Ш. Муртазаев, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. К. Рамазанов

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

Введение

В последнее время особое внимание уделяется исследованию магнитных состояний, фазовых переходов (ФП) и критических явлений в фрустрированных спиновых системах. Это связано с тем, что указанные системы зачастую проявляют поведение, отличное от поведения соответствующих нефрустрированных систем. Причина такого поведения

заключается в сильном вырождении в спиновой подсистеме, эффективном ослаблении связи и, как следствие, в высокой чувствительности к различным возмущающим факторам: дополнительным взаимодействиям, слабым полям, тепловым и квантовым флуктуациям, анизотропии, дефектам и деформациям [1–4].

В данной работе нами изучается влияние магнитного поля на структуры основного состояния, магнитные и термодинамические свойства антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической (ОЦК) решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей.

Модель и метод исследования

Гамильтониан данной модели Изинга имеет 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 $S_{i,j,l} = \pm 1$ — изинговский спин, J_1 и J_2 — константы обменного взаимодействия первых и вторых ближайших соседей, h — величина магнитного поля (приводится в единицах $|J_1|$). Магнитное поле менялось в интервале $0.0 \leq h \leq 18.0$. В данной работе $J_2 = J_1 = -1.0$. В системе сосуществуют 4 подрешетки.

Наиболее эффективными и точными для изучения таких систем являются репличный обменный алгоритм и алгоритм Ванга–Ландау. В данной работе используется репличный обменный алгоритм метода МК [5].

Расчёты проводились с использованием периодических граничных условий и линейными размерами $2 \times L \times L \times L$, $L=12 \div 24$, где L измеряется в размерах элементарной ячейки. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался участок длиной $\tau_0 = 4 \cdot 10^5$ шагов МК на спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль Марковской цепи длиной до $\tau = 500\tau_0$ шагов МК на спин.

Результаты моделирования

На рис. 1 показана фазовая диаграмма зависимости критической температуры T_N от величины магнитного поля h . На диаграмме видно, что в точке $h = 10$ пересекаются три разные фазы: антиферромагнитная, ферромагнитная и парамагнитная. Черные и красные стрелки указывают направления спинов в каждой подрешетке. Появление различных фаз на диаграмме обусловлено изменением магнитной структуры основного со-

стояния. Каждой фазе соответствуют разные магнитные структуры. Как видно из рисунка, антиферромагнитное и ферримагнитное упорядочение наблюдаются при $h < 6$ и $h > 6$ соответственно. Треугольники на пунктирной линии соответствуют пикам магнитной восприимчивости [6].

Заключение

Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины внешнего магнитного поля антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке. Получены магнитные структуры основного состояния в интервале поля $0 \leq h \leq 18.0$.

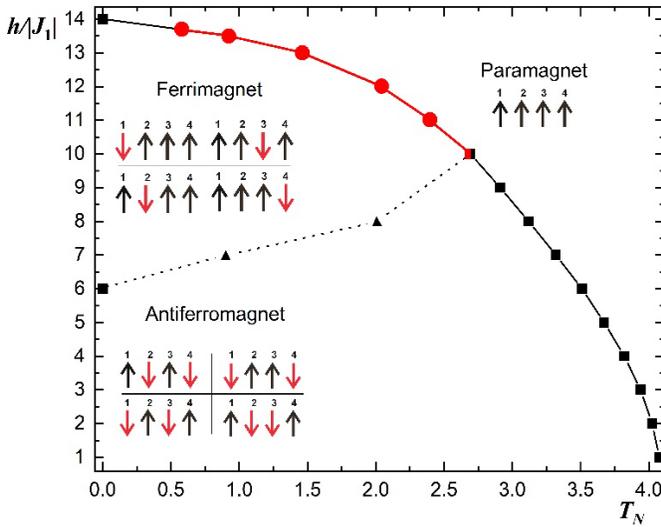


Рис. 1. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры T_N от магнитного поля $h/|J_1|$. Квадратами отмечены точки ФП второго рода ($0.0 \leq h \leq 10.0$). Круглыми точками отмечены точки ФП первого порядка ($11.0 \leq h \leq 13.7$). Треугольники на пунктирной линии соответствуют пикам магнитной восприимчивости

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 20-32-90079 — аспиранты. Также работа была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

Список литературы

- [1] Сосин С. С., Прозорова Л. А., Смирнов А. И. *УФН* 92(2005).
- [2] Доценко В. С. *УФН* 165, 481 (1995).
- [3] Коршунов С. Е. *УФН* 176, 233 (2006).
- [4] Малеев С. В. *УФН* 172, 617 (2002).
- [5] Hukushima K., Nemoto K., *J. Phys. Soc. Jpn.* 65 1604–1608 (1996).
- [6] Murtazaev K. Sh., Magomedov M. A., Murtazaev A. K., Ramazanov M. K. *Physica E.* 148. 115646. (2023).

Магнитный коллапс в Fe_3Se_4 под давлением

Л. В. Бегунович¹, М. М. Коршунов^{1,2}, С. Г. Овчинников^{1,2}

¹Сибирский федеральный университет, г. Красноярск, Россия

²Институт физики им. Л. В. Киренского, ФИЦ КНЦ СОРАН,
г. Красноярск, Россия

В настоящее время огромный интерес проявляется к изменениям магнитных и электронных свойств с ростом давления, особенно к магнитному коллапсу под давлением [1]. С подобными исследованиями связан поиск новых материалов со сверхпроводимостью вблизи комнатной температуры. В рамках теории функционала плотности в приближении GGA с обменно-корреляционным потенциалом PBE теоретически исследована электронная структура и магнитные свойства в Fe_3Se_4 при изотропном давлении. Обнаружен переход из ферромагнитного состояния в ферромагнитное при давлении 5 ГПа и магнитный коллапс при давлении 8 ГПа, выше которого найдено исчезновение магнитных моментов на ионах железа и реализуется парамагнитная фаза. Плотность состояний на уровне Ферми меняется немонотонно при магнитных переходах с сохранением металлического состояния при всех давлениях. Недавно появились примеры сверхпроводимости под давлением после магнитного коллапса. В MnSe найдена сверхпроводимость с $T_c = 5$ К и магнитный коллапс выше 12 ГПа [2]. Сверхпроводник был получен в RbMn_6Bi_5 при подавлении антиферромагнитного порядка давлением выше 13 ГПа с $T_c = 9.5$ К при $P = 15$ ГПа [3].

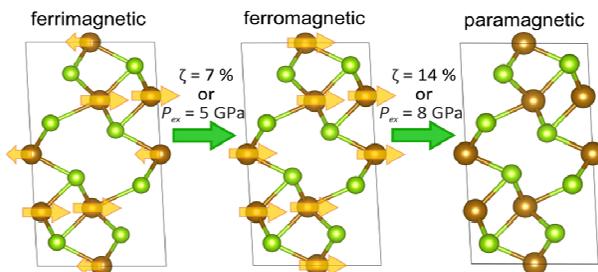


Рис. 1. Предсказанные переходы ферримагнетик-ферромагнетик-парамагнетик в Fe_3Se_4 [4]

Список литературы

- [1] Орлов Ю. С., Николаев С. В., Дудников В. Ф., Гавричков В. А., Овчинников С. Г. Особенности спиновых кроссоверов в магнитных материалах // *УФН* 2023, принята в печать.
- [2] Hung T. L., Huang C. H., Deng L. Z. et al., *Nature Commun.*, 12, 5436 (2021).
- [3] Yang P.-T., Dong Q.-X., Shan P.-F. et al., *Chin. Phys. Lett.* 39, 067401 (2022).
- [4] Begunovich L. V., Korshunov M. M. and Ovchinnikov S. G. Magnetic Collapse in Fe_3Se_4 under High Pressure // *Materials* 2022, V. 15, P. 4583.

Магнитные фазовые переходы при давлении в BaMn_2P_2 и BaMn_2As_2 : GGA+U

Н. С. Павлов^{1,2}, И. Р. Шеин³, И. Р. Некрасов^{1,2}

¹Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

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

³Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия

E-mail: pavlovns@gmail.com

Изучение 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]). Одной из задач поиска аналогов данных систем является изучение возможности полного замещения Fe другими

химическими элементами, например, марганцем Mn. В связи с тем, что у Mn наполовину заполнена 3d-оболочка, он является сильным магнитным ионом. Однако, при приложении внешнего давления магнетизм подавляется. Тогда появляется возможность реализации сверхпроводимости. В работе [6] для BaMn_2As_2 , изоструктурного аналога системы BaFe_2As_2 , при приложении внешнего давления выше 5.8 ГПа происходит переход в металлическое состояние и резкое понижение сопротивления при температуре ниже 17 К. Магнитные измерения в [6] не проводились. К настоящему моменту, возможность сверхпроводимости в BaMn_2As_2 детально не изучалась. Также изоструктурное соединение с фосфором BaMn_2P_2 под давлением теоретически и экспериментально не изучалось.

В данной работе в рамках теории функционала электронной плотности DFT проведено изучение BaMn_2P_2 и BaMn_2As_2 при различном внешнем давлении. Расчеты были произведены в приближении GGA+U в программном пакете VASP. Построена зависимость величин параметров решётки, величины энергетической щели, магнитных моментов от внешнего давления. Обнаружены следующие фазы и фазовые переходы:

1. При нормальном давлении и $T = 0$ К эти соединения являются диэлектриками с антиферромагнитным упорядочением.

2. При $P = 4.8$ ГПа для BaMn_2P_2 и $P = 12$ ГПа для BaMn_2As_2 происходит переход из фазы диэлектрика с антиферромагнитным упорядочением в металлическую фазу с антиферромагнитным упорядочением. Происходит закрытие запрещенной щели.

3. При $P = 33$ ГПа для BaMn_2P_2 и $P = 76$ ГПа для BaMn_2As_2 осуществляется переход из фазы металла с антиферромагнитным упорядочением в ферромагнитную металлическую фазу.

4. При $P = 41$ ГПа для BaMn_2P_2 и $P = 101$ ГПа для BaMn_2As_2 данные соединения испытывают фазовый переход из ферромагнитного металла в немагнитный металл (локальные магнитные моменты на атомах исчезают). Тем самым выше данных давлений в системах BaMn_2P_2 и BaMn_2As_2 теоретически может реализоваться сверхпроводящее состояние.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФ (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] Satya A. T., Mani A., Arulraj A., Shekar N. V. C., et al., *Phys. Rev. B* **84**, 180515 (2011).

Прямой обмен между примесями и природа ферромагнетизма в GaAs:Mn

Н. А. Богословский¹, П. В. Петров¹, Н. С. Аверкиев¹

¹*ФТИ им. А. Ф. Иоффе, 194021, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26*

В 1996 году профессор Оно показал, что ферромагнетизм возникающий в кристаллах GaAs легированных марганцем связан не с возникновением ферромагнитных кластеров MnAs, как предполагалось ранее, а является свойством самого легированного полупроводника. Позже Дитлом предложил теоретическую модель, объясняющую это явление, в которой предполагается, что полупроводник находится на металлической стороне перехода металл-диэлектрик, а ферромагнетизм обусловлен косвенным взаимодействием ионов марганца посредством свободных дырок [2]. В рамках этой модели была продемонстрирована возможность получения ферромагнитных легированных полупроводников с температурами Кюри выше комнатной. Однако, такие температуры так и не были достигнуты, напротив, со временем стали накапливаться противоречия этой теории с данными различных экспериментальных групп. Суть этих противоречий изложена в статье «Battle of the bands» [3], и а главный вопрос состоит в том, какая из зон связана с возникновением ферромагнетизма, валентная или примесная. За прошедшие десять лет ответа на этот вопрос так и не найдено. В нашей работе мы приводим аргументы в пользу того, что ферромагнетизм в GaAs:Mn может быть результатом прямого обмена между дырками локализованными на акцепторах марганца.

Для того чтобы обосновать нашу гипотезу, необходимо решить две независимые задачи. Во-первых, необходимо показать, что ферромагнитный переход возможен в системе случайно разбросанных примесных атомов обменно взаимодействующих друг с другом. Такая система су-

существенно отличается от традиционно рассматриваемых моделей на регулярных решётках. Во-вторых, требуется продемонстрировать, возможность существования ферромагнитного обмена между двумя примесными атомами. В рамках обычной водородоподобной модели примесного состояния такое невозможно, так как основным состоянием молекулы водорода является синглет, и взаимодействие между примесными атомами — антиферромагнитное.

Первая задача исследовалась нами в рамках гамильтониана Изинга вначале численно, методами Метрополиса, Ландау–Вэнга, а также методом прямого сэмплирования [4, 5]. После анализа результатов численного моделирования удалось также получить и аналитическое решение задачи. Было показано, что в системе обменно взаимодействующих между собой случайно расположенных спинов, возможен ферромагнитный фазовый переход, при этом температура перехода равна средней энергии взаимодействия одного спина со всеми остальными спинами. Представляется существенным результатом и то, что наша теоретическая модель предсказывает линейную зависимость температуры перехода от концентрации примесей. Это соответствует экспериментальным результатам для GaAs:Mn [6], тогда как в модели Дитла зависимость критической температуры от концентрации сублинейна [2].

Задача о знаке обменного взаимодействия между двумя акцепторами марганца до настоящего времени не рассматривалась в силу её сложности. Связано эта сложность главным образом со комплексной структурой такого акцептора состоящего из обменно взаимодействующих иона со спином $5/2$ и дырки со спином $3/2$ [7]. Однако, можно считать хорошо установленным тот факт, что взаимодействие двух локализованных дырок является ферромагнитным. В работах [8, 9] посредством аналитических расчётов было показано, что в кристаллах с симметрией алмаза дырки со спином $3/2$, локализованные на одном центре, взаимодействуют ферромагнитно, при этом основным состоянием является пятикратно вырожденное состояние с полным моментом 2. Задача о взаимодействии двух дырок локализованных на двух акцепторах имеет пониженную симметрию, так как существует выделенное направление — ось соединяющая акцепторы. В работе [10] было показано, что в этом случае состояние с полным моментом 2 расщепится, причём основным будет состояние с проекцией момента на ось соединяющую акцепторы равной нулю. Именно этим объясняется то, что ферромагнетизм в легированных акцепторами полупроводниках отсутствует, несмотря на ферромаг-

нитное взаимодействие. Эти теоретические результаты были весьма подробно проверены экспериментально, главным образом посредством исследования спектральных и поляризационных свойств экситонных комплексов и примесных центров имеющих в своём составе две дырки [11, 12]. Таким образом, можно считать хорошо установленным, что обмен дырок имеет ферромагнитный знак, и главной нерешённой к настоящему времени задачей остаётся исследование тонкой структуры комплекса из двух акцепторов марганца.

Результаты работы были получены с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого. Работа выполнена при поддержке гранта РФФ №23-22-00333.

Список литературы

- [1] Ohno H., Shen N. A., Matsukura A. F., Oiwa A., Endo A., Katsumoto S., & Iye Y. (Ga, Mn) As: a new diluted magnetic semiconductor based on GaAs. *Applied Physics Letters*, 1996, 69(3), 363–365.
- [2] Dietl T., Ohno O. H., Matsukura A. F., Cibert J. and Ferrand E. D., Zener model description of ferromagnetism in zinc-blende magnetic semiconductors. *Science*, 2000, 287(5455), pp.1019–1022.
- [3] Samarth Nitin. Battle of the bands. *Nature materials* 11.5 (2012): 360–361.
- [4] Богословский Н. А., Петров П. В., Аверкиев Н. С., *ФТП*, **61**(11), 2036 (2019).
- [5] Богословский Н. А., Петров Н. А., Аверкиев Н. С., *Письма в ЖЭТФ*, **114**(6), 383 (2021).
- [6] Yuan Y., Xu C., Hübner R., Jakiela R., Böttger R., Helm M., Sawicki M., Dietl T. and Zhou S., Interplay between localization and magnetism in (Ga, Mn) As and (In, Mn) As. *Physical Review Materials*, 2017, 1(5), p.054401.
- [7] Аверкиев Н. С., Гуткин А. А. **60**(12), 2275 (2018).
- [8] Аверкиев Н. С., Ясевич И. Н., Ребане Ю. Т. *ФТП*, **19**, 96–101 (1985).
- [9] Аверкиев Н. С., Родина А. В. *ФТТ*, **35**, 1051–1065 (1993).
- [10] Аверкиев Н. С., Ильинский С. Ю. *ФТТ* **36**, 503 (1994).
- [11] Petrov P. V., Kokurin I. A., Klimko G. V., Ivanov S. V., Ivánov Yu L., Koenraad P. M., Silov A. Yu., and Averkiev N. S. Optical spectroscopy of single beryllium acceptors in GaAs/AlGaAs quantum well. *Phys. Rev. B* **94**(11), 115307 (2016).
- [12] Петров П. В., Кокурин И. А., Иванов Ю. Л., Цырлин Г. Э., Седов В. Е., Аверкиев Н. С., *ФТТ*, **60**(2), 333 (2018).

Структурные изменения в мультиферроиках $\text{Vi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$ при высоком давлении

Д. А. Саламатин^{1,2}, С. Е. Кичанов², И. Е. Костылева¹, Л. Ф. Куликова¹,
А. В. Боков¹, И. П. Зибров¹, Д. П. Козленко², А. В. Цвященко¹

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

²*Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия*

В мультиферроике ViFeO_3 антиферромагнитное и ферроэлектрическое упорядочения сосуществуют при комнатной температуре. Благодаря нецентросимметричной кристаллической структуре данного соединения предполагается, что в нём могут наблюдаться линейный магнитоэлектрический эффект и слабый ферромагнетизм. Однако в действительности эти свойства не проявляются, что связано со спин-модулированной магнитной циклоидой, образуемой магнитными моментами Fe. Эта магнитная циклоида может быть подавлена путём замещения Vi на редкоземельный ион. Предполагается, что благодаря своему малому ионному радиусу и большой величине магнитокристаллической анизотропии Tb может приводить к эффективному подавлению магнитной циклоиды.

Нами были синтезированы соединения состава $\text{Vi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0.05, 0.1, 0.3$) с помощью обычного твердофазного синтеза и последующего термобарического отжига при давлении 6 ГПа. Показано, что полученные соединения обладают улучшенными свойствами. В частности, на 1 ат. % Tb был увеличен предел растворимости в ромбической структуре $R3c$ соединений $\text{Vi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$. Рентгеновские и нейтронные дифракционные измерения не смогли обнаружить примесей в соединениях с $x = 0.1, 0.3$. На основании измерений нейтронных дифрактограмм при высоком давлении и комнатной температуре, проведенных на ИБР-2 в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ (г. Дубна), было определено, что структурный фазовый переход в соединениях с $x = 0.05$ и 0.1 происходит примерно при одинаковом объеме элементарной ячейки, около 368 \AA^3 (см. рис. 1). Отсюда может быть определен максимальный предел растворимости Tb, который составляет около 11 ат. %. Для достижения этого предела в объемных образцах использование термобарического отжига может являться необходимым. Предполагается, что однофазное соединение с максимальной концентрацией Tb будет иметь наилучшие ферроэлек-

трические и магнитные свойства. $\text{Bi}_{0.7}\text{Tb}_{0.3}\text{FeO}_3$ кристаллизуется в орторомбической структуре типа GdFeO_3 , которая является стабильной до давлений 3.2 ГПа.

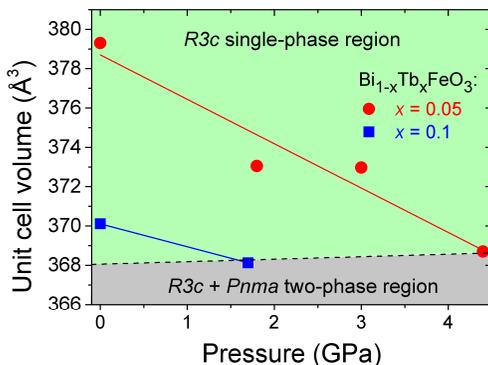


Рис. 1. Фазовая диаграмма для соединений $\text{Bi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0.05, 0.1$) из результатов измерений нейтронных дифрактограмм при высоких давлениях.

Исследование было выполнено за счет гранта Российского научно-го фонда № 22-72-00014, <https://rscf.ru/project/22-72-00014/>.

ЯМР-исследования высокополевых магнитных фаз в треугольном $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$

Ю. А. Сахратов¹, А. Р. Reyes², Л. Е. Свистов³

¹Казанский государственный энергетический университет, г. Казань, Россия

²National High Magnetic Field Laboratory, Tallahassee, Florida 32310, USA

³Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, г. Москва, Россия

Методом ^{87}Rb ЯМР исследована магнитная H-T фазовая диаграмма квазидвумерного антиферромагнетика $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ ($S = 5/2$) с правильной треугольной решеткой. Результаты нейтронографических экспериментов описаны в [1]. Комбинация этих двух экспериментальных методов позволила определить упорядоченные компоненты магнитных мо-

ментов на ионах Fe^{3+} в различных высокополевых фазах — Y, UUD, V и веерных структурах, реализующихся в $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ при приложении магнитного поля в легкой плоскости кристалла (\mathbf{H} перпендикулярно C_3). Установлено также, что переход из V магнитной фазы в веерную первого рода, тогда как переход из веерной в поляризованную парамагнитную фазу непрерывен. Анализ спектров ЯМР показывает, что сильнополевая веерная фаза $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ может быть успешно описана периодическими соизмеримыми колебаниями магнитных моментов вокруг направления поля в каждом слое Fe^{3+} в сочетании с несоизмеримой модуляцией магнитной структуры перпендикулярно к слоям.

Во второй части доклада обсуждаются магнитные фазы $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ для случая, когда статическое поле ориентировано перпендикулярно треугольной кристаллической структуре ($\mathbf{H} \parallel \text{C}^3$), которая совпадает с трудной осью планарной магнитной структуры, реализующейся в нулевом поле. В рамках квазиклассической теории при такой ориентации поля можно ожидать зонтичную магнитную структуру во всем диапазоне полей, вплоть до перехода в поляризованную парамагнитную фазу. Однако, недавно было обнаружено, что процесс намагничивания при такой ориентации поля происходит в рамках двух магнитных структур [2, 3]. В слабых полях реализуется зонтичная фаза, в то время как вблизи поля насыщения в $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ реализуется неизвестная магнитная структура. Наши результаты экспериментов ЯМР для $\mathbf{H} \parallel \text{C}^3$ подтверждают переход в новую фазу в сильных полях. При переходе в эту фазу наблюдаются лямбда аномалии на полевой и температурной зависимостях обратного времени спин-решеточной релаксации ^{87}Rb , а также скачкообразное увеличение магнитной восприимчивости. Сравнение экспериментальных спектров ЯМР с модельными позволяет утверждать, что в области сильных полей V-фаза, рассматриваемая авторами [2,3] как возможная, не реализуется. Полученные результаты ЯМР исследования в высоких полях могут быть объяснены в рамках модели зонтичной структуры в каждой треугольной плоскости и отсутствии порядка между слоями.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 22-12-00259.

Список литературы

- [1] Sakhratov Yu. A., Prokhnenko O., Shapiro A. Ya., Zhou H.D., Svistov L. E., Reyes A. P., and Petrenko O. A., *Physical Review* **B105**(1), 014431 (2022).

- [2] Hiroyuki Mitamura, Ryuta Watanuki, Norimichi Onozaki, Yuta Amou, Yohei Kono, Shunichiro Kittaka, Yasuyuki Shimura, Isao Yamamoto, Kazuya Suzuki, Toshiro Sakakibara, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **400**, 70 (2016).
- [3] Zelenskiy A., Quilliam J. A., Shapiro A. Ya., and Quirion G., *Phys. Rev. B* **103**, 224422 (2021).

Влияние высокого давления на магнитные и электронные свойства двойного манганита $\text{NdBaMn}_2\text{O}_6$.

В. А. Сидоров¹, Е. В. Стерхов², С. Г. Титова²

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

²*Институт металлургии Уральского отделения РАН, Екатеринбург*

Двойные манганиты типа $\text{REBaMn}_2\text{O}_6$ (RE — ион редкоземельного металла, РЗМ) демонстрируют большое разнообразие свойств, связанное с сильным взаимодействием между зарядовыми, спиновыми и орбитальными степенями свободы, которое зависит от атомного номера РЗМ. Для легких РЗМ (La, Pr) вблизи комнатной температуры возникает ферромагнитное упорядочение. Для более тяжелых РЗМ (начиная с Sm) выше комнатной температуры возникает фаза изолятора с зарядовым/орбитальным порядком, которая при более низкой температуре переходит в состояние антиферромагнитного изолятора. В пограничном между этими группами соединений $\text{NdBaMn}_2\text{O}_6$ выше комнатной температуры наблюдаются сильные ферромагнитные флуктуации, однако переход в ферромагнитную фазу не происходит, а вблизи комнатной температуры вместо этого происходит переход в зарядово-упорядоченную фазу изолятора, которая при дальнейшем охлаждении ниже 230 К переходит в антиферромагнитную фазу А-типа [1]. Переход в зарядово-упорядоченную фазу также сопровождается изменениями кристаллической структуры [1, 2]. Недавно нами было изучено влияние давления на термодинамические, магнитные, электронные транспортные свойства, магнитную и кристаллическую структуру $\text{PrBaMn}_2\text{O}_6$ [3]. Поэтому представляет интерес исследование влияния давления и на свойства $\text{NdBaMn}_2\text{O}_6$.

Изучение электрических, магнитных и термодинамических свойств поликристаллических образцов этого соединения при высоком гидроста-

тическом давлении до 5.5 ГПа и при температурах 120–300 К было проведено с помощью автономной камеры фиксированного давления типа «тороид» [4]. Измерения теплоёмкости $\text{NdBaMn}_2\text{O}_6$ методом модуляционной калориметрии позволили построить P – T диаграмму переходов. Температура перехода в зарядово-упорядоченное состояние $T_{\text{CO}} = 281$ К уменьшается с ростом давления со скоростью -33 К/ГПа. Этот переход идёт с изменением кристаллической структуры [2] и имеет гистерезис по температуре $\Delta T \sim 10$ – 12 К. Термодинамических признаков этого перехода выше давления 1.3 ГПа не наблюдается. Однако измерения электрического сопротивления показывают, что линия $T_{\text{CO}}(P)$ на P – T диаграмме продолжается с тем же наклоном и гистерезисом по температуре и при более высоком давлении. Однако при этом рост сопротивления при переходе в зарядово-упорядоченное состояние сильно уменьшается. Если при атмосферном давлении рост сопротивления при T_{CO} составляет $\sim 10^2$, то при давлении 2.7 ГПа этот рост равен лишь 70 % и переход сильно размывается по температуре. Вероятно, и структурные изменения при T_{CO} с ростом давления значительно уменьшаются, что и приводит к практическому исчезновению аномалий теплоёмкости. Температура перехода в АФМ состояние $T_{\text{N}} = 230$ К растёт под давлением со скоростью $+21.4$ К/ГПа и около 0.8 ГПа линии $T_{\text{N}}(P)$ и $T_{\text{CO}}(P)$ на P – T диаграмме пересекаются. Выше этого давления признаков T_{N} при измерениях теплоёмкости не наблюдается. При давлениях от 0.37 ГПа до 0.8 ГПа измерения теплоёмкости показывают помимо T_{N} существование ещё одного магнитного перехода при температуре $T_{\text{C}} = 283$ К. В этом диапазоне давлений $T_{\text{N}} < T_{\text{CO}} < T_{\text{C}}$. Температура T_{C} от давления практически не зависит вплоть до 5.5 ГПа. Измерения магнитной восприимчивости показали, что переход при температуре T_{C} является переходом в ферромагнитное состояние. Видимо, сильные ферромагнитные флуктуации, которые наблюдаются в $\text{NdBaMn}_2\text{O}_6$ при атмосферном давлении, формируются в реальный магнитный переход, как только температура T_{CO} снижается под давлением. Для определения магнитной структуры ниже T_{C} необходимы дальнейшие исследования с помощью дифракции нейтронов.

Список литературы

- [1] Nakajima T., Kageyama H., Yasizawa H., Ohoyama K., Ueda Y., *J. Phys. Soc. Jpn.* **72**, 3237 (2003).
- [2] Yamada S., Sagayama H., Higuchi K., Sasaki T., Sugimoto K., Arima T., *Phys. Rev. B* **95**, 035101 (2017).

- [3] Sidorov V. A., Sterkhov E. V., Vedmid L. B., Kichanov S. E., Mikhalev K. N., Germov A. Yu., Titova S. G., *Physica B: Condens. Matter* **651**, 414577 (2023).
[4] Petrova A.E., Sidorov V. A., Stishov S. M., *Physica B: Condens. Matter* **359–361**, 1463 (2005).

Низкочастотная спиновая динамика квазидвумерного магнетика $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$

Г. А. Солдатов, А. И. Смирнов

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

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 упорядочение спин-спиновых корреляций.

В последних работах [3-5] 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 ферро-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 обходами. 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 [3–5]. Частотно-полевые зави-

симости 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.

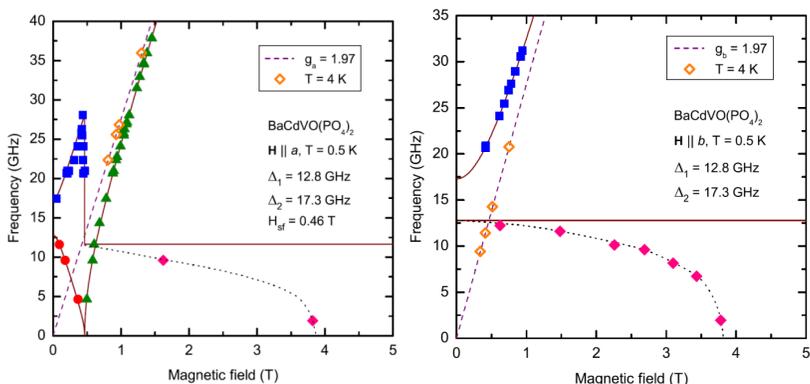


Рис. 1. Частотно-полевые зависимости спектров ЭСР в полях $\mathbf{H} \parallel a, b$

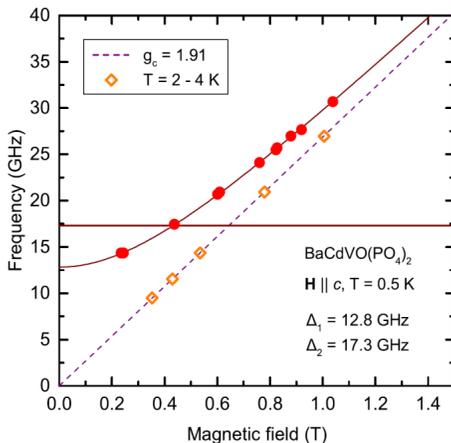


Рис. 2. Частотно-полевая зависимость спектра ЭСР в поле $\mathbf{H} \parallel c$

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 спиновых нематиках [6] 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 $H_{\text{c1}} = 4$ 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 для падающей ветки спектра. Отсутствие спин-нематической фазы может быть обусловлено наличием сильной анизотропии, предотвращающей либо существенно подавляющей ее формирование. Альтернативная гипотеза об отсутствии спинового нематика 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 [3–5, 7, 8], 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 № 22-12-00259. Благодарим К. Ю. Поварова и А. Желудева за предоставление образцов и обсуждения.

Список литературы

- [1] Zhitomirsky M. E., Tsunetsugu H., *Europhys. Lett.* **92**, 37001 (2010).
- [2] Jiang Sh., Romhányi J., White S. R., Zhitomirsky M. E., Chernyshev A. L., *Phys. Rev. Lett.* **130**, 116701 (2023).
- [3] Povarov K. Yu., Bhartiya V. K., Yan Z., Zheludev A., *Phys. Rev. B* **99**, 024413 (2019).
- [4] Bhartiya V. K., Povarov K. Yu., Blosser D., Bettler S., Yan Z., Gvasaliya S., Raymond S., Ressouche E., Beauvois K., Xu J., Yokaichiya F., Zheludev A., *Phys. Rev. Research* **1**, 033078 (2019).
- [5] Bhartiya V. K., Hayashida S., Povarov K. Yu., Yan Z., Qiu Y., Raymond S., Zheludev A., *Phys. Rev. B* **103**, 144402 (2021).
- [6] Andreev A. F., Grishchuk I. A., *Sov. Phys. JETP* **60**, 267 (1984).
- [7] Smerald A., Ueda H. T., and Shannon N., *Phys. Rev. B* **91**, 174402 (2015).
- [8] Smerald A., arXiv:2003.12747.

Китаевские ли кобальтиты?

С. В. Стрельцов

*Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН,
г. Екатеринбург, Россия
E-mail: streltsov@imp.uran.ru*

В последнее десятилетие одной из наиболее «горячих» областей в физике конденсированного состояния стало изучение китаевских магнитных систем, в которых обменное взаимодействие оказывается сильно анизотропным и направление анизотропии является различным для разных связей в решетке [1]. Наличие анизотропии обусловлено особой геометрией решетки и сильным спин-орбитальным взаимодействием. Первоначально основной интерес был сконцентрирован на оксидах $4d$ – $5d$ переходных металлов, но позднее в работах [2,3] было показано, что и в некоторых соединениях $3d$ элементов, например, кобальтатах (на основе Co^{2+}), возможны подобные эффекты.

В данном докладе будет сделан обзор текущей ситуации в данной области, а также представлены результаты теоретических и экспериментальных исследований таких соединений как $\text{BaCo}_2(\text{AsO}_4)_2$ [4], $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$ [5], $\text{SrCoGe}_2\text{O}_6$ [6] и некоторых других систем.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект РНФ 23-42-00069.

Список литературы

- [1] Streltsov S. V., Khomskii S. V., *Physics-Uspekhi* **60**, 1121 (2017).
- [2] Sano R., Kato Y., and Motome Y., *Phys. Rev. B* **97**, 014408 (2018).
- [3] Liu H. and Khaliullin G., *Phys. Rev. B* **97**, 014407 (2018).
- [4] Maksimov P. A., Ushakov A. V., Pchelkina Z. V., Li Y., Winter S. M., and Streltsov S. V., *Phys. Rev. B* **106**, 165131 (2022).
- [5] Vavilova E., Vasilchikova T., Vasiliev A., Mikhailova D., Nalbandyan V., Zvereva E., and Streltsov S. V., *Phys. Rev. B* **107**, 054411 (2023).
- [6] Podlesnyak A., Ushakov A. V., Gubkin A., Maksimov P. A., Redhammer G., and Streltsov S. V., unpublished.

Влияние давления на электронную структуру и магнитные свойства MnS и MnTe

Е. Д. Чернов^{1,*}, А. В. Лукоянов^{1,2}

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

²*Уральский федеральный университет им. первого президента России*

Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

**E-mail: chernov_ed@imp.uran.ru*

Халькогениды марганца вызывают интерес исследователей из-за разнообразия оптических, магнитных и транспортных свойств, которые могут быть применены в устройствах спинтроники [1]. Известно, что халькогениды марганца MnX, где X = S, Se, Te, являются антиферромагнитными диэлектриками. Для MnS и MnSe стабильной фазой является кубическая фаза типа NaCl, в свою очередь для MnTe эта фаза является метастабильной. Недавние эксперименты показали, что в условиях высокого давления метастабильные фазы MnS вюрцита и цинковой обманки переходят в фазу типа NaCl. В свою очередь дальнейшее сжатие образцов приводит к тому, что при давлении 24.3 ГПа происходит фазовый переход в орторомбическую B31 структуру с коллапсом объема ячейки в 22 %, и при давлении 33.6 ГПа эта структура становится устойчивой [2]. Экспериментальные исследования связывают этот фазовый переход со спиновым кроссовером ионов Mn²⁺ из высокоспинового в низкоспиновое состояние [3]. В данной работе теоретические исследования проводились при учете антиферромагнитного упорядочения магнитных моментов ионов марганца. При расчете электронной структуры использовался программный пакет Quantum ESPRESSO [4] и метод DFT+U [5]. Расчеты проводились для кубической фазы MnS и гексагональной фазы MnTe при нормальных условиях и в условиях всестороннего изотропного сжатия элементарной ячейки. При нормальных условиях исследуемые соединения являются диэлектриками с шириной щели 1.8–2.2 эВ [3]. Величина магнитного момента ионов марганца в MnS при нормальных условиях составила 4.59 мВ, а у MnTe — 4.74 мВ. При дальнейшем уменьшении объема ячейки MnS и MnTe испытывают фазовый переход диэлектрик-металл и резкое уменьшение величины магнитного момента ионов марганца. При сжатии ячейки до 50 % относительно нормальных

условий величина магнитного момента марганца у MnS (MnTe) составила 2.86 (2.66) μ_B . Таким образом, было исследовано влияние давления на электронную и магнитную структуры халькогениды марганца MnS и MnTe. Было выявлено, что при уменьшении объема ячейки сульфид и теллурид марганца испытывают фазовые переходы диэлектрик-металл, а также переход из высокоспинового состояния в низкоспиновое.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ, проект 20-02-00234, тема «Электрон».

Список литературы

- [1] Masrour R., Hlil E. K., Namedoun M., et al., *J. Magn. Magn. Mater.* 361, 197 (2014).
- [2] Wang Y., et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* 55, (2016).
- [3] Sato H., et al., *Phys. Rev. B*, 56, 7222 (1997).
- [4] Giannozzi P., et al., *J. Phys.: Condens. Matter.* 21, 395502, (2009).
- [5] Anisimov V. I., Gunnarsson O., *Phys. Rev. B.* 43, 7570, (1991).

Расчёт волнового числа магнитных геликоид в Cu_2OSeO_3 из обменных констант связей: сравнение численного моделирования и аналитических вычислений

В. А. Чижиков, В. Е. Дмитриенко

*Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

В кубических хиральных ферро- и ферримагнетиках типа MnSi и Cu_2OSeO_3 наблюдают несколько видов магнитных упорядочений, включая скирмионную фазу А с двойной закруткой поля намагниченности [1–4]. Важной характеристикой закрученных магнитных структур является степень закрутки, выражаемая волновым числом магнитных геликоид $k = \mathcal{D} / \mathcal{J}$, где константа \mathcal{J} соответствует изотропному обменному взаимодействию спинов, а \mathcal{D} — антисимметричному обменному взаимодействию Дзялошинского–Мории (ДМ), имеющему спин-орбитальную при-

роду. Параметры \mathcal{J} и \mathcal{D} континуального приближения выражаются нетривиальным образом через константы J_{ij} и векторы ДМ \mathbf{D}_{ij} отдельных связей между магнитными атомами, при этом обычно в \mathcal{J} учитывают вклады нулевого, а в \mathcal{D} — 1-го порядка по спин-орбитальному взаимодействию (СОВ) [5, 6]. Ранее мы показали, что из-за приближенно выполняющегося правила Кеффера [7], при вычислении \mathcal{D} необходимо также учитывать вклады 2-го порядка по СОВ [8]. Например, для кристалла Cu_2OSeO_3 это приводит к уменьшению рассчитанного значения волнового числа k с 0.189 до 0.117. Эти вычисления проводились с использованием констант связей J_{ij} и \mathbf{D}_{ij} , определённых в [9] методами DFT. Тем не менее, теоретически рассчитанное значение волнового числа всё ещё далеко от экспериментального значения $k = 0.088$.

Для того чтобы понять причину этого расхождения, мы провели численное моделирование спиновой геликоиды в кристалле Cu_2OSeO_3 с теми же константами J_{ij} и \mathbf{D}_{ij} из [9]. При этом минимизировалась энергия геликоид с различным шагом, выстроенных вдоль кристаллографических направлений 100, 110 и 111 кубического кристалла. На рис. 1 результаты моделирования сравниваются с аналитическими результатами, описываемыми параболой

$$\mathcal{E}(k) = \frac{1}{2} \mathcal{J} k^2 - \mathcal{D}_{1,2} k + C_{2,3}, \quad (1)$$

где $\mathcal{D}_{1,2}$ — параметр ДМ с учтёнными вкладами 1-го и 2-го порядка по СОВ, $C_{2,3}$ — сумма постоянных вкладов 2-го и 3-го порядков по СОВ. Энергия отсчитывается от энергии изотропного обмена полностью коллинеарной системы спинов (рис. 1, *b*). Минимум (1) отвечает волновому числу $k = \mathcal{D}_{1,2} / \mathcal{J} = 0.117$. Результаты моделирования описываются тремя параболой: своей для каждого кристаллографического направления. Это связано с кубической анизотропией кристалла, проявляющейся в энергии начиная с вкладов 4-го порядка по СОВ. Весь набор из трёх парабол хорошо аппроксимируется выражением

$$\mathcal{E}(k) = \alpha_2 k^2 + \alpha_1 k + \alpha_0 + (\beta_2 k^2 + \beta_1 k + \beta_0)(n_x^4 + n_y^4 + n_z^4) \quad (2)$$

с шестью независимыми параметрами $\alpha_{0,1,2}$ и $\beta_{0,1,2}$. Здесь \mathbf{n} — единичный вектор, направленный вдоль оси геликоиды. Вводящий анизотро-

пию кубический инвариант ($n_x^4 + n_y^4 + n_z^4$) равен 1, $\frac{1}{2}$ и $\frac{1}{3}$ для направлений 100, 110 и 111 соответственно. Минимумы парабол соответствуют волновому числу $k = 0.1135 \pm 0.0009$, что всего на 3–4% меньше аналитического значения. Это означает, что основная причина расхождения с экспериментом — недостаточная точность вычислений *ab initio* обменных констант связей. Тем более становится интересным факт, что моделирование с этими параметрами правильно предсказывает знак анизотропии магнитной структуры кристалла Cu_2OSeO_3 . Действительно, как известно из эксперимента, в геликоидальной фазе в отсутствие поля магнитные спирали в Cu_2OSeO_3 выстраиваются вдоль кристаллографических направлений 100 [4, 10], как и предсказывает численное моделирование магнитной энергии на рис. 1.

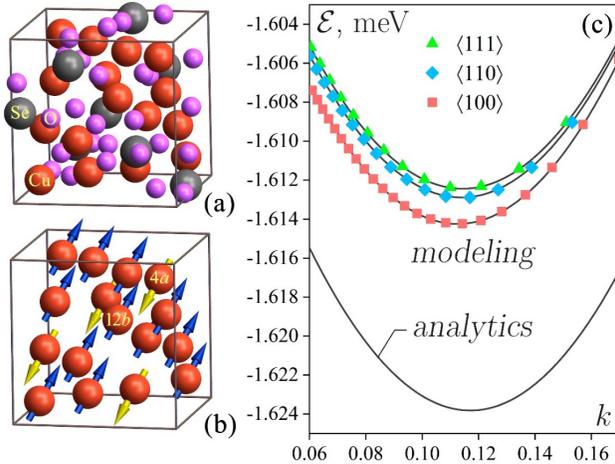


Рис. 1. Элементарная ячейка ферримагнетика Cu_2OSeO_3 (a), её магнитная подсистема из атомов меди с разнонаправленными спинами (b), зависимости $\mathcal{E}(k)$ средней магнитной энергии элементарной ячейки кристалла от волнового числа геликоида: аналитические расчёты и численное моделирование для различных направлений осей магнитных геликоид (c)

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] Чижиков В. А., Дмитриенко В. Е., Сб. тез. «СКЭС-2022», 218. М.: ФИАН, 2022.
- [9] Yang J. H., Li Z. L., Lu X. Z. et al., *Phys. Rev. Lett.* **109**, 107203 (2012).
- [10] Seki S., Kim J.-H., Inosov D. S. et al., *Phys. Rev. B* **85**, 220406 (2012).

СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ. СВЕРХТЕКУЧЕСТЬ

Эффект сверхтекучего увлечения между экситон-поляритонами и сверхпроводящим электронным газом

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

¹Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

²Институт спектроскопии РАН

Эффект сверхтекучего увлечения (или эффект Андреева–Башкина) между двумя веществами в сверхтекучем или сверхпроводящем состоянии проявляется в бездиссипативном увлечении сверхтекучей компоненты одного газа или жидкости сверхтекучим движением второго вещества. Он был предсказан для смеси сверхтекучих ^3He и ^4He [1], а также для ультрахолодных атомных газов [2]. При наличии сверхтекучего увлечения массовые плотности сверхтекучих токов $\mathbf{g}^{a,b}$ каждой компоненты связаны следующим выражением [1] со скоростями движения сверхтекучих конденсатов $\mathbf{v}^a, \mathbf{v}^b$:

$$\begin{cases} \mathbf{g}^a = \rho_s^a \mathbf{v}^a + \rho_{\text{dr}} \mathbf{v}^b, \\ \mathbf{g}^b = \rho_s^b \mathbf{v}^b + \rho_{\text{dr}} \mathbf{v}^a. \end{cases}$$

Здесь ρ_s^a, ρ_s^b — сверхтекучие массовые плотности каждой компоненты a и b , ρ_{dr} — плотность сверхтекучего дрэгга. Последняя величина характеризует масштаб эффекта сверхтекучего увлечения.

В представленной нами работе была рассчитана плотность сверхтекучего дрэгга ρ_{dr} в электрон-поляритонной системе, показанной на рис. 1. Такие системы представляют особый интерес в контексте недавно предсказанного для подобных систем экситон-поляритонного механизма сверхпроводимости [3]. При расчетах использовалась теория линейного отклика Кубо, связывающая плотность дрэгга с корреляционной функции

ей токов, которая была найдена с помощью диаграммной техники. Параметры расчетов соответствовали реалистичным системам с электронным и экситонными слоями на основе полупроводниковых квантовых ям и атомарно тонких дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ). В работе была изучена зависимость плотности сверхтекучего дръга от температуры и расстояния между слоями, а также роль экранирования электрон-поляритонного взаимодействия в приближении Томаса-Ферми и приближении хаотических фаз. Был также рассмотрен эффект сверхтекучего увлечения вблизи фазового перехода в состоянии суперсолида, а также рассчитана плотность дръга между электронами в сверхпроводнике и бозе-конденсированными экситонами [4].

Было показано [5], что плотность сверхтекучего дръга может достигать десятых долей полной массовой плотности поляритонного конденсата. Она линейно падает с увеличением температуры вблизи температуры сверхпроводящего перехода и стремится к ненулевому значению при температурах, много меньших температуры перехода (рис. 2). Расчеты показали, что плотность дръга падает с увеличением расстояния L между электронами и экситонами как степенная функция L^{-x} , где $x = 7-8$ для систем с пространственно прямыми и $x = 3-4$ для систем с непрямыми экситонами (рис. 3). В работе показано, что плотность дръга, вычисленная с экранированием в приближении Томаса-Ферми, оказывается недооценена, а при расчете без учета экранирования — переоценена, так что наиболее адекватное описание эффекта достигается с использованием экранирования в приближении хаотических фаз. Показано, что при достаточно больших плотностях поляритонного конденсата возможен переход в состояние суперсолида, и при приближении системы к фазовому переходу плотность сверхтекучего дръга значительно возрастает. Был также рассмотрен эффект сверхтекучего увлечения между сверхпро-

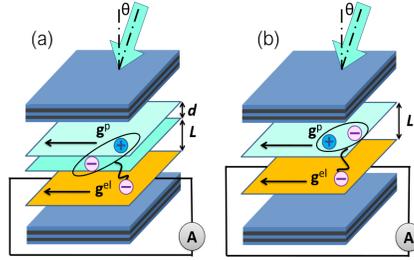


Рис. 1. Схематическое изображение системы. Рассмотрены две реализации: с непрямыми (a) и прямыми (b) экситон-поляритонами. Двумерный сверхпроводник и экситонные слои помещены в оптическую микрополость

водящими электронами и бозе-конденсатом экситонов в отсутствие микрополости. Согласно расчетам, в такой реализации плотность сверхтекучего дрэга по порядку величины совпадает с ρ_{dr} , вычисленной для поляритонов, однако в этом случае индуцированные токи ожидаются значительно более слабыми ввиду малой скорости экситонов.

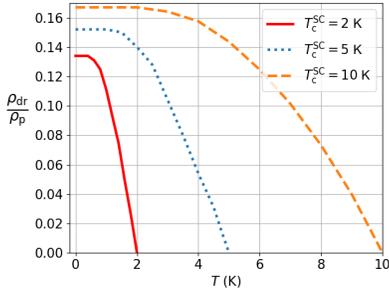


Рис. 2. Температурная зависимость плотности сверхтекучего дрэга между непрямыми поляритонами на основе GaAs/AlGaAs и электронным газом с температурами сверхпроводящего перехода $T_c^{SC} = 2$ К, 5 К и 10 К

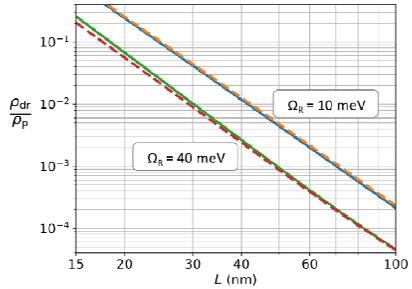


Рис. 3. Плотность сверхтекучего дрэга при $T = 0$ как функция межслойного расстояния L между непрямыми поляритонами на основе бислоя ДПМ и сверхпроводящим электронным газом на основе квантовых ям (пунктирные линии) или ДПМ (сплошные линии) при разных частотах Раби Ω_R

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 21-52-12038) и Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ. Работа по аналитическому выводу выражений для плотности сверхтекучего дрэга была выполнена в рамках проекта Госзадания FFUU-2021-0003.

Список литературы

- [1] Andreev A. and Bashkin E., Three-velocity hydrodynamics of superfluid solutions, *Soviet Physics JETP* **42**, 164 (1975).
- [2] 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).
- [3] 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, *Physical Review B* **93**, 054510 (2016).
- [4] Lozovik Yu. E., New effects in and the control of the exciton system in quasi-two-dimensional structures, *Physics-Uspeski* **61**, 1094 (2018).
- [5] Aminov A. F., Sokolik A.A., and Lozovik Yu. E., Superfluid drag between excitonic polaritons and superconducting electron gas, *Quantum* **6**, 787 (2022).

Исследование неоднородной сверхпроводимости с помощью транспортных измерений в FeSe и других соединениях

П. Д. Григорьев^{1,2}, В. Д. Кочев², А. А. Синченко³,
А. В. Фролов³, А. П. Орлов³

¹Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН,
г. Черноголовка, Россия

²НИТУ «МИСИС», Москва, Россия

³Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН,
г. Москва, Россия

E-mail: grigorev@itp.ac.ru

Во многих соединениях сверхпроводимость зарождается неоднородно выше T_c в виде изолированных островков, например, из-за легирования или конкуренции различных электронных неустойчивостей. При этом очень часто относительное падение электрического сопротивления $\Delta\rho_i/\rho_i$ выше температуры сверхпроводящего перехода T_c максимально вдоль оси наименьшей проводимости, например, перпендикулярно проводящим слоям, что долго оставалось загадкой. В стандартной теории флуктуаций [1] $\Delta\rho_i/\rho_i$ почти изотропно, поскольку области флуктуаций имеют размер порядка длины когерентности и ту же анизотропию, как и проводимость в степени 1/2. Легко объяснить [1] обратную ситуацию, когда сверхпроводимость возникает в двумерных слоях и распространяется поперек слоев из-за эффекта Джозефсона, который легко подавляется температурой; в этом случае падение сопротивления (и даже T_c) максимальны вдоль проводящих слоев, что тоже наблюдается в слоистых сверхпроводниках. Наблюдаемое анизотропное падение сопротивления выше T_c , с максимальным эффектом вдоль оси наименьшей проводимо-

сти, мы объясняем и описываем в Максвелловском приближении эффективной среды [2], обобщенном нами на анизотропные проводники [3–6]. Это позволяет определять на основе данных о температурной зависимости анизотропии сопротивления некоторые параметры неоднородности сверхпроводимости, например, объемную долю сверхпроводящей фазы и усредненное отношение размеров сверхпроводящих островков вдоль главных осей кристалла. Если также имеются данные о диамагнитном отклике в таком неоднородном сверхпроводящем состоянии выше T_c , то вместе с транспортными измерениями это позволяет оценить размер сверхпроводящих островков.

Еще больше информации о неоднородном сверхпроводящем состоянии дает анизотропия перехода в нулевое сопротивление, наблюдаемая нами в FeSe [7, 8], а также во многих органических сверхпроводниках [9–11]. Например, мы наблюдаем [7, 8] и объясняем [8], что температура сверхпроводящего перехода, измеренная по сопротивлению вдоль оси z наименьшей проводимости в металлическом состоянии в тонких образцах FeSe значительно (с 8 до 11 К) повышается при уменьшении их толщины с 300 до 50 нм (см. рис. 1). Эта анизотропия T_c естественно возникает в пространственно неоднородных сверхпроводниках в образцах конечных размеров, лишь в несколько раз больших характерных размеров

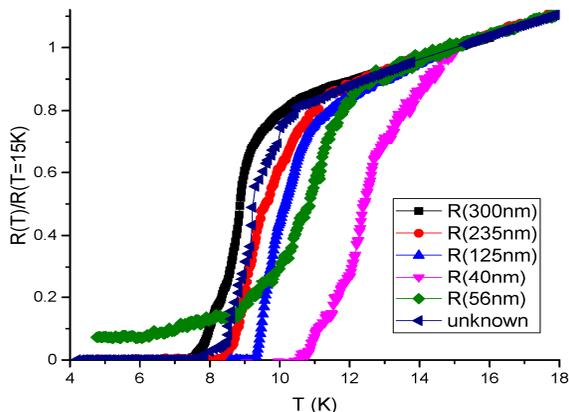


Рис. 1. Температурная зависимость сопротивления вдоль оси z в мезоструктурах FeSe разной толщины от 300 до 40 нм. Температура сверхпроводящего перехода повышается с 8 К до \sim 11 К при уменьшении толщины образца (взят из статьи [8])

сверхпроводящих островков [8, 12]. Сравнение наших численных расчетов [8, 12] порога перколяции в образцах конечных размеров, как для FeSe [8], так и для органических металлов [12], позволяет не только объяснить экспериментальные данные по анизотропии T_c , но и дает более точную информацию о характерных размерах сверхпроводящих островков вдоль главных осей кристалла даже вдали от поверхности, что сложно определить другими экспериментальными методами. В FeSe эти размеры вдоль проводящей плоскости примерно совпадают с шириной нематических доменов. Наши модель и расчеты применимы ко многим неоднородным сверхпроводникам, включая ВТСП, где размер сверхпроводящих островков много больше длины когерентности.

Работа выполнена при поддержке проектов РФФИ № 21-52-12027 и 21-52-12043.

Список литературы

- [1] Варламов А. А., Ларкин А. И., Теория флуктуаций в сверхпроводниках, Москва, «Добросвет», 2007.
- [2] Torquato S., Random Heterogeneous Materials, Springer New York, 2002.
- [3] Sinchenko A. A., Grigoriev P. D., Orlov A. P., Frolov A. V., Shakin A., Chareev D. A., Volkova O. S., and Vasiliev A. N., *Phys. Rev. B* **95**, 165120 (2017).
- [4] Grigoriev P. D., Sinchenko A. A., Kesharpu K. K. et al., *JETP Lett.* **105**, 786 (2017).
- [5] Seidov S. S., Kesharpu K. K., Karpov P. I., Grigoriev P. D., *Phys. Rev. B* **98**, 014515 (2018).
- [6] Kesharpu K. K., Kochev V. D., Grigoriev P. D., *Crystals*, **11**, 72 (2021).
- [7] Mogilyuk T. I., Grigoriev P. D., Kesharpu K. K., Kolesnikov I. A., Sinchenko A. A., Frolov A. V., and Orlov A. P., *Physics of the Solid State* **61**, 1549 (2019).
- [8] Grigoriev P. D., Kochev V. D., Orlov A. P., Frolov A. V., Sinchenko A. A., *Materials*, **16**(5), 1840 (2023).
- [9] Kang N., Salameh B., Auban-Senzier P., Jerome D., Pasquier C. R., and Brazovskii S., *Phys. Rev. B* **81**, 100509(R) (2010).
- [10] Narayanan A., Kiswandhi A., Graf D., Brooks J., and Chaikin P., *Phys. Rev. Lett.* **112**, 146402 (2014).
- [11] Gerasimenko Y. A., Sanduleanu S. V., Prudkoglyad V. A., Kornilov A. V., Yamada J., Qualls J. S., and Pudalov V. M., *Phys. Rev. B* **89**, 054518 (2014).
- [12] Kochev V. D., Kesharpu K. K., Grigoriev P. D., *Phys. Rev. B* **103**, 014519 (2021).

Микроструктура и сверхпроводящие свойства монокристалла $\text{NaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$

А. Ю. Дегтяренко¹, С. Ю. Гаврилкин¹, И. В. Морозов², А. Ю. Цветков¹,
А. И. Шилов¹, Е. О. Рахманов^{2,1}, С. А. Кузьмичев^{2,1}, Т. Е. Кузьмичева^{1,2}

*¹Центр высокотемпературной сверхпроводимости
и квантовых материалов им. В. Л. Гинзбурга, ФИАН*

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

Семейство железосодержащих сверхпроводников 111 интересно своими уникальными свойствами. В соединении NaFeAs наряду со сверхпроводимостью существует дальнейшее антиферромагнитное упорядочение, а также структурный фазовый переход [1]. Замещение атомами Со атомов Fe в данном соединении приводит к объемной сверхпроводимости, при этом температура сверхпроводящего перехода значительно увеличивается с 10 К до ~ 22 К. В данной работе исследована микроструктура соединения $\text{NaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$ на атомарном уровне методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения (ВР ПЭМ), а также сверхпроводящие свойства методом вибрационной магнитометрии в полях до 9 Тл в широком диапазоне температур. Монокристаллы $\text{NaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$ выращены методом кристаллизации из расплава собственных компонентов CoAs . Для исследований были выбраны образцы слабо передопированного состава ($x = 0.045$). Используя в качестве допанта прекурсор CoAs вместо традиционного чистого элемента Со [2], возможно получить серию образцов с меньшим шагом замещения и более высокую однородность сверхпроводящих свойств. Последнее, например, приводит к высокой интенсивности и добротности спектроскопических щелевых особенностей на спектрах туннельных контактов на базе полученных монокристаллов [3]. Методом рентгеновской дифрактометрии исследована структура образца $\text{NaFe}_{0.095}\text{Co}_{0.045}\text{As}$. На рисунке 1, а представлена дифрактограмма с серией пиков (00 l), подтверждающая высокую монокристалличность. Температура сверхпроводящего перехода для $\text{NaFe}_{0.095}\text{Co}_{0.045}\text{As}$ составила $T_c \sim 21$ К, рис. 1, б. Пробоподготовка монокристалла $\text{NaFe}_{0.095}\text{Co}_{0.045}\text{As}$ для ВР ПЭМ осуществлялась с минимальным пребыванием образца на воздухе. Методом сканирующей электронной микроскопии и фокусирующего ионного пучка Xe^+ была подготов-

лена ламель толщиной ~ 30 нм. По полученным изображениям микроструктур ВР ПЭМ были выявлены включения, расположенные вдоль плоскости ab . Двумерные дефекты типичны для слоистых материалов [4], а для сверхпроводников дополнительно служат центрами пиннинга. На петлях гистерезиса намагниченности $M(H)$, полученных в диапазоне температур от 2 до 16 К при $H \parallel c$, со скоростью развертки поля 50 Ое и 250 Ое, отчетливо наблюдается второй пик намагничивания. Используя модель критического состояния Бина [5], была оценена плотность критического тока, которая составила $J_c \sim 10^5$ А/см². Стоит отметить, что полученные петли гистерезиса достаточно симметричны, что свидетельствует о преобладании объемного пиннинга в образце.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 22-72-10082.

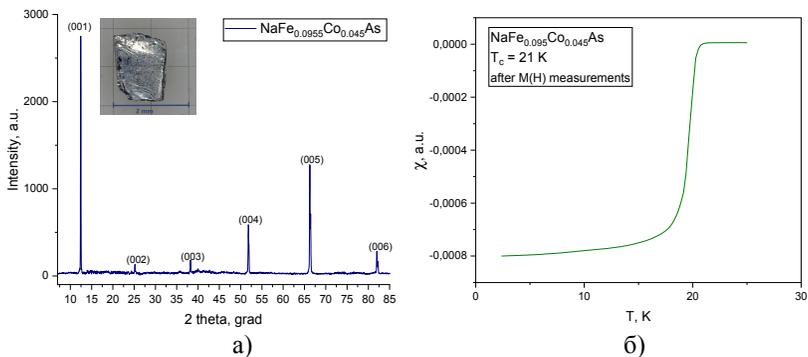


Рис. 1. а) Дифрактограмма от монокристалла NaFe_{0.095}Co_{0.045}As (00l) и б) температурная зависимость магнитной восприимчивости с $T_c = 21$ К.

Список литературы

- [1] Parker D. R. et al. Structure, antiferromagnetism and superconductivity of the layered iron arsenide NaFeAs // *Chemical Communications*. 2009. №. 16. С. 2189–2191.
- [2] Steckel F. et al. Crystal growth and electronic phase diagram of 4 d-doped Na_{1-δ}Fe_{1-x}Rh_xAs in comparison to 3 d-doped Na_{1-δ}Fe_{1-x}Co_xAs // *Physical Review B*. 2015. Т. 91. №. 18. С. 184516.
- [3] Кузьмичев С. А. и др. Спектроскопия эффекта многократных андреевских отражений в монокристаллах NaFe_{1-x}Co_xAs недодопированного состава *Письма в ЖЭТФ*. 2023. Т. 117. № 8 [принято в печать].

- [4] Degtyarenko A. Y. et al. Synthesis and HRTEM Investigation of $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$ Superconductor // *Nanomaterials*. 2022. Т. 12. №. 21. С. 3801.
- [5] Bean C. P. Magnetization of high-field superconductors // *Reviews of modern physics*. 1964. Т. 36. №. 1. С. 31.

Локальная трансформация электронной структуры и генерация свободных носителей в купратах и пниктидах при гетеро- и изовалентном допировании

К. Мицен, О. Иваненко

Физический институт им.П.Н. Лебедева РАН, г. Москва, Россия
E-mail: ivanenko@lebedev.ru

Ранее нами было показано [1], что большинство аномалий сверхпроводящих характеристик купратов и ферропниктидов, наблюдаемых при концентрациях допанта внутри сверхпроводящего купола, а также само положение куполов на фазовых диаграммах, не требуют для своего объяснения знания деталей их электронной структуры, а могут быть поняты и рассчитаны с высокой точностью в рамках простой модели, описывающей кластерную структуру сверхпроводящей фазы. Данная модель предполагает самолокализацию допированных носителей, при которой каждый допированный носитель локально деформирует электронную структуру кристалла, уменьшая щель Δ_{ct} для переходов между состояниями аниона и катиона в ячейках, примыкающих к области локализации допированного носителя (ячейки CuO_4 в купратах и ячейки AsFe_4 в пниктидах). Если уменьшенная щель Δ_{ct}^* в ячейках по границе области локализации такова, что выполняется условие $0 < \Delta_{ct}^* < E_{ex}$, где E_{ex} — энергия связи СТ-экситона, то открывается возможность для экситонных переходов между анионом и катионом в этих ячейках. Такие ячейки мы называем СТ-плакетками. Взаимодействие допированного носителя с экситонами, возникающими под его влиянием, отвечающее образованию трионного комплекса, является механизмом, приводящим к самолокализации этого носителя, а размер области локализации определяется расстоянием от допированного носителя до ячеек, где начинает выполняться условие $0 < \Delta_{ct}^* < E_{ex}$.

При достаточно высокой концентрации допанта из таких СТ-плакеток формируются кластеры новой фазы с измененной электронной структурой. Здесь, исходя из предложенной модели, мы показываем, что в недопированных купратах и ферропниктидах, изначально имеющих разную электронную структуру (моттовский изолятор и полуметалл), локальное допирование может приводить к формированию кластеров с одинаковой электронной структурой самодопированного экситонного изолятора, в котором в роли допантов, генерирующих свободные носители в системе, выступают парные «биэкситонные» состояния, формируемые в таком кластере на соседних ионах Cu (в купратах) или As (в пниктидах). Эти парные состояния, как предполагается, обеспечивают реализацию специфического механизма сверхпроводящего спаривания, возможность которого генетически присуща такой системе.

В пниктидах с изовалентным допированием формирование СТ-плакеток в окрестности допанта происходит за счет различия ионных радиусов допанта (P, Ru) и иона матрицы (As, Fe). Распространяя тот же подход на изовалентно допированные пниктиды, можно дать единое объяснение природы экспериментально наблюдаемых острых максимумов лондоновской глубины проникновения в зависимости от уровня допирования и определить их точное положение как для гетеро-, так и для изовалентно допированных пниктидов системы «122». Предложенная модель также включает механизм генерации дополнительных свободных носителей при гетеровалентном и изовалентном легировании и позволяет предсказать их знак, который в общем случае не совпадает со знаком легированных носителей.

Учитывая возможности модели в части точного определения положения различных особенностей на фазовых диаграммах купратов и пниктидов железа, а также ее способность объяснить природу и знак генерируемых при допировании свободных носителей, можно заключить, что предположения о локальном характере допирования, кластерной природе сверхпроводящей фазы и особенностях электронного спектра вполне оправданы.

Список литературы

- [1] Мицен К. В., Иваненко О. М. Фазовые диаграммы купратов и пниктидов как ключ к пониманию механизма высокотемпературной сверхпроводимости // *Успехи физических наук*. 2017. Т. 187. №. 4. С. 431–441.

Спектроскопия многократных андреевских отражений сверхпроводящего селенида $(\text{K,Na})\text{Fe}_2\text{Se}_2$

А. Д. Ильина^{1,2}, С. А. Кузьмичев^{3,1}, В. М. Михайлов^{1,2}, И. А. Никитченков³,
И. В. Морозов³, А. И. Болталин³, А. И. Шилов¹, Т. Е. Кузьмичева¹

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

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

³МГУ им. М. В. Ломоносова, г. Москва, Россия

Соединение $(\text{K,Na})\text{Fe}_2\text{Se}_2$ переходит в сверхпроводящее (СП) состояние при критической температуре $T_c = 31$ К. Слоистые монокристаллы $(\text{K,Na})\text{Fe}_2\text{Se}_2$ обладают естественным фазовым расслоением: в них сосуществуют две фазы (СП и диэлектрическая); объёмная доля СП фазы в среднем составляет 10–15 %. На поверхности Ферми присутствуют электронные цилиндры вблизи М-точки зоны Бриллюэна [1].

В данной работе исследованы вольтамперные характеристики (ВАХ) и спектры дифференциальной проводимости (ДП) планарных туннельных контактов типа ScS (S — СП, c — барьер), полученных методикой «break-junction» [2]. На рассмотренных спектрах ДП ниже T_c наблюдался резкий пик проводимости при нулевом напряжении смещения, что вместе с характерным избыточным током I_{exc} на ВАХ и отсутствии сверхтоковой ветви при $eV = 0$ свидетельствуют о высокой прозрачности получаемого туннельного барьера и реализации эффекта некогерентных многократных андреевских отражений (МАО). Согласно [3,4], температурные зависимости особенностей, вызванных МАО: $I_{\text{exc}}(T) \propto \Delta(T)$, $G_{\text{zbc}}(T) \propto \tanh[\Delta(T)/(2k_B T)]$. Кроме того, в соответствии с [3] на спектрах ДП наблюдались субгармонические структуры (СГС), состоящие из минимумов при смещениях $|eV(T)| = 2\Delta(T)/n$, где n — натуральное.

Положения минимумов СГС на спектрах ДП напрямую определяют величину СП параметра порядка $\Delta(0) = 5.3 \pm 0.3$ мэВ. Соответствующее характеристическое отношение $2\Delta(0)/k_B T_c = 3.88 > 3.53$, превышающее БКШ-предел слабой связи, говорит о сильном взаимодействии в электронных зонах. Экспериментальная зависимость $I_{\text{exc}}(T)$ может быть описана однозонной БКШ-образной моделью; в то же время $G_{\text{zbc}}(T)$ проходит немного ниже соответствующей теоретической кривой. Вероятные причины выбывания квазичастиц из процесса МАО при $eV \rightarrow 0$ — неуп-

ругое рассеяние или пониженная плотность электронных состояний вблизи уровня Ферми.

Помимо щелевых минимумов СГС, ниже T_c на спектрах ДП мы наблюдали тонкую структуру при $|eV| = [2\Delta + \epsilon]/n$, связанную, предположительно, с испусканием бозона с энергией $\epsilon(0) \approx 6.4$ мэВ в процессе МАО. С увеличением температуры энергия бозона $\epsilon(T)$ слабо убывала, не повторяя зависимость $\Delta(T)$, однако схоже с поведением энергии спинрезонансного пика в железосодержащих СП [5]. Определенные нами энергетические параметры $\Delta(0)$ и $\epsilon(0)$ воспроизводятся и практически не зависят от геометрических параметров ScS-контакта.

Список литературы

- [1] Krzton-Maziopa A. // *Front. Chem.* 2021. V. 9. P. 640361.
- [2] Кузьмичев С. А., Кузьмичева Т. Е. // *Физ. низк. темп.* 2016. Т. 42. С. 1284.
- [3] Kummel R., Gunsenheimer U., and Nicolsky R. // *Phys. Rev. B* 1990. V. 42. P. 3992.
- [4] Gunsenheimer U., Zaikin A. D. // *Phys. Rev. B* 1994. V. 50. P. 6317.
- [5] Korshunov M. M., Shestakov V. A., Togushova Yu. N. // *Phys. Rev. B* 2016. V. 94. P. 094517.

Исследование особенностей первого критического поля в соединении BaPd_2As_2 при сверхнизких температурах

А. В. Ключник, О. А. Соболевский, А. В. Садаков,
А. С. Усольцев, Л. А. Моргун

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

Мы исследовали температурную зависимость первого критического поля BaPd_2As_2 на рефрижераторе растворения BlueForge с помощью датчика Холла, измеряя намагниченность в диапазоне температур от 10 мК до 4 К. Полученная из этих данных зависимость $H_{c1}(T)$ была обработана по моделям s-wave и s-extended wave из статьи Таланцева [3]. В качестве свободных параметров фита были ширина сверхпроводящей щели Δ_0 , критическая температура T_c , скачок теплоемкости $\Delta C/C$, значение первого критического поля $H_{c1}(0)$ и параметр анизотропии α .

В результате аппроксимации данных были получены следующие параметры:

- s-wave модель: $\Delta_0 = 0.56$ meV, $T_c = 3.68$ K, $\Delta C/C = 1.82$. Значение скачка теплоемкости лежит между полученными в других статьях 1.41 [2] и 2.2 [1].
- s-extended wave модель: $\Delta_0 = 0.75$ meV, $T_c = 3.70$ K, $\Delta C/C = 0.81$, $\alpha = 0.86$.

Характеристическое БКШ отношение $2\Delta_0/kT_c$ в случае s-wave равно 3.52, в случае s-extended wave 4.73.

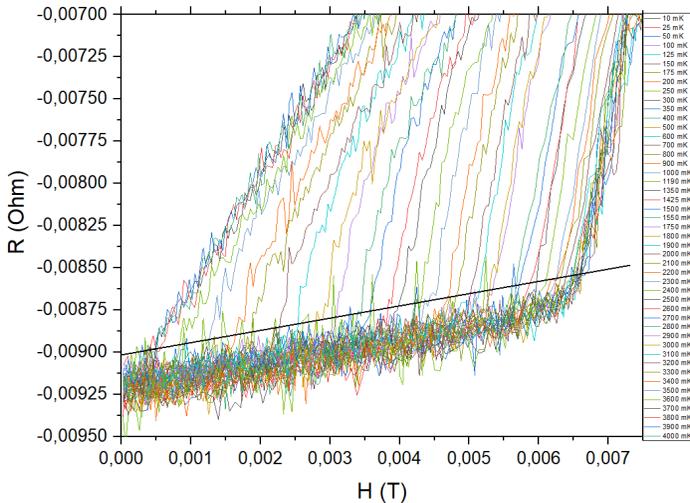


Рис. 1. Критерий определения первого критического поля для разных температур

Также образец BaPd_2As_2 был исследован методом андреевской спектроскопии S-n-S контакта на микротрещине [1]. В результате эксперимента была получена зависимость ширины сверхпроводящей щели от температуры. После приближения моделью БКШ были получены следующие параметры: $\Delta_0 = 0.61$ meV, $T_c = 3.70$ K, $2\Delta_0/kT_c = 3.83$. Упомянутая ранее температурная зависимость первого критического поля была также обработана по модели s-wave с использованием экспериментально полученной $\Delta(T)$, однако, полученная кривая отклоняется от данных больше, чем предыдущие модели.

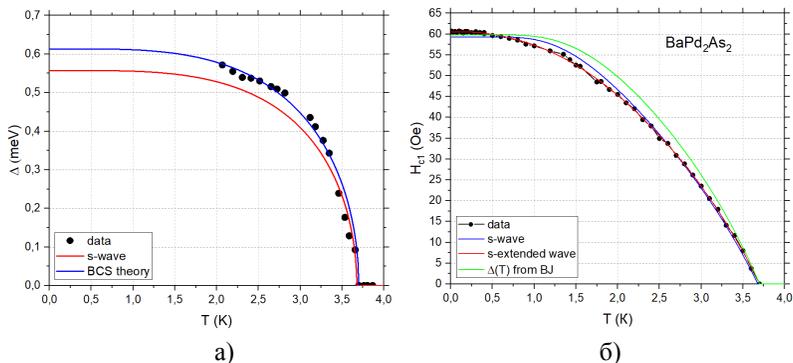


Рис. 2. (а) График температурной зависимости ширины сверхпроводящей щели и ее аппроксимация по теории БКШ и модели s-wave. (б) График зависимости первого критического поля от температуры $H_{c1}(T)$ и аппроксимация по моделям s-wave, s-extended wave, s-wave с экспериментальной $\Delta(T)$

Исходя из того, что аппроксимирующие кривые хорошо согласуются с данными, мы делаем вывод, что BaPd_2As_2 является s-wave сверхпроводником. Модель s-extended wave описывает данные лучше всего, но получающийся при этом коэффициент $\alpha = 0.86$ говорит об очень высокой степени анизотропии, ближе к d-wave, что противоречит другим статьям [1, 2]. Из чего следует, что численная аппроксимация не всегда будет лучшей с физической точки зрения. Также две разные методики дают схожие, но не полностью совпадающие результаты, поэтому вопрос об их сопоставлении остается открытым.

Список литературы

- [1] Abdel-Hafiez M., Zhao Y. et al. High pressure effects on isotropic superconductivity in the iron-free layered pnictide superconductor BaPd_2As_2 // *Phys. Rev. B* 97.134508 (2018).
- [2] Guo Q., Yu J. et al. Superconductivity at 3.85 K in BaPd_2As_2 with the ThCr_2Si_2 -type structure // *EPL*, 113 (2016) 17002.
- [3] Talantsev E. F., Crump W. P., Tallon J. L. Thermodynamic parameters of single- or multi-band superconductors derived from self-field critical currents // doi: 10.1002/andp.201700197 (2017).

Роль нематичности в формировании сверхпроводящего состояния в монослоях FeSe

М. М. Коршунов^{1,2}, Ю. Н. Тогушова², С. Д. Казанина²

¹*Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, ФИЦ КИЦ СО РАН,
г. Красноярск, Россия*

²*Сибирский федеральный университет, г. Красноярск, Россия*

В сложных системах часто наблюдается сочетание нескольких конкурирующих или сосуществующих дальних порядков разной природы. Таковыми являются сверхпроводящие соединения железа, пниктиды и халькогениды, относящиеся к многозонным системам [1, 2]. Параметр порядка, имеющий противоположные знаки на электронных и дырочных листах поверхности Ферми, получил название состояние s_{\pm} , поскольку, так же, как и s -тип щели в обычных сверхпроводниках, относится к A_{1g} представлению [2]. Многообразию экспериментальных данных по сверхпроводящему состоянию можно объяснить в рамках спин-флуктуационного механизма куперовского спаривания, приводящего, в частности, к решению s_{\pm} типа [3]. Помимо ставшего уже классическим наблюдения спин-резонансного пика в неупругом рассеянии нейтронов [4], спиновый экситон, характерный для состояния s_{\pm} , был найден и в спектрах Андреевского отражения [5].

Экспериментально обнаруженная разница в сопротивлении вдоль взаимно ортогональных направлений в плоскости железа a и b в тетрагональной фазе ферропниктидов [6] привела к выводу о нарушении симметрии C_4 до C_2 и формировании электронного нематического порядка [7, 8], т. е. перехода в электронной подсистеме, в отличие от обычного структурного фазового перехода, где ионы смещаются в новые равновесные позиции. В нематической фазе возникает различие магнитного отклика (спиновой восприимчивости) в ортогональных направлениях в импульсном пространстве, q_x и q_y .

Неутихающий интерес вызывает сверхпроводимость в монослоях халькогенидов железа (1ML-FeSe) с высокими T_c [9, 10] и отсутствием дырочных листов поверхности Ферми [11]. Допирование электронами приводит к изменению топологии поверхности Ферми и повышению T_c [12].

Поскольку нематическое состояние сосуществует со сверхпроводящим [13, 14], оно проявляется в понижении симметрии параметра поряд-

ка до C_2 [15]. В данной работе мы проанализировали влияние такого понижения симметрии на решение уравнения на параметр порядка в рамках спин-флуктуационной теории спаривания [1]. В основе лежит гамильтониан десятиорбитальной модели FeSe [16]. Нематическое состояние моделируем как нестабильность Померанчука d -типа в соответствии с работами [17, 18]. Соответствующий вклад в гамильтониан пропорционален константе связи V_{nem} , которую, для оценки качественных эффектов нематичности, мы взяли равной 50 мэВ. Расчёты параметра порядка показывают, что значение безразмерного параметра связи λ , который определяет критическую температуру T_c , для решения s_{\pm} типа меньше, чем для решения «нематического s -типа». Т. е. T_c сверхпроводящего состояния, сосуществующего с нематическим состоянием, больше, чем T_c собственно сверхпроводящего состояния. Проанализировано влияние топологии поверхности Ферми на иерархию решений уравнений на сверхпроводящий параметр порядка.

Список литературы

- [1] Коршунов М. М., *Успехи физических наук* 184, 882 (2014).
- [2] Hirschfeld P. J., Korshunov M. M., Mazin I. I., *Rep. Progr. Phys.* 74, 124508 (2011).
- [3] Maiti S. et al., *Phys. Rev. Lett.* 107, 147002 (2011).
- [4] Dai P., *Rev. Mod. Phys.* 87, 855–896 (2015).
- [5] Korshunov M. M., Kuzmichev S. A., Kuzmicheva T. E., *Materials* 15, 6120 (2022).
- [6] Chu J.-H. et al., *Science* 329, 824 (2010).
- [7] Fernandes R. M., Chubukov A. V., Knolle J. et al., *Phys. Rev. B* 85, 024534 (2012).
- [8] Fernandes R. M., Chubukov A. V., Schmalian J., *Nat. Phys.* 10, 97 (2014).
- [9] Wang Q. Y. et al., *Chin. Phys. Lett.* 29, 037402 (2012).
- [10] Ge J.-F. et al., *Nature Materials* 14, 285 (2015).
- [11] Zhao L. et al., *Nat. Comm.* 7, 10608 (2016).
- [12] Shi X. et al., *Nat. Comm.* 8, 14988 (2017).
- [13] Li J. et al., *Nat. Comm.* 8, 1880 (2017).
- [14] Wang J. et al., *Adv. In Phys. X* 6, 1878931 (2021).
- [15] Sprau P. O. et al., *Science* 357, 75 (2017).
- [16] Eschrigand H., Koepernik K., *Phys. Rev. B* 80, 104503 (2009)
- [17] Yamase H., Oganessian V., Metzner W., *Phys. Rev. B* 72, 035114 (2005).
- [18] Choudhury S. S., Peterson S., Idzerda Y., *Phys. Rev. B* 105, 214515 (2022).

Сверхпроводящий параметр порядка в арсениде железа EuCsFe₄As₄ (семейство 1144) методом создания планарных контактов на микротрещине

С. А. Кузьмичев^{1,2}, К. С. Перваков², В. А. Власенко²,
А. Ю. Дегтяренко², С. Ю. Гаврилкин², Т. Е. Кузьмичева²

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

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

Кристаллическая структура сверхпроводящих (СП) пниктидов EuCsFe₄As₄ представляет собой стопку СП блоков FeAs, попеременно чередующихся вдоль *c*-направления с плоскостями Eu и Cs (Eu-FeAs-Cs-FeAs). Эти удивительные соединения, в отличие от большинства железосодержащих СП, сверхпроводят в стехиометрическом составе с максимальной T_c до 37 К. При этом ниже T_c , при $T_m \approx 15$ К, происходит магнитное упорядочение в плоскостях Eu, сосуществующее со СП фазой (в качестве обзора см. [1]). Уровень Ферми в этих соединениях пересекает около 10 зон, формируя дырочные цилиндры вокруг Γ -точки зоны Бриллюэна и электронные цилиндры вокруг M-точки, на которых ниже T_c образуются несколько СП конденсатов.

Сложность работы с пниктидами щелочных металлов обусловлена быстрой (~10–15 минут) деградацией их СП свойств в присутствии даже следовых количеств воды и кислорода. Это обуславливает крайне малое количество экспериментальных данных о свойствах системы 1144; в частности, данные других групп о структуре СП параметра порядка в EuCsFe₄As₄ на данный момент отсутствуют.

Мы отработали метод синтеза монокристаллов EuCsFe₄As₄ методом «self-flux» [2]. По сравнению с другими группами, нами выращены максимально крупные монокристаллы EuCsFe₄As₄ (размером до 2×2.5 мм²) с минимальным содержанием металлической фазы Eu-122. Критическая температура кристаллов составляла $T_c \approx 36.7$ К с шириной резистивного СП перехода около 0.8 К (рис. 1).

При $T = 4.2$ К с помощью техники «break-junction» [3] в слоистых монокристаллах создавались планарные наноконтакты СП – тонкий нормальный металл – СП (SnS) с направлением протекания тока вдоль оси *c*.

Эффект *некогерентных* многократных андреевских отражений (МАО), наблюдаемый в SnS-контакте *высокой* прозрачности ($B < 1/4$, $Z < 1/2$), вызывает избыточный ток на $I(V)$ при любых смещениях eV в том числе вблизи нулевых смещений. На $dI(V)/dV$ -спектре появляется субгармоническая щелевая структура (СГС) — серия минимумов, положения которых напрямую определяют величину СП щели и ее температурную зависимость. Реализация баллистического андреевского транспорта вдоль c -направления позволяет получать информацию об анизотропии СП свойств в $k_x k_y$ -плоскости.

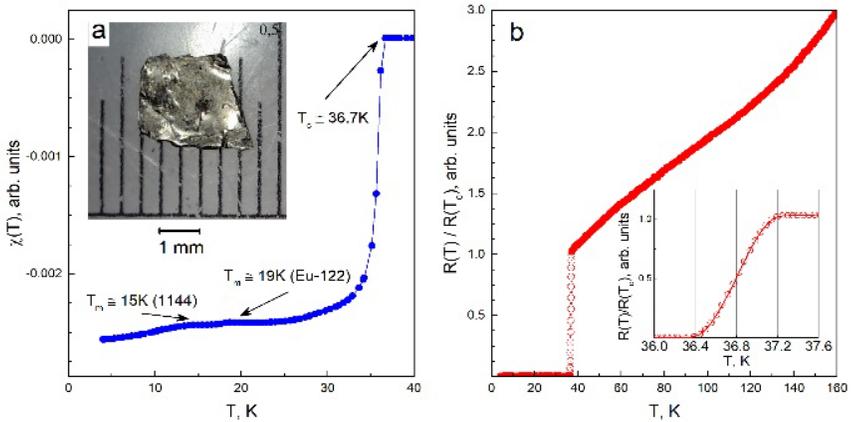


Рис. 1. Температурные зависимости магнитной восприимчивости (a) и сопротивления (b) монокристалла $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ определяют объемную $T_c \approx 36.8$ K

На $dI(V)/dV$ -спектрах SnS-контактов в $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ ниже T_c мы воспроизводим наблюдаем дублетную андреевскую особенность, положение которой напрямую определяет два СП энергетических параметра $\Delta_L^{\text{in}} \approx 4.8$ мэВ и $\Delta_L^{\text{out}} \approx 8$ мэВ при $T = 4.2$ K. С одной стороны, данные величины могут соответствовать двум открывающимся на разных листах поверхности Ферми изотропным СП щелям. Однако, принимая во внимание схожесть формы дублета с численными расчетами (рис. 4 в [3]), можно предположить реализацию единой анизотропной СП щели Δ_L с расширенным s -волновым типом симметрии без точек нулей («нодов») и степенью анизотропии $A_L \equiv 100\% [1 - \Delta_L^{\text{in}}/\Delta_L^{\text{out}}] \approx 40\%$. В этом случае наблюдаемые значения Δ_L^{in} и Δ_L^{out} являются минимальной и максимальной

ной энергиями связи куперовских пар в зависимости от направления импульса. При малых смещениях на $dI(V)/dV$ -спектрах обнаружена малая СП щель $\Delta_S(0) \approx 1.9$ мэВ. Величины $\Delta_L^{\text{in}}(0)$, $\Delta_L^{\text{out}}(0)$ и $\Delta_S(0)$ не зависят от площади и сопротивления SnS-контактов.

Измеренные напрямую температурные зависимости СП щелей $\Delta_L(T)$ и $\Delta_S(T)$ типичны для случая умеренного межзонного взаимодействия. Три наблюдаемых энергетических параметра стремятся к нулю при общей критической температуре T_c^{local} , соответствующей температуре перехода *контактной области* в нормальное состояние.

Температурное поведение $\Delta_L^{\text{out}}(T)$ и $\Delta_L^{\text{in}}(T)$ близко к БКШ-образной однозонной зависимости, в то время как малая СП щель Δ_S быстрее уменьшается при малых T и примерно линейно тянется к T_c . Степень предположительной анизотропии Δ_L практически не меняется с температурой вплоть до T_c . Дублет сохраняет форму.

Определенная нами щелевая структура $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ — наличие дублета от Δ_L на $dI(V)/dV$ -спектрах SnS-контактов и его форма, величина предположительной анизотропии большой СП щели Δ_L и ее температурное поведение $A_L(T)$, форма температурных зависимостей $\Delta_L^{\text{in}}(T)$, $\Delta_L^{\text{out}}(T)$ и $\Delta_S(T)$ — оказалась близка к таковой для пниктидов родственного семейства $\text{Ba}(\text{Fe},\text{Ni})_2\text{As}_2$ с электронным допированием, исследованной нами ранее [4–6]. Также близкими оказались величины характеристических отношений для трех наблюдаемых СП параметров порядка: $2\Delta_L^{\text{out}}(0)/k_B T_c \approx 5.3$, $2\Delta_L^{\text{in}}(0)/k_B T_c \approx 3.2$ и $2\Delta_S(0)/k_B T_c \approx 1.3$. Таким образом, в обеих семействах имеет место скейлинг СП щелей с T_c (т.е. $\Delta_j(0) \sim T_c$) при электронном допировании в диапазоне $T_c = 12\text{--}37$ К [2].

Работа поддержана грантом РНФ № 22-22-00776.

Список литературы

- [1] Kawashima K., et al. // *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 064710 (2016).
- [2] Кузьмичев С. А. и др. // *Письма в ЖЭТФ* **116**, 702 (2022).
- [3] Кузьмичев С. А., Кузьмичева Т. Е. // *Физ. низк. темп.* **42**, 1284 (2016).
- [4] Kuzmicheva T. E. et al. // *Phys. Rev. B* **97**, 235106 (2018); *ibid.* **104**, 174512 (2021).
- [5] Кузьмичева Т. Е. и др. // *УФН* **187**, 450 (2017); *Письма в ЖЭТФ* **112**, 822 (2020).
- [6] Садаков А. В. и др. // *Письма в ЖЭТФ* **116**, 686 (2022).

Спектроскопия эффекта многократных андреевских отражений в монокристаллах $\text{NaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$

Т. Е. Кузьмичева¹, С. А. Кузьмичев^{2,1}, И. В. Морозов³, Е. О. Рахманов^{3,1},
А. И. Шилов¹

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

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

³*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, химический факультет, г. Москва, Россия*

Слоистое соединение NaFeAs относится к семейству 111 железосодержащих сверхпроводников (СП) на основе щелочных металлов и демонстрирует уникальные свойства, нехарактерные для других пниктидов железа. Оно сверхпроводит даже в стехиометрическом составе; при частичном замещении Fe переходным металлом [1] критическая температура достигает максимума $T_c \approx 22$ К одновременно с подавлением антиферромагнетизма и нематичности. На поверхности Ферми обнаружены дырочные цилиндры вблизи Γ -точки зоны Бриллюэна и электронные цилиндры около M-точки, на которых ниже T_c возникают несколько СП конденсатов. Из-за быстрой (в течение нескольких минут) деградации их СП свойств в присутствии даже следовых количеств H_2O и O_2 , на данный момент доступно крайне малое количество экспериментальных данных о щелевой структуре NaFeAs .

Методом кристаллизации из расплава нами выращены монокристаллы номинально недодопированного состава $\text{NaFe}_{0.979}\text{Co}_{0.021}\text{As}$ с $T_c \approx 21$ К. С помощью техники «break-junction» [2] мы создавали планарные наноконтакты СП – тонкий нормальный металл – СП (SnS). Отбор кристаллов, их подготовка и монтаж проводились в перчаточном боксе в атмосфере осушенного аргона. Ниже T_c эффект некогерентных многократных андреевских отражений (IMARE) вызывает избыточный ток на $I(V)$ -характеристике SnS-контакта, повышенную проводимость при $eV = 0$, а также серию щелевых особенностей на $dI(V)/dV$ -спектре, положение которых напрямую определяет величину СП щели $\Delta(T)$ при любых температурах до T_c [3].

Нами напрямую определены энергетические СП параметры порядка и их температурные зависимости в $\text{NaFe}_{0.979}\text{Co}_{0.021}\text{As}$. На $dI(V)/dV$ -

спектрах SnS-контактов ниже T_c мы воспроизводимо наблюдаем дублетную андреевскую особенность, положения которой определяют энергетические параметры $\Delta_L^{\text{out}} \approx 5.4$ мэВ и $\Delta_L^{\text{in}} \approx 3.3$ мэВ при $T \ll T_c$. Δ_L^{out} и Δ_L^{in} могут быть двумя отдельными изотропными СП параметрами порядка, образующимися на различных листах поверхности Ферми. С другой стороны, принимая во внимание тот факт, что для пниктидов семейства 111 характерна анизотропия СП щели (в частности, наблюдаемая в недодопированных Na(Fe,Co)As с помощью ARPES [4]), можно предположить, что Δ_L^{out} и Δ_L^{in} являются экстремумами (минимальной и максимальной энергиями связи куперовских пар в импульсном пространстве) единой анизотропной большой СП щели Δ_L , имеющей расширенный s-волновой тип симметрии без точек нулей. При малых смещениях на $dI(V)/dV$ -спектрах наблюдаются андреевские особенности от малой СП щели $\Delta_S(0) \approx 1.9$ мэВ. Величины энергетических СП параметров воспроизводятся, не зависят от площади и нормального сопротивления SnS-контакта, таким образом, соответствующие особенности $dI(V)/dV$ -спектров не могут быть объяснены случайными эффектами или размерными резонансами.

Характеристические отношения теории БКШ $r_i \equiv 2\Delta_i(0)/k_B T_c$ при $T \ll T_c$ для предположительных экстремумов большой СП щели составляют $r_L^{\text{out}} \approx 6.1$, $r_L^{\text{in}} \approx 3.7 > 3.5$. Для малой СП щели $r_S \approx 2.3 < 3.53$, что характерно для «слабого» или «ведомого» СП конденсата в многощелевом СП.

Нами впервые напрямую измерены температурные зависимости СП параметров порядка $\Delta_i(T)$ (в качестве примера см. рис. 1). Зависимости $\Delta_L^{\text{out}}(T)$ и $\Delta_L^{\text{in}}(T)$ схожи между собой и с однозонной БКШ-образной функцией, хотя проходят немного ниже нее (сплошные кружки на рис. 1). Степень предположительной анизотропии большой СП щели, оцененная как $A_L \equiv 100\% [1 - \Delta_L^{\text{in}}(T)/\Delta_L^{\text{out}}(T)] \approx 39\%$ практически не меняется с увеличением температуры (вставка к рис. 1). Это схоже с поведением дублетов, наблюдаемых нами ранее в LiFeAs [5] и пниктидах Ва(Fe,Ni)₂As₂ системы 122 [6]. Малая СП щель (открытые кружки на рис. 1) убывает с температурой быстрее: отношение $\Delta_L^{\text{out}}(T)/\Delta_S(T)$ резко возрастает вблизи T_c (нижняя панель рис. 1), что говорит о том, что Δ_S является отдельным СП параметром порядка. Величины всех СП параметров порядка стремятся к нулю при единой T_c . В целом, наблюдаемое температурное поведение СП щелей типично для случая умеренного межзонного взаимодействия в k -пространстве между СП конденсатами.

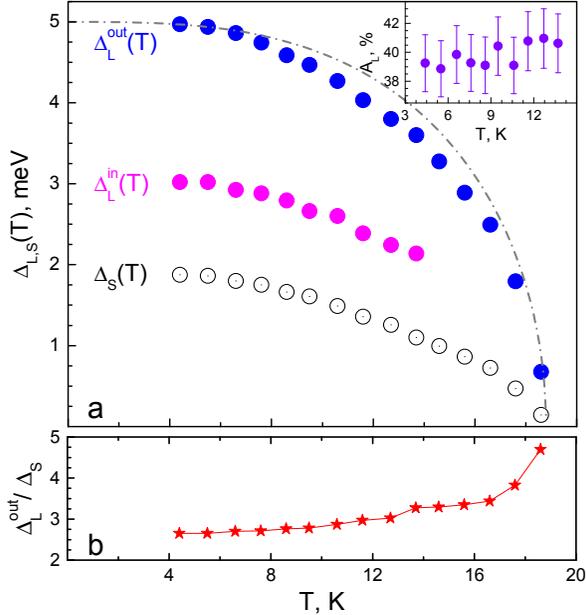


Рис. 1. Температурные зависимости энергетических СП параметров порядка в недодопированном Na(Fe,Co)As. Локальная T_c контакта около 19 К. На вставке показана температурная зависимость отношения $A_L \equiv 100\% [1 - \Delta_L^{\text{in}}(T)/\Delta_L^{\text{out}}(T)]$ (предположительной анизотропии большой СП щели), на нижней панели — зависимость отношения большой и малой СП щели (звезды). Штрихпунктирная однозонная БКШ-образная функция приведена для сравнения

Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 22-72-10082.

Список литературы

- [1] Kuzmicheva T. E., Kuzmichev S. A., *JETP Lett.* 114, 630 (2021).
- [2] Kuzmichev S. A., Kuzmicheva T. E., *Low Temp. Phys.* 42, 1008 (2016).
- [3] Kümmler R., et al., *Phys. Rev. B* 42, 3992 (1990).
- [4] Ge Q. Q., et al., *Phys. Rev. X* 3, 011020 (2013).
- [5] Kuzmichev S., et al., *SN Appl. Sci.* 4, 189 (2022).
- [6] Kuzmicheva T. E., et al., *Phys. Rev. B* 104, 174512 (2021).

Nonlocal interlayer pairing and induced superconductivity in layered hybrid structures

A. A. Koppasov^{1,2,*}, A. S. Mel'nikov^{1,2,3}

¹*Institute for Physics of Microstructures, Russian Academy of Sciences,
Nizhny Novgorod, GSP-105, Russia*

²*Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, Nizhny Novgorod, Russia*

³*Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudnyi,
Moscow Region, Russia*

**E-mail: koppasov@ipmras.ru*

We study the influence of the spin-triplet interlayer electron on the induced superconductivity in two-dimensional electron gas (2DEG) proximity coupled to a conventional superconductor. Using the mean-field approximation for the interlayer interaction, we demonstrate that the spin-triplet interlayer pairing results in the appearance of the odd-frequency component of the pairing correlations in 2DEG and gives rise to an additional spin splitting for quasiparticles. It is shown that the manifestations of this phenomenon include the multi-peak structure in the density of states of 2DEG, the suppression of the Meissner response of the induced superconducting correlations in the low-temperature regime or even the appearance of an additional paramagnetic contribution from 2DEG to the screening properties of the hybrid structure.

In the present work we study the influence of the interlayer interlayer pairing [1-3] on the induced superconductivity in superconductor/normal metal (S/N) structures. In particular, we consider the two-dimensional electron gas (2DEG) proximity coupled to a thick superconducting film. We use the tunneling Hamiltonian formalism and the interlayer electron-electron interaction is treated within the mean-field approximation.

We consider the case when both the tunneling amplitude t and the interlayer pairing term

$$[\hat{\Delta}_{int}(\mathbf{R})]_{\alpha\beta} = -(U_0/2)a_{\alpha}(\mathbf{X})\Psi_{\beta}(\mathbf{X}), \quad (1)$$

are homogeneous within the plane of the 2D system. Here, $\Psi_{\beta}, \Psi_{\beta}^{\dagger}$ ($a_{\alpha}, a_{\alpha}^{\dagger}$) is the fermionic annihilation and creation operator in the S layer (2DEG), respectively, $\mathbf{X} = (\mathbf{R}, \tau)$, \mathbf{R} is the coordinate in 2D system, τ is the imaginary time variable in the Matsubara technique, $\alpha, \beta = \uparrow, \downarrow$ denote spin degrees of free-

dom. Using the following definitions for the Matsubara Green functions in 2DEG

$$\check{G}_n(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2) = T_\tau \left[\check{a}(\mathbf{X}_1) \check{a}^\dagger(\mathbf{X}_2) \right], \quad (2)$$

where $\check{a}(\mathbf{X}) = [a_\uparrow(\mathbf{X}), a_\downarrow(\mathbf{X}), a_\uparrow^\dagger(\mathbf{X}), a_\downarrow^\dagger(\mathbf{X})]^T$, we derive the Gor'kov equations in 2DEG

$$\left[i\omega_n + \check{\tau}_z \check{\xi}_n(\mathbf{R}) - \check{\Sigma}(\omega_n) \right] \check{G}_n(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \omega_n) = \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \quad (3a)$$

$$\check{\Sigma}(\omega_n) = \begin{pmatrix} \hat{\Sigma}_{11} & \hat{\Sigma}_{12} \\ \hat{\Sigma}_{21} & \hat{\Sigma}_{22} \end{pmatrix}, \quad (3b)$$

$$\hat{\Sigma}_{11} = |t|^2 g_s + t f_s (i\hat{\sigma}_y) \hat{\Delta}_{int}^\dagger - t f_s \hat{\Delta}_{int} (i\hat{\sigma}_y) + g_s \hat{\Delta}_{int} \hat{\Delta}_{int}^\dagger, \quad (3c)$$

$$\hat{\Sigma}_{12} = -t^2 f_s (i\hat{\sigma}_y) - t g_s \left(\hat{\Delta}_{int}^T + \hat{\Delta}_{int} \right) + f_s \hat{\Delta}_{int} (i\hat{\sigma}_y) \hat{\Delta}_{int}^T, \quad (3d)$$

$\hat{\Sigma}_{22}(\omega_n) = -\hat{\Sigma}_{11}^T(-\omega_n)$, $\hat{\Sigma}_{21}(\omega_n) = -\hat{\Sigma}_{12}^\dagger(-\omega_n)$, and $g_s(\omega_n) = -g_s(-\omega_n)$ and $f_s(\omega_n) = f_s(-\omega_n)$ are the normal and anomalous quasiclassical Green functions of the isolated S layer, $\omega_n = 2\pi T(n + 1/2)$ is the Matsubara frequency, T is temperature, and n is an integer. In the present work we restrict ourselves to the case of the spin-triplet interlayer pairing

$$\hat{\Delta}_{int} = d_t \hat{\sigma}_z (i\hat{\sigma}_y). \quad (4)$$

Hereafter, the factor $\pi v_s a^2$ is included into the definitions of $t^2 d_t^2$ and td_b , which are given in the energy units. Here v_s is the density of states per spin projection at the Fermi level in the normal-metal state of the superconductor and a is of the order of interatomic distance in the S film.

In Fig. 1 we show the energy dependencies of the quasiparticle density of states (DOS) in 2DEG $v_{2D}(E)$ modified upon the increase in the interlayer pairing amplitude d_t . We take $t = 1$ to produce the plots. One can see that DOS (Fig. 1(a)) reveals two pair of peaks at the induced gap ($E \approx \pm 0.5\Delta_0$) and the

gap of the parent superconductor ($E \approx \pm\Delta_0$). The increase in the interlayer pairing amplitude d_t results in the splitting of the peaks at the induced gap and produces the zero-bias peak at $d_t = t = 1$. Further increase in d_t shifts the low-energy peaks towards $E \approx \pm\Delta_0$. Therefore, one of the manifestations of the spin-triplet interlayer pairing is the appearance of multi-peak structure in the quasiparticle density of states of the two-dimensional system.

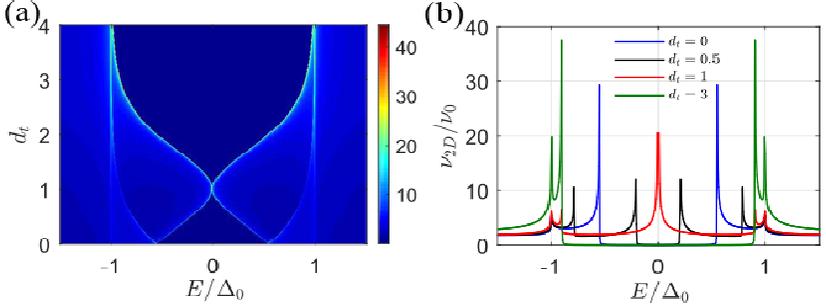


Fig. 1 (a) Typical color plot of the quasiparticle density of states (DOS) in 2DEG for $t = 1$. (b) Energy dependencies of DOS for $t = 1$ and $d_t = 0, 0.5, 1, 3$. Here ν_0 is the DOS at the Fermi level per one spin projection in 2DEG

As a next step we consider the linear electromagnetic response of our system. The local response is described by the relation

$$\mathbf{j} = -e^2 n_s \mathbf{A} / mc, \quad (5)$$

where n_s is the superfluid density and \mathbf{A} is the vector potential. Temperature dependencies of the 2DEG contribution to effective superfluid density $n_s(T)$ are given in Fig. 2 for $t = 1$ and several d_t . The results for diffusive (ballistic) 2DEG are shown in Fig. 2,*a* (Fig. 2,*b*). We predict, thus, that the spin-triplet interlayer pairing suppresses the diamagnetic response of the induced superconductivity in 2DEG and can also provide the paramagnetic contribution to the Meissner screening.

The above predictions are of particular importance for the engineering of the induced superconducting states in various low dimensional structures and can affect, in particular, the topological superconducting states in Majorana systems.

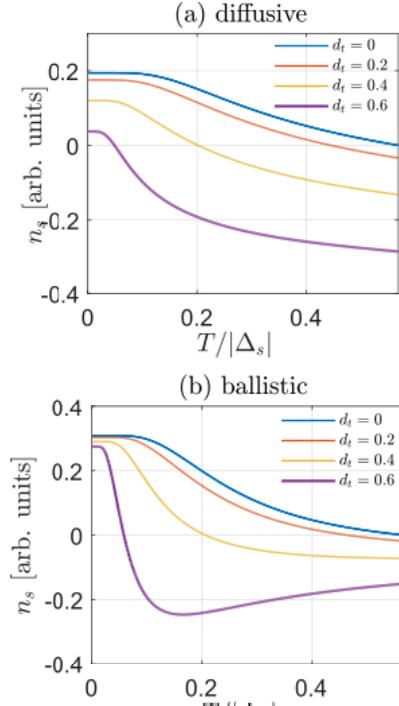


Fig. 2. Typical temperature dependencies of the superfluid density n_s in the diffusive (a) and ballistic (b) regime. In panel (b) the local relation between j and A is assumed. We use $t = 1$ to produce the plots

Acknowledgements

This work was supported by the Russian Science Foundation (Grant No. 20-12-00053). A.S.M. acknowledges support from the Moscow Institute of Physics and Technology under the Priority 2030 Strategic Academic Leadership Program.

References

- [1] Efetov K. B., Larkin A. I. // *JETP* 41(1), 76 (1975).
- [2] Tesanovic Z. // *Phys. Rev. B* 36, 2364(R) (1987).
- [3] Bulaevskii L. N. and Zyskin M. V. // *Phys. Rev. B* 42, 10230 (1990).

Температурные зависимости H_{c2} и удельной теплоёмкости железосодержащего сверхпроводника $\text{NaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$

И. В. Жувагин¹, Л. А. Моргун², А. Ю. Дегтяренко²,
С. Ю. Гаврилкин², А. В. Муратов², А. И. Шилов², С. А. Кузьмичев^{3,2},
Е. О. Рахманов^{2,4}, И. В. Морозов⁴, Т. Е. Кузьмичева²

¹Научно-исследовательский университет «Высшая школа экономики»

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

³Физический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, г. Москва, Россия

⁴Химический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, г. Москва, Россия

Материал NaFeAs относится к классу 111 железосодержащих сверхпроводников с $T_c \approx 10$ К. В данной работе проводились исследования транспортных и термодинамических свойств данного материала, допированного (Fe,Co) [1, 2]. Изучались монокристаллы с различным уровнем допирования: $\text{NaFe}_{0.979}\text{Co}_{0.021}\text{As}$ (недодопированный) и $\text{NaFe}_{0.955}\text{Co}_{0.045}\text{As}$ (передопированный). Контактным четырёхточечным методом на переменном токе были получены температурные зависимости удельного сопротивления при различных магнитных полях (рис. 1). Магнитное поле прикладывалось как в плоскости ab , так и вдоль оси c , и составляло в наших экспериментах от 0 до 16 Тл. Была проведена оценка верхнего критического поля H_{c2} при помощи однозонной модели WHN и двухзонной модели Гуревича, построена температурная зависимость анизотропии верхнего критического поля.

Также были проведены измерения теплоёмкости в диапазоне температур 1.6–300 К. Поскольку решеточная теплоемкость не могла быть получена прямым измерением, было проведено моделирование двумя способами: с помощью полинома для низких температур до ~ 30 К, а также с помощью учёта вкладов теплоёмкости по Дебаю и Эйнштейну. Результат определения электронной теплоемкости, нормированной на электронную теплоемкость нормального состояния представлен на (рис. 2). Обработка электронной теплоемкости проведена в рамках альфа-модели. Для описания эксперимента достаточно использовать однозонную модель с изотропной щелью $\frac{2\Delta}{kT_c} = 4.3$.

Расчет двухзонной модели, основанной на результатах андреевской спектроскопии, дает менее качественное описание, однако находится

в пределах погрешности для экспериментальной электронной теплоемкости.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 22-72-10082.

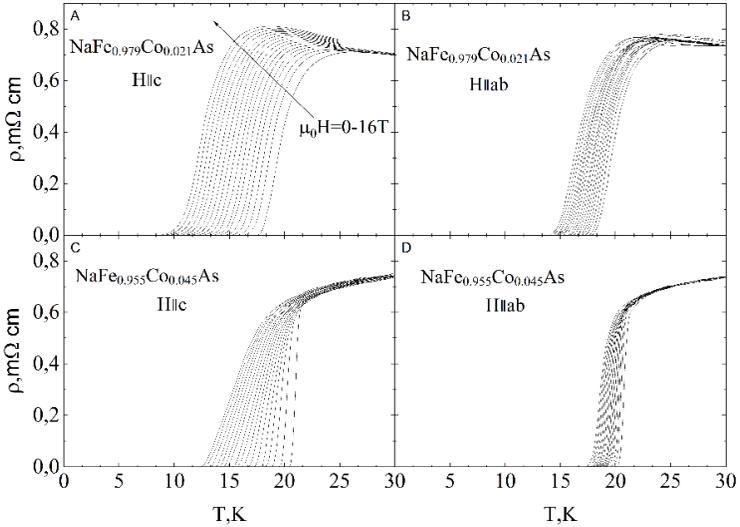


Рис. 1. Температурные зависимости ρ_{ab} и ρ_c в магнитных полях до 16 Тл

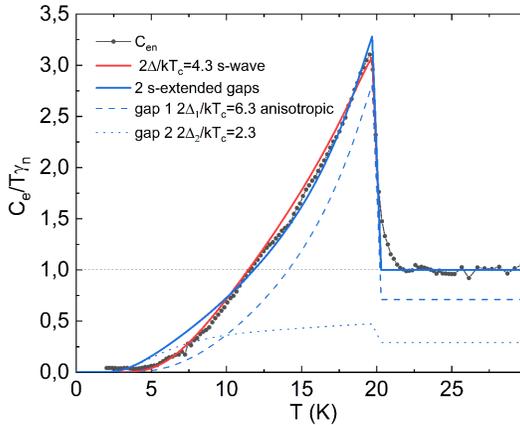


Рис. 2. Электронная теплоемкость, нормированная на электронную теплоемкость нормального состояния $\text{NaFeCo}_{0.955}\text{Co}_{0.045}\text{As}$

Список литературы

- [1] Кузьмичева Т. Е., Кузьмичев С. А. (2021). Пниктиды семейства AFEAS ($A = \text{Li, Na}$) на основе щелочных металлов: современное состояние исследований электронных и сверхпроводящих свойств (миниобзор) // *Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики*. 114, 9–10(11), 685–698.
- [2] Ghannadzadeh S., Wright J. D., Foronda F. R., Blundell S. J., Clarke S. J., & Goddard P. A. (2014). Upper critical field of $\text{NaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$ superconductors // *Phys. Rev. B* 89, 054502.
- [3] Wang A. F., Xiang Z. J., Ying J. J., Yan Y. J., Cheng P., Ye G. J., Luo X. G., & Chen X. H. (2012). Pressure effects on the superconducting properties of single-crystalline co doped nafeas. *New Journal of Physics*, 14(11), 113043.

Dense plasma electron superconducting model

N. P. Netesova

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

Within electron plasma model [1], a complex crystal of ABCD as a result of phase separation into four subsystems is considered. During the phase transition in the ABCD crystal, the valence bond breaking associated with the crystal lattice destruction. It is caused by the balance energies of the A-B-C-D and A-A, B-B, C-C, D-D bonds. The basic principle of the phase transition is caused by bonds being broken and dumbbell configurations of atoms are formed. During a phase transition in a crystal, phase separation occurs and the formation of diatom molecules — a dielectric local phase. This phenomenon of inhomogeneity manifests itself in several energy zones. Experimental methods were the first to detect two energy gaps in an MgB_2 crystal and three energy gaps in a LiFeAs crystal [2]. The equations of the superconducting phase transition curve $T_c(q)$ are derived within the known experimental data and our theoretical parameters. The phase diagram of the superconductor $p_s(T)$, $p_n(T)$ is shown in Figure 1, computations — Table fl. Phase diagram $T_c(q)$ — Fig. 2. Calculations for FeSe , MgB_2 , LiFeAs crystals are given in Tables 1–3, where parameters are square $\Phi(\text{M}, \rho, s, q, \beta)$, square $\Phi(\text{abcd})$, square $\Phi(\text{a})$, square $\Phi(\text{b})$, square $\Phi(\text{c})$, square $\Phi(\text{d})$ are square electron energy

in square eV crystal abcd, a, b, c, d respectively, T_c is the phase transition temperature, ρ is density, s is valence electron number, M is molecular (atomic) mass, q and β are interaction constants, $q(abcd) = 2\beta\Phi^2(abcd)/(\Phi^2(a) + \Phi^2(b) + \Phi^2(c) + \Phi^2(d))$, $p_s(T)$, $p_n(T)$ — are the fractions of correlated and normal electrons, respectively.

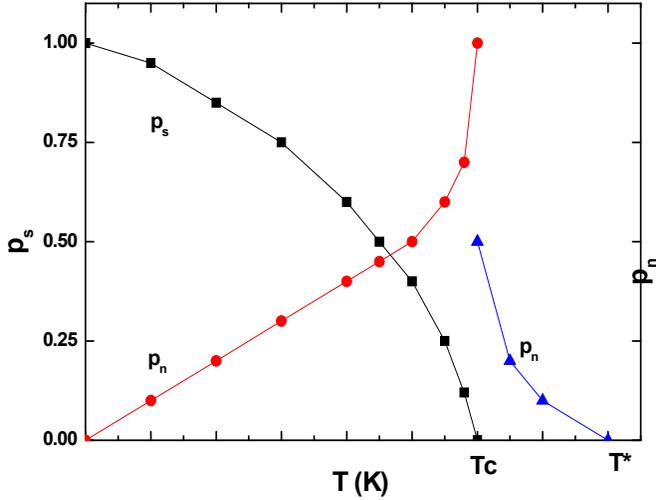


Fig. 1. Superconductor Phase Diagram $p_s(T)$, $p_n(T)$

Table f1. Computations

- | |
|--|
| $p_s = \omega_{p1}^2 / \omega_{o1}^2$,
$p_n = \omega_{p2}^2 / \omega_{o2}^2$,
$p_s + p_n = 1$
1) $T = 0$, $\omega_{p1}^2 / \omega_{o1}^2 = 1$, $\omega_{p2}^2 / \omega_{o2}^2 = 0$, $C_- / T_c = -3/2$;
2) $0 < T < T_c$, $0 < p_s = \omega_{p1}^2 / \omega_{o1}^2 < 1$, $0 < p_n = \omega_{p2}^2 / \omega_{o2}^2 < 1$,
3) $T \leq T_c$, $T = T_c$, $\omega_{p1}^2 / \omega_{o1}^2 = 0$, $\omega_{p2}^2 / \omega_{o2}^2 = 1$;
$T \geq T_c$, $T = T_c$, $\omega_{p1}^2 / \omega_{o1}^2 = 0$, $\omega_{p2}^2 / \omega_{o2}^2 = 1$;
4) $T_c < T < T^*$, $T = (5/4)T_c$, $\omega_{p1}^2 / \omega_{o1}^2 = 0$, $\omega_{p2}^2 / \omega_{o2}^2 = 1/3$,
$C_+ = 3T_c$, $4\delta_2^2 / \omega_{o2}^2 = 31/36$;
5) $T = T^*$, $\omega_{p1}^2 / \omega_{o1}^2 = 0$, $\omega_{p2}^2 / \omega_{o2}^2 = 0$.
6) $T > T^*$, $\omega_{p12}^2 / \omega_{o12}^2 > 1$ |
|--|

Table 1. FeSe, $T_c = 8.7$ K

$$\begin{aligned}
 2\text{FeSe} &= \text{Fe}_2 + \text{Se}_2, \\
 \Phi_2(\text{FeSe}) &= 830 \cdot 14 \cdot 6.7 / 134.807 = \\
 &= 577.52193877 \\
 \Phi_2(\text{Fe}) &= 830 \cdot 8 \cdot 7.874 / 55.847 = \\
 &= 936.18923129 \\
 \Phi_2(\text{Se}) &= 830 \cdot 6 \cdot 4.807 / 78.96 = \\
 &= 303.17705167 \\
 q(\text{FeSe}) &= \\
 2 \cdot \beta \cdot 577.52193877 / [936.18923129 + \\
 &+ 303.17705167] = \\
 &= 1155.04387754 \cdot \beta / 1239.36628296 = \\
 &= 0.931963289 \cdot \beta \\
 T_c &= -280q + 280, T_c = 8.7, \\
 q(\text{FeSe}) &= 0.96892857, \beta = 1.03966388
 \end{aligned}$$

Table 2. MgB₂, $T_c = 39$ K

$$\begin{aligned}
 2\text{MgB}_2 &= \text{Mg}_2 + 2\text{B}_2 \\
 \Phi^2(\text{MgB}_2) &= 830 \cdot 2.57 \cdot 8 / 45.926 = \\
 &= 371.571658755, \\
 \Phi^2(\text{Mg}) &= 830 \cdot 1.74 \cdot 2 / 24.304 = \\
 &= 118.844634628, \\
 \Phi^2(\text{B}) &= 830 \cdot 2.3 \cdot 3 / 10.811 = \\
 &= 529.73822958, \\
 \Sigma &= [118.844634628 + \\
 &+ 1059.47645916] = 1178.321093788 \\
 q(\text{MgB}_2) &= 743.14331751\beta / \\
 &= 1178.321093788 = 0.63067980\beta \cdot \beta \\
 q(\text{MgB}_2) &= 0.860714285, \beta = \\
 &= 1.36474053
 \end{aligned}$$

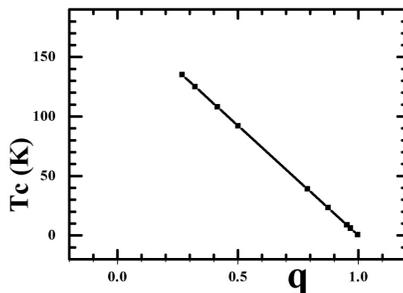


Fig. 2. Phase diagram $T_c(q)$

Table 3. LiFeAs, $T_c = 18$ K

$$\begin{aligned}
 2\text{LiFeAs} &= \text{Li}_2 + \text{Fe}_2 + \text{As}_2 \\
 \Phi^2(\text{Li}) &= 830 \cdot 1 \cdot 0.533 / 6.941 = 63.73577294 \\
 \Phi^2(\text{Fe}) &= 830 \cdot 8 \cdot 7.874 / 55.847 = 936.18923129 \\
 \Phi^2(\text{As}) &= 830 \cdot 5 \cdot 5.74 / 74.92159 = 317.94573500 \\
 \Phi^2(\text{LiFeAs}) &= 830 \cdot 14 \cdot 5.41044805 / 137.70959 = 456.53615249 \\
 q(\text{LiFeAs}) &= 2 \cdot \beta \cdot 421.90235262 / (63.73577294 + 936.18923129 + 317.94573500) = \\
 &= 843.80470524 \cdot \beta / 1317.87073923 = 0.640278807 \cdot \beta \\
 q &= 0.935714285, \beta = 1.46141692
 \end{aligned}$$

Conclusion

Ruthemanh and Lang shot a monoenergetic beam of electrons in the keV range through a thin foil of aluminum and measured the energy distribution of the emergent electrons. They noticed that while most of the beam penetrated the metal without an appreciable loss of energy, there was a distinct group of electrons which lost very nearly 15 eV. When a different metal was substituted for aluminum, the same phenomenon was observed except that the characteristic energy loss differed from metal to metal. The explanation of this effect was not long in coming. Some of the electrons lost a certain definite amount of energy by exciting longitudinal plasma oscillations inside the metal at a frequency characteristic of the particular metal. This cost the electron a “quantum” of energy $\hbar\omega$; Pines called this quantum the “plasmon”. The experiment, and the Bohm and Pines theory, marked the beginning of research into the properties of solid-state plasmas. They showed that this resonant structure is due to the excitation of longitudinal plasma waves (plasmons) in the quantum plasma of a solid. In solids, more specifically in metals, semimetals, semiconductors, nature has provided us with an almost free gas of charged particles, which has many of the attributes of a classical gaseous plasma. This gas differs from ordinary laboratory gas plasma in one very important respect — it is absolutely stable. The excitation of instability and the study of wave propagation in plasma of a solid make up the bulk of research in this area. Many types of solid-state plasma are created by impact ionization, but for a number of purposes of modern research, plasma formed by electrons and holes that already exist in semiconductors, semimetals, and metals is suitable. This variety of starting materials allows plasma with parameters that are impossible in a gas.

Our conclusions: phase superconducting transitions are accompanied by the decomposition of compounds into diatomic molecules. Based on the analysis of the obtained parameters of the compounds, we come to the conclusion that the summation of the squared plasma frequencies of diatomic molecules is a nonlinear problem. The results depend on the structure of the compounds.

References

- [1] Netesova N. P., Arakelyan S. R., Arakelyan E. A., Electron plasma parameters of oxide-based silver crystals, *Proceedings SPIE*, V. 12002, #120020N, 1-15 (2022).
- [2] Kuzmicheva T. E., Kuzmichev S.A., Morozov I. V., Wurmehl S., Büchner B., Experimental Evidence of Three-Gap Superconductivity in LiFeAs, *JETP Letters*, V. 111:6, 350-356 (2020).

Кулоновские корреляции в сверхпроводнике на основе железа YFe_2Ge_2

С. Л. Скорняков^{1,2}, В. И. Анисимов^{1,2}

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

²*Уральский федеральный университет имени первого Президента
России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия*

В данной работе представлены результаты детального теоретического исследования влияния кулоновских корреляционных эффектов на структурные, спектральные и магнитные свойства нормального состояния системы YFe_2Ge_2 , являющейся редким примером непниктидного и нехалькогенидного сверхпроводника на основе железа. В рамках метода DFT+DMFT, объединяющего теорию функционала электронной плотности (DFT) и теорию динамического среднего поля (DMFT), используя приближение всестороннего расширения и сжатия, была выполнена минимизация внутренней энергии как функции объема тетрагональной ячейки и координаты атома германия z_{Ge} . Установлено, что структурные параметры, оптимизированные методом DFT+DMFT, находятся в лучшем согласии с экспериментом по сравнению с результатом, получаемым методом DFT, указывая на важность корреляционных эффектов в YFe_2Ge_2 . Было показано, что, аналогично пниктидным и халькогенидным сверхпроводникам на основе железа, YFe_2Ge_2 является умеренно-коррелированной системой, в которой корреляционные эффекты уже приводят к существенному перенормированию зонной структуры в окрестности энергии Ферми, но при этом еще недостаточно сильны для вытеснения спектрального веса в хаббардовские зоны. Выполненный анализ температурной зависимости локальной спиновой корреляционной функции и зависимости спиновой восприимчивости от волнового вектора выявил формирование короткоживущих локальных моментов в 3d состояниях с симметрией t_{2g} , а также присутствие конкурирующих спиновых флуктуаций.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 19-12-00012).

Влияние магнитного рассеяния на сверхтекучий переход в ^3He в нематическом аэрогеле

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. Таллин, Эстония

Сверхтекучесть ^3He связана с образованием куперовских пар с полными спином и орбитальным моментом пары, равными 1, что приводит к разнообразию его свойств. А именно, параметр порядка сверхтекучего состояния имеет вид комплексной матрицы 3×3 , а 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 наличием только куперовских пар $\uparrow\uparrow$ (*A*-фаза представляет собой конденсат одинакового числа пар $\uparrow\uparrow$ и $\downarrow\downarrow$).

Для изучения влияния примесей на сверхтекучий ^3He используют аэрогели высокой пористости. Так, при использовании нематических аэрогелей методом ЯМР в низком магнитном поле была открыта новая сверхтекучая фаза ^3He — *полярная* фаза [1]. В нематическом аэрогеле (см. рис. 1) нити ориентированы преимущественно вдоль одного направления [2], что приводит к анизотропному рассеянию квазичастиц ^3He [3] и 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). Для реализации этой новой фазы необходимо предварительное покрытие нитей несколькими атомными слоями ^4He , чтобы создать зеркальные граничные условия для рассеяния квазичастиц ^3He . В высоком магнитном поле сверхтекучий переход в аэрогеле (T_{ca}) расщепляется на два перехода, происходящих при разных температурах ($T_{p2} < T_{ca} < T_{p1}$), между которыми реализуется другая сверхтекучая фаза — *бета* фаза [5,6], которая содержит только куперовские пары $\uparrow\uparrow$, в отличие от *полярной* фазы, где пары $\uparrow\uparrow$ и $\downarrow\downarrow$ находятся в одинаковом соотношении (аналогично с *A*- и A_1 -фазами).

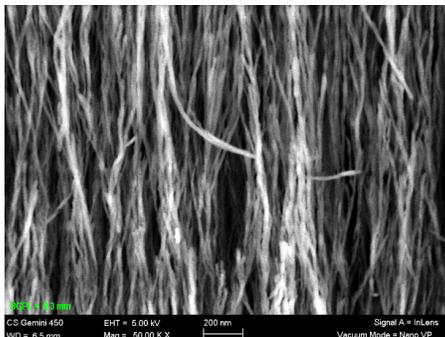


Рис. 1. Фотография СЕМ поверхности нематического аэрогеля

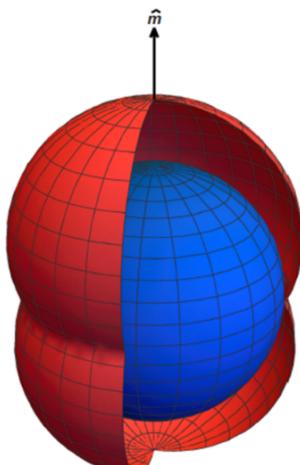


Рис. 2. Энергетическая щель в *полярной* и *бета* фазах. Направление орбитального вектора \mathbf{m} параметра порядка фиксируется вдоль нитей.

В случае чистого ${}^3\text{He}$ (без добавления ${}^4\text{He}$) нити аэрогеля покрываются твердым парамагнитным слоем ${}^3\text{He}$, который создает диффузный характер рассеяния квазичастиц ${}^3\text{He}$ и включает еще магнитный канал рассеяния. В результате фазовая диаграмма для ${}^3\text{He}$ в нематическом аэрогеле существенно меняется: вблизи T_{ca} вместо полярной фазы реализуется уже чистая *A*-фаза, а температура сверхтекучего перехода T_{ca} оказывается заметно более подавлена [7]. В данной работе с помощью вибрирующей проволоочки с приклеенным к ней образцом нематического аэро-

геля, погруженной в жидкий чистый ^3He и помещенной в высокое магнитное поле (вплоть до 20 кЭ), был обнаружен нелинейный рост “верхней” температуры сверхтекучего перехода от величины магнитного поля. Причем этот рост подавлен по сравнению со случаем объемной A_1 -фазы, что мы связываем с влиянием магнитного канала рассеяния, который рассматривался в ранних теоретических работах для случая ^3He в изотропном кремниевом аэрогеле. Мы видим существенное количественное расхождение наших экспериментальных данных с теоретическими предсказаниями.

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., Маргынов 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., Melnikovsky 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] Суrowцев Е. В. *ЖЭТФ* **155**, 554 (2019).
- [6] Dmitriev V. V., Kutuzov M. S., Soldatov A. A., Yudin A. N. *Phys. Rev. Lett.* **127**, 265301 (2021).
- [7] Dmitriev V. V., Soldatov A. A., Yudin A. N. *Phys. Rev. Lett.* **120**, 075301 (2018).

Спиновая накачка в гибридных структурах сверхпроводник/ферромагнитный диэлектрик

Я. В. Туркин^{1,2}, Н. Г. Пугач¹

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

²Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского,
просп. Академика Вернадского, 4, г. Симферополь, Россия

Гибридные структуры типа сверхпроводник/ферромагнетик привлекают большой интерес в связи с большим временем спиновой релакса-

ции и возможностями создания и управления спиновыми токами и спиновой плотностью. Индуцирование спиновых токов в сверхпроводнике открывает широкие возможности для проектирования элементной базы сверхпроводящей спинтроники. В данной работе мы рассматриваем гибридную структуру ферромагнитный изолятор/сверхпроводник, притом, однородная намагниченность в ферромагнетике прецессирует с некоторой постоянной частотой. Прецессия намагниченности в слое ферромагнитного диэлектрика позволяет инжектировать чистый спиновый ток в сверхпроводник на глубину, намного превышающую таковую в нормальном металле. Кроме того, в сверхпроводнике также наблюдается нестационарная наведенная намагниченность, возникающая из-за динамического процесса конверсии синглетных куперовских пар в триплетные на интерфейсе, аналогично стационарному обратному эффекту близости [1, 2]. Динамический обратный эффект близости рассмотрен в адиабатическом приближении, предполагается, что частота прецессии намагниченности много меньше энергии сверхпроводящего параметра порядка. Показано, что чистые спиновые токи внутри сверхпроводящего слоя возникают из-за адиабатической прецессии намагниченности, а их спиновая ориентация коллинеарна с направлением прецессирующей намагниченности (рис. 1,а).

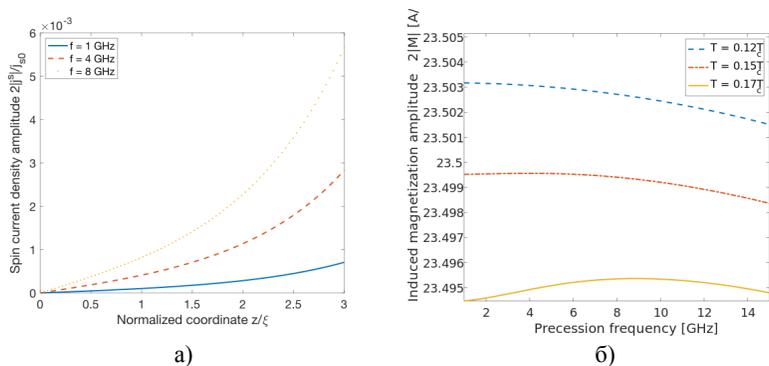


Рис. 1. Распределение спинового тока слоя сверхпроводника (а). Зависимость наведенной намагниченности от частоты на интерфейсе сверхпроводник/ферромагнитный диэлектрик (б)

Также проанализировано влияние спиновой накачки сверхпроводника на динамику квазичастиц: продемонстрировано возникновение мак-

симула наведенной намагниченности на интерфейсе в зависимости от частоты прецессии намагниченности (рис. 1,б), которое может быть объяснено накачкой квазичастиц. Было также показано, что спиновая функция распределения квазичастиц симметрично расщепляется вблизи сверхпроводящей щели, что может иметь нетривиальные последствия для систем с нарушенной электронно-дырочной симметрией. Приведенные результаты были получены из численного решения линеаризованного нестационарного уравнения Узаделя.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации, Мегагрант № 075-15-2022-1108.

Список литературы

- [1] Turkin Y. V. Spin dynamics in superconductor/ferromagnetic insulator hybrid structures with precessing magnetization / Y. V. Turkin, N. Pugach // *Beilstein J. Nanotechnol.* 2023. 14. P. 233–239.
- [2] Динамический эффект близости в гибридных структурах сверхпроводник/ферромагнитный диэлектрик / Я. В. Туркин, Н. Г. Пугач, Е. Г. Екомасов, Б. Г. Львов // *Физика металлов и металловедение.* 2023. Т. 124. №. 1. С. 42–48.

Магнитные примеси и состояние Ларкина Имри Ма при триплетном куперовском спаривании

И. А. Фомин

ИФП РАН, г. Москва, Россия

Триплетным называют такой тип спаривания, при котором куперовские пары имеют спин $s = 1$. Такое спаривание реализуется в сверхтекучем ${}^3\text{He}$ при температурах порядка 1 мК. Есть экспериментальные указания на то, что в урановом соединении UTe_2 также спаривание — триплетное, но это происходит уже при температуре порядка 1 К. Представляет интерес вопрос о влиянии примесей (в первую очередь магнитных) на свойства таких систем. В сверхтекучем ${}^3\text{He}$ экспериментальная ситуа-

ция более определенная и в дальнейшем будет конкретно обсуждаться именно этот объект. Роль примесей в жидком ^3He играют высокопористые аэрогели. Они становятся магнитными примесями, если на образующих аэрогель волокнах осажден слой твердого парамагнитного ^3He . Стандартный подход к теоретическому исследованию триплетных сверхпроводников состоит в применении к ним теории сверхпроводящих сплавов Абрикосова и Горькова. Эта теория — среднеполевая. Сверхпроводящая фаза описывается параметром порядка, усредненным по ансамблю примесей, а нормальная фаза — некоторым ядром, усредненным по тому же ансамблю. Классификация возможных сверхтекучих фаз определяется симметрией нормальной фазы, опять-таки усредненной. Если аэрогель изотропный, то классификация фаз такая же как и в случае отсутствия примесей. Если аэрогель нематический, то симметрия аксиальная. Фазы с необычным типом спаривания обычно обладают анизотропным параметром порядка. Это приводит к дополнительному вырождению состояния по отношению к ориентации параметра порядка, что в свою очередь приводит к возрастанию роли флуктуационных эффектов и к возникновению пространственно неоднородного состояния с длинноволновыми флуктуациями. Такие состояния называют состояниями Ларкина, Имри, Ма (сокращенно ЛИМ). ЛИМ-состояние А-подобной фазы сверхтекучего ^3He в немагнитном аэрогеле, когда случайным образом изменяется ориентация орбитальной части параметра порядка, изучено теоретически и экспериментально. ЛИМ-состояние с флуктуирующей спиновой частью до сих пор не исследовалось. Теоретическое исследование такого состояния и является целью представленной работы.

Детектирование граничных условий для сверхтекучего ^3He в нематическом аэрогеле

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

Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН

E-mail: yudin@kapitza.ras.ru

Новая сверхтекучая фаза ^3He , полярная фаза, которую ранее удалось стабилизировать и исследовать при сверхнизких температурах порядка 1 мК в нематическом аэрогеле [1], уже привела к наблюдению многих

новых явлений [2, 3]. Важным условием существования полярной фазы является покрытие нитей аэрогеля гелием-4 [4], вытесняющим твердый парамагнитный ^3He с поверхности. Наличие твердого парамагнитного слоя в чистом ^3He приводит к диффузному характеру отражения квазичастиц от поверхности, а также к появлению магнитного рассеяния, при котором спин рассеиваемой частицы не сохраняется.

В описываемых здесь ЯМР-экспериментах [5] удалось реализовать неполное покрытие поверхности нитей аэрогеля гелием-4 (2.3 поверхностных атомарных слоя вместо 3). В этом случае характер рассеяния фермиевских квазичастиц ^3He менялся в зависимости от давления. Изменение режимов рассеяния детектировалось по подавлению температуры сверхтекучего перехода (рис. (a)) и изменению степени полярного искажения сверхтекучей фазы ^3He в аэрогеле. Параллельно с ЯМР измерялись резонансные свойства погруженного в ^3He кварцевого резонатора, которые также зависели от характера рассеяния квазичастиц (рис. (b)). Полученные данные сравнивались с предельными случаями – полное покрытие нитей аэрогеля гелием-4 (3 поверхностных атомарных слоя) и без покрытия (чистый гелий-3). Проведенные эксперименты показали, что свойства сверхтекучего ^3He в нематическом аэрогеле и параметры кварцевого резонатора очень чувствительны к реализуемым граничным условиям, и мы предполагаем, что магнитный канал рассеяния может играть важную роль в наблюдаемых явлениях.

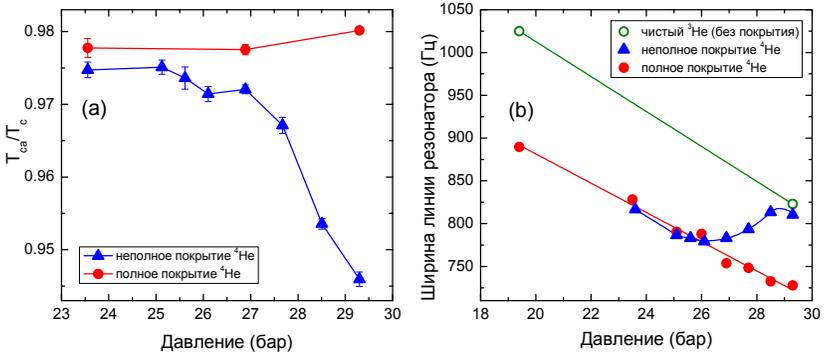


Рис. 1. Изменение температуры сверхтекучего перехода и ширины резонансной линии кварцевого резонатора при изменении типа рассеяния квазичастиц гелия-3

Список литературы

- [1] Dmitriev V. V., Senin A. A., Soldatov A. A., Yudin A. N., *Phys. Rev. Lett.* **115**, 165304 (2015).
- [2] Autti S., Dmitriev V. V., Mäkinen J. T. et al., *Phys. Rev. Lett.* **117**, 255301 (2016).
- [3] Mäkinen J. T., Dmitriev V. V., Nissinen J. et al., *Nat. Commun.* **10**, 237 (2019).
- [4] Dmitriev V. V., Soldatov A. A., Yudin A. N., *Phys. Rev. Lett.* **120**, 075301 (2018).
- [5] Dmitriev V. V., Eltsov V. B., Rysti J., Soldatov A. A., Yudin A. N., *J. Low Temp. Phys.* **208**, 3 (2022).

СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫЕ СИСТЕМЫ

Модель Хаббарда во внешнем магнитном поле в приближении Гинзбурга-Ландау

Л. Б. Дубовский, С. Н. Бурмистров

*НИИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия
E-mail: ldubovskii@mail.ru*

Традиционная электронная теория металлов исходит из слабо взаимодействующих электронов, движущихся в периодическом кристаллическом поле [1] и описываемых стандартной зонной теорией. Согласно зонной теории металлов различные оксиды переходных металлов должны быть проводниками, поскольку имеют нечетное число электронов на элементарную ячейку. Характерной системой такого рода является оксид никеля NiO. Однако на примере оксида никеля выяснили, что такие соединения фактически ведут себя как изоляторы. Мотт [2] предсказал, что эту аномалию можно объяснить включением кулоновского взаимодействия между электронами и предложил модель для NiO в качестве примера изолятора. Такое поведение получило название моттовского изолятора. Изоляторы Мотта возникают, когда отталкивающий кулоновский потенциал между электронами достаточно велик, чтобы создать энергетическую щель.

Наиболее простой подход к этой проблеме представляет собой модель Хаббарда 1963 г. [3]. Существенный результат модели Хаббарда состоит в том, что зоны проводимости, возникающие в стандартной электронной теории металлов, при половинном заполнении оказываются расщепленными на две подзоны (зоны Хаббарда). При этом нижняя подзона оказывается полностью заполненной электронами проводимости, а верхняя оказывается полностью пустой. Между этими двумя подзонами возникает энергетическая щель.

В данной работе изучается зона Хаббарда во внешнем магнитном поле. Ее анализ проводится феноменологически в рамках теории Гинзбурга–Ландау с параметром порядка, описывающим электроны с проти-

воположными спинами (ср. [4]). Рассмотрение проведено для случая близкого к половинному заполнению нижней зоны Хаббарда, находящейся в металлическом состоянии. Возникающие уравнения, которые являются уравнениями Паули для противоположных спинов и к тому же нелинейными в результате взаимодействия электронов с различными спинами, удается аналитически решить в ряде важных случаев. Определено критическое магнитное поле, при котором рассматриваемый металл переходит в состояние изолятора как в случае парамагнитного эффекта спинов, так и в случае эффекта орбитального движения электронов проводимости. Найдено поверхностное натяжение между исходным металлом и возникающим изолятором аналогично [5]. Проанализирована возможность возникновения волны спиновой плотности электронов во внешнем статическом магнитном поле.

Список литературы

- [1] Абрикосов А. А. Основы теории металлов. М.: Наука, (1987).
- [2] Mott N. F. *Proc. Phys. Soc. A* 62, 416 (1949).
- [3] Hubbard J. *Proc. Roy. Soc. A* 276, 238 (1963).
- [4] Дубовский Л. Б. Письма ЖЭТФ 99, 25 (2014).
- [5] Dubovskii L. B. *J. Low. Temp. Phys.* 182, 192 (2016); *Physica B* 536, 469 (2018); *J. Phys.: Conf. Ser.* 2164, 021071 (2022).

Low-dimensional spin lattices in Cu_2F_5 and $\text{Cu}_2\text{F}_{5-x}$

D. M. Korotin¹, D. Y. Novoselov^{1,2}, V. I. Anisimov^{1,2}

¹*M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, 18 S. Kovalevskaya St., Yekaterinburg, Russia*

²*Department of Theoretical Physics and Applied Mathematics, Ural Federal University, 19 Mira St., Yekaterinburg, Russia*

Cuprates are well-known objects for the low-dimensional magnetism appearance. With such structural building blocks as CuO_6 octahedra and CuO_4 plaquettes, and due to the presence of copper ion in d^9 electronic configuration, there is a variety of magnetic structures. In this work, the electronic and magnetic structure, including the Heisenberg model exchange interaction parameters, was explored for the recently proposed [1] novel cuprate Cu_2F_5 . Us-

ing the DFT+U calculation, it is shown that the compound is formed by two types of copper ions with d^9 and d^8 electronic configurations.

We have found a very stable antiferromagnetic ordering with strong anisotropy of exchange interaction that results in the appearance of an unusual 2D-magnetism: within the (100)-plane the exchange between the $S = 1$ and $S = 1/2$ Cu ions has almost the same strength as between the two $S = 1$ ions. The interplane magnetic interaction is five times weaker than the in-plane one.

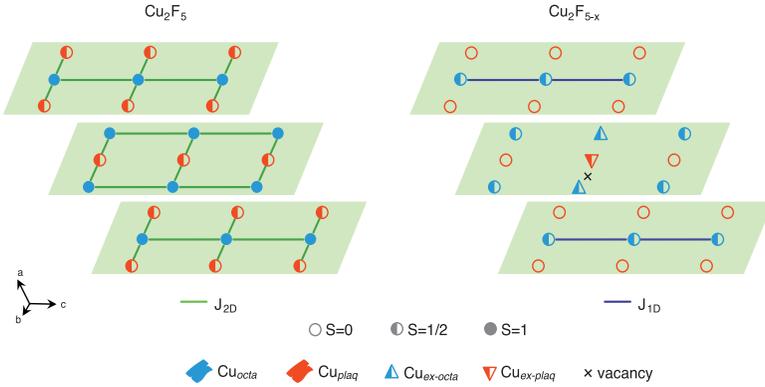


Fig. 1. Evolution of spin-states and patterns of the exchange interaction between the Cu ion from Cu_2F_5 (left) to $\text{Cu}_2\text{F}_{5-x}$ (right). Blue elements denote Cu ions in the octahedral surrounding, red elements denote Cu ions in the center of fluoride plaquettes. The blue and red half-filled triangles correspond to $\text{Cu}_{\text{ex-octa}}$, $S = \frac{1}{2}$ and $\text{Cu}_{\text{ex-plaq}}$, $S = \frac{1}{2}$ ions respectively. The filled, half-filled and empty circles denote $S = 1$, $S = \frac{1}{2}$, and $S = 0$ spin-states of the ions. The (100) lattice planes are shown with a light green color for an eye guide. The vacancy position is shown with a black cross. The strongest exchange interactions are J_{2D} in Cu_2F_5 (green line) and J_{1D} in $\text{Cu}_2\text{F}_{5-x}$ (violet line). Other exchange interactions are negligible. Fluorine ions are not shown for clarity

Next, we predict [3] that the existence of 5 % vacancies in the fluoride sublattice of Cu_2F_5 results in the drastic transformation of the spin-state of all copper ions and the final spin-states are $S = \frac{1}{2}$ and $S = 0$. Consequently, the anisotropy of magnetic interactions increases, and the 1D linear chains of the

Cu d^9 , $S = \frac{1}{2}$ ions appear with doping. We also propose a microscopic mechanism of such exchange interaction transformation via CuO₆ octahedra elongation.

Results were obtained with the support of the Russian Science Foundation (project No. 19-12-00012).

Список литературы

- [1] Rybin N., Novoselov N., Korotin D. M., Anisimov V. I., and Oganov A. R., *Phys. Chem. Chem. Phys.* 23, 15989 (2021).
- [2] Korotin D. M., Novoselov D. Y., Anisimov V. I., and Oganov A. R., *Phys. Rev. B* 104, 064410 (2021).
- [3] Korotin D. M., Novoselov D. Y., and Anisimov V. I., arXiv: 2301.00396 (2023).

Магнитные и спектральные свойства антимонидов редкоземельных элементов

А. В. Лукоянов^{1,2,*}, С. Т. Байдак², Ю. В. Князев¹, Ю. И. Кузьмин¹

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

²*Уральский федеральный университет имени первого
Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия*

*E-mail: lukoyanov@imp.uran.ru

Теоретически и экспериментально исследованы свойства антимонидов RSb, где R — редкоземельные элементы Gd, Tb, Dy и др. Электронная структура соединений для разных спиновых проекций была получена в теоретических расчетах с учетом сильных электронных корреляций в 4f оболочке редкоземельных ионов. Рассмотрено влияние спин-орбитального взаимодействия на электронную структуру изучаемых соединений. Получено, что соединения GdSb, TbSb и DySb являются полуметаллами [1, 2]. В зонной структуре обнаружены заполненные и пустые состояния, образующие полуметаллическое состояние, для двух выделенных высокосимметричных направлений в обратном пространстве. Рассчитанная зонная структура находится в хорошем согласии с известными экспериментальными данными. Магнитные свойства антимонидов RSb в значительной

степени зависят от типа редкоземельного элемента в составе RSb. В теоретических расчетах показано, что значения полных магнитных моментов антимолибидов близки к опубликованными экспериментальными значениями для всех соединений [1]. Методом спектроскопической эллисометрии исследованы антимолибиды GdSb и TbSb [2], получены энергетические зависимости действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости. Аномальное поведение оптических характеристик в инфракрасном диапазоне объясняется полуметаллическими свойствами исследованных антимолибидов. Экспериментальные спектры оптической проводимости хорошо согласуются с теоретическими вкладами в оптическую проводимость от межзонных переходов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-42-02021.

Список литературы

- [1] Baidak S. T., Lukoyanov A. V. *Mater.*, **16**, 242 (2023).
- [2] Knyazev Yu. V., Kuz'min Yu. I., Baidak S. T., Lukoyanov A. V. *Solid State Sci.*, **136**, 107085 (2023).

Магнитные свойства и электронная структура интерметаллидов $GdMn_{1-x}Ru_xSi$ с учетом электронных корреляций

Р. Д. Мухачев^{1*}, А. В. Лукоянов^{1,2}

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

²*Уральский федеральный университет имени первого
Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия*

^{*}*E-mail: r.d.mukhachev@imp.uran.ru*

Интерметаллические соединения на основе редкоземельных и переходных металлов, а также р-элементов, представляют большой интерес благодаря сочетанию разнообразных магнитных, транспортных и спектральных свойств, которые сохраняются до достаточно высоких температур [1,2]. В соединении GdMnSi обнаружены магнитные переходы при

температурах 50, 275 и 310–325 К [3]. Для некоторых тройных интерметаллических соединений на основе гадолиния обнаружено, что частичная замена переходного металла может приводить к повышению температуры Кюри [4]. В нашей работе были выполнены расчеты электронной структуры и магнитных свойств интерметаллидов $\text{GdMn}_{1-x}\text{Ru}_x\text{Si}$ для x в интервале значений от 0 до 1, детали расчетов представлены в работе [2]. Был применен метод GGA+U, благодаря которому сильные электронные корреляции в 4f-оболочке ионов гадолиния были учтены. Для ионов Gd величины магнитных моментов, полученные в результате самосогласованных расчетов, составили около $7 \mu_B$ на ион Gd. Такая же величина полного магнитного момента получена для GdRuSi , так как вклад от Ru и Si в этом соединении мал, что согласуется с результатами магнитных измерений [2]. Магнитный момент ионов Mn в $\text{GdMn}_{1-x}\text{Ru}_x\text{Si}$ изменяется от 2.2 до 2.75 μ_B в зависимости от состава, что приводит к уменьшению полного магнитного момента в $\text{GdMn}_{1-x}\text{Ru}_x\text{Si}$ при уменьшении x . Минимальное значение полного магнитного момента получено в расчетах для GdMnSi равным 4.86 $\mu_B/\text{форм.ед.}$ Расчеты показали, что соединения данного класса отличаются не только магнитными свойствами, но и электронной структурой. Электронные состояния около энергии Ферми определяются в первую очередь электронными состояниями переходных металлов. При замещении ионов Mn на ионы Ru, плотности электронных состояний вблизи энергии Ферми значительно меняются, особенно в одной из спиновых проекций GdMnSi , что должно отразиться в изменении транспортных свойств. Значительные изменения магнитных и транспортных свойств рассмотренных интерметаллидов интересны для применения, например, в многослойных магнитных структурах для спинтроники и микроэлектроники.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 18-72-10098.

Список литературы

- [1] Gupta S., Suresh K. G., *J. Alloys Comp.* 618, 562 (2015).
- [2] Kuchin A. G., Platonov S. P., Mukhachev R. D., Lukoyanov A. V., Volegov A. S., Gaviko V. S., Yakovleva M. Yu., *Metals* 13, 290 (2023).
- [3] Nikitin S. A., Ivanova T. I., Ovchenkova Y. A., Maslennikova M. V., Burkhanov G. S., Chistyakov O. D., *Phys. Solid State* 44, 308 (2002).
- [4] Kuchin A. G., Platonov S. P., Lukoyanov A. V., Volegov A. S., Gaviko V. S., Mukhachev R. D., Yakovleva M. Yu., *Intermetallics* 133, 107183 (2021).

Взаимодействующие межузельные электроны в электриде $[\text{Ca}_{12}\text{Al}_{14}\text{O}_{32}]^{2+}(\text{e}^-)_2$

Д. Ю. Новосёлов¹, Д. М. Коротин¹, М. А. Мазанникова¹,
А. О. Шориков¹, В. И. Анисимов¹

¹*Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия*

Электриды содержат межузельные электроны с состояниями, пространственно отделёнными от состояний кристаллического каркаса и образующими обособленную электронную подсистему. В майените $[\text{Ca}_{12}\text{Al}_{14}\text{O}_{32}]^{2+}(\text{e}^-)_2$ межузельные электроны образуют уникальную зарядовую сеть, в которой сосуществуют локализация и делокализация, указывая на важность исследования многочастичной природы электридных состояний. Энергетические состояния межузельных электронов полностью формируют зонную структуру в окрестности уровня Ферми и ответственны за транспортные свойства данного материала.

Все функции Ванье, спроектированные на межузельные состояния, полученные в результате DFT расчётов (рис. 1), имеют одинаковую заселённость, которая меньше половинного заполнения ($1/3e$). Плотность состояний в окрестности уровня Ферми является монотонной, что противоречит экспериментальным данным по рентгеновской фотоэмиссионной спектроскопии высокого разрешения [1]. Бэйдер анализ зарядовой плотности, полученной из DFT, не обнаруживает неядерные аттракторы, что не соответствует электридной природе этой системы. Кроме того, знак коэффициента Зеебека, вычисленный на основании DFT расчётов с помощью полуклассического метода Больцмана, указывает на то, что основным типом носителей заряда в майените являются электроны, в то время как экспериментально установлено, что это дырки [2]. Для разрешения этих противоречий, предполагая, что их причина кроется в тенденции DFT к излишней делокализации зарядовой плотности и ошибке самодействия, мы провели исследования электронной структуры электрида майенита с учётом многочастичных корреляционных эффектов.

Используя метод DFT+DMFT, мы показали наличие явной тенденции к локализации и антиферромагнитному спариванию электронов в электриде $[\text{Ca}_{12}\text{Al}_{14}\text{O}_{32}]^{2+}(\text{e}^-)_2$. Наблюдаемый эффект основан как на сильной гибридизации между межузельными электронными состояниями, которая снимает вырождение с электронной подсистемы и приводит

к образованию синглетного состояния на связывающей молекулярной орбитали, так и на наличии кулоновского взаимодействия между электронами на электридных состояниях.

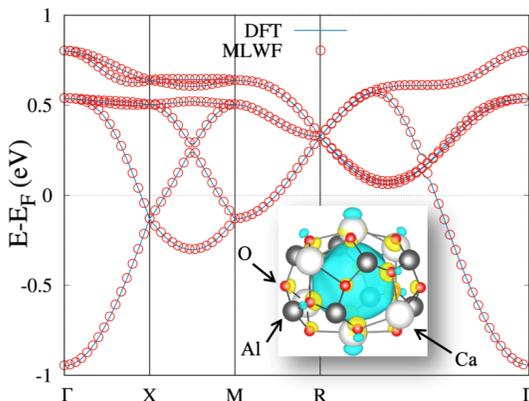


Рис. 1. DFT зонная структура $[\text{Ca}_{12}\text{Al}_{14}\text{O}_{32}]^{2+}(\text{e}^-)_2$ относительно уровня Ферми (EF). Вклад в блоховские состояния от максимально локализованных функций Ванье с центрированных в междоузлиях показан красными кружками. (Вставка: изоповерхность пространственного распределения максимально локализованной функции Ванье в кристаллической полости)

Часть электронов при этом сохраняет частично делокализованный характер, обеспечивая ненулевую плотность состояний на уровне Ферми и металлическую проводимость. Этот эффект приводит к формированию экспериментально наблюдаемого пика в валентной зоне чуть ниже уровня Ферми (рис. 2). Таким образом, мы обнаружили, что многочастичные корреляционные эффекты в подпространстве электридной зарядовой сети являются частью физики, которая определяет важные свойства этого материала, в том числе транспортные. Кроме того, локализация междоузельных электронных состояний сопровождается локальными искажениями кристаллических полостей, в которых располагаются избыточные электроны. Учёт этого эффекта позволяет воспроизвести правильный знак коэффициента Зеебека, соответствующий экспериментальным наблюдениям.

Авторы работы благодарят за поддержку Российский Научный Фонд (грант РФФ № 19-12-00012).

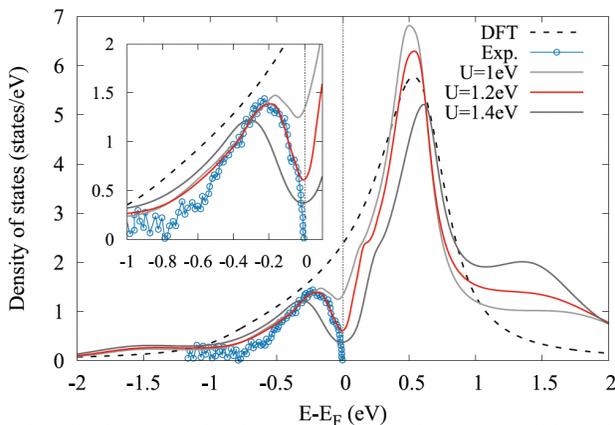


Рис. 2. Полная плотность электродных состояний, полученная методами DFT (черная пунктирная линия) и методом DMFT с различными значениями U (сплошные линии), а также экспериментальные данные [1], отмеченные синими кружками. (Вставка: увеличенная область ниже уровня Ферми)

Список литературы

- [1] Kim S. W., Tarumi R., Iwasaki H., Ohta H., Hirano M., Hosono H. Thermal conductivity and Seebeck coefficient of mayenite $12\text{CaO} \cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$ with a cage structure. *Phys. Rev. B* 2009, 80, 075201.
- [2] Souma S., Arakane T., Sato T., Takahashi T., Wng Kim S., Matsuishi S., Hosono H. Direct Evidence for Cage Conduction Band in Superconducting Cement $12\text{CaO} \cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$ by Low-Energy High-Resolution Photoemission Spectroscopy. *J. Phys. Soc. Jpn.* 2010, 79, 103704.

Электронная зонная структура и антиферромагнетизм в La_2CuO_4

В. Г. Орлов, Г. С. Сергеев

НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия

Соединение La_2CuO_4 традиционно рассматривалось как система с сильными корреляциями в Cu-O_2 плоскостях [1]. Данная точка зрения была обусловлена неспособностью метода функционала электронной

плотности (Density Functional Theory (DFT)) с использованием обменно-корреляционного функционала в приближении локальной плотности [2] получить антиферромагнитное (АФМ) основное состояние La_2CuO_4 с полупроводниковой щелью. Лишь относительно недавно появилась работа [3], в которой были получены значения $M_{\text{Cu}} = 0.49 \mu_{\text{B}}$ и $E_{\text{g}} = 1.0$ эВ с помощью расчетов, проведенных в рамках DFT с обменно-корреляционным функционалом SCAN [4], не использующим дополнительных параметров типа кулоновской энергии отталкивания U d -электронов Cu. Особенность функционала SCAN состоит в том, что он учитывает не только электронные спиновые плотности и их градиенты, но также и плотность кинетической энергии электронов, рассчитанную с помощью Кон–Шэмовских орбиталей.

В нашей работе в рамках метода DFT с помощью комплекса программ WIEN2k [5] выполнены расчеты электронной зонной структуры орторомбической фазы La_2CuO_4 . Вычисления проводились с использованием обменно-корреляционного функционала, который представлял собой сумму модифицированного Траном и Блахой обменного потенциала Беке и Джонсона [6] (mBJ) и корреляций в локальном приближении [7]. Обменный потенциал mBJ, так же как и функционал SCAN, учитывает плотность кинетической энергии электронов и использовался нами ранее для расчетов электронной зонной структуры и анализа особенностей в распределении зарядовой плотности в высокотемпературных сверхпроводниках [8] и халькогенидах висмута и сурьмы [9, 10] с необычными магнитными свойствами. Параметры решетки и координаты позиций атомов в элементарной ячейке брались равными экспериментальным значениям [11]. Для расчетов со спиновой поляризацией решетка орторомбического La_2CuO_4 , описываемая симметрией пространственной группы C_{2vc} , была разбита на две подрешетки. Атомы Cu, занимавшие в орторомбической элементарной ячейке позиции типа 4a с координатами (0,0,0), (0,1/2,1/2), (1/2,1/2,0), (1/2,0,1/2), разделились на 2 типа — Cu(1) и Cu(2). Атомы Cu(1) в первой подрешетке располагаются в позициях типа 2a с координатами (0,0,0) и (0,1/2,1/2), а атомы Cu(2) во второй подрешетке — в позициях типа 2d с координатами (1/2,0,1/2) и (1/2,1/2,0). Остальные атомы, входящие в состав La_2CuO_4 и занимающие восьмикратные позиции в орторомбической фазе, стали занимать четырехкратные позиции типа 4e в двух подрешетках: La(1), O(1) и O(2) — в первой подрешетке и La(2), O(3) и O(4) — во второй подрешетке. Магнитный момент атомов Cu(1) первой подрешетки, в соответствии с экспериментальными

данными [12], был параллелен положительному направлению оси c , а у атомов $\text{Cu}(2)$ второй подрешетки магнитный момент был направлен в противоположную сторону. Расчеты с учетом спиновой поляризации выявили наличие АФМ основного состояния орторомбического La_2CuO_4 с полупроводниковой щелью $E_g = 2$ эВ и магнитным моментом у атомов меди $M_{\text{Cu}} = 0.725\mu_B$.

Результаты расчетов электронной структуры орторомбической модификации La_2CuO_4 с учетом спиновой поляризации представлены на рис. 1 в виде вкладов в плотность энергетических состояний (DOS) от электронов каждого типа атомов, входящих в состав соединения. Следует отметить, что обменный потенциал $m\text{BJ}$ дает энергетическую щель $E_g \sim 2$ эВ только при учете спиновой поляризации. Полученная теоретическая величина E_g находится в согласии с экспериментальными спектроскопическими данными [13]. Ширина ~ 7 эВ и состав электронных состояний верхней валентной полосы в АФМ La_2CuO_4 (d -электроны двух сортов меди $\text{Cu}(1)$ и $\text{Cu}(2)$, p -электроны всех сортов кислорода $\text{O}(1)$, $\text{O}(2)$ и $\text{O}(3)$, $\text{O}(4)$) хорошо согласуются с результатами рентгеновской (XPS) и ультрафиолетовой (UPS) фотоэлектронных спектроскопий орторомбической фазы La_2CuO_4 [14].

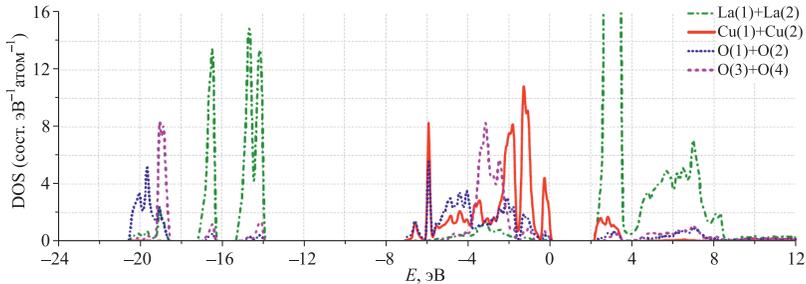


Рис. 1. Плотности энергетических состояний для электронов атомов, входящих в состав орторомбической фазы La_2CuO_4 , рассчитанные с учетом спиновой поляризации

Энергии (14–17 эВ) $5p$ валентных состояний $\text{La}(1)$ и $\text{La}(2)$, а также $2s$ валентных электронов всех сортов кислорода (~ 19 – 20 эВ) находят подтверждение в XPS и UPS спектрах сверхпроводящих образцов $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4-\delta}$ [15]. К валентным состояниям следует отнести и $5s$ электроны La с энергией ~ 30 эВ, DOS которых не показана на рис. 1. Эти

электроны участвуют в межзонных переходах, проявляющихся в оптических свойствах [16]. Незаполненные состояния электронов в зоне проводимости АФМ La_2CuO_4 на рис. 1 представлены $4f$ (2–4 эВ) и $5d$ (4–8.5 эВ) электронами La, $3d$ (2–3.5 эВ) электронами Cu и $2p$ (2–3.5, 4–8 эВ) электронами O.

Корректность найденных энергий состояний электронов зоны проводимости проверена нами путем сравнения результатов теоретических расчетов оптических свойств La_2CuO_4 , чувствительных к межзонным переходам, и экспериментальных данных для функции энергетических потерь электронов [13], а также действительной части оптической проводимости и коэффициента отражения [16].

Отметим, что в нашей работе, так же как в работе [3], АФМ состояние La_2CuO_4 в методе функционала плотности было получено без привлечения дополнительных параметров, описывающих сильные корреляции в электронной подсистеме. Причем в нашей работе, в отличие от работы [3], в которой основное внимание было уделено валентным d -электронам меди и p -электронам кислорода, найдены вклады валентных электронов всех атомов, включая La, в плотность электронных состояний орторомбической АФМ фазы La_2CuO_4 в области энергий от -30 до $+15$ эВ.

Список литературы

- [1] Hybertsen M. S., Schlüter M., Christensen N. E., *Phys. Rev. B* **39**, 9028 (1989).
- [2] Zaanen J., Jepsen O., Gunnarsson O. et al. *Physica C* **153-155**, 1636 (1988).
- [3] Lane C., Furness J. W., Buda I. G. et al. *Phys. Rev. B* **98**, 125140 (2018).
- [4] Sun J., Ruzsinszky A., Perdew J. P., *Phys. Rev. Lett.* **115**, 036402 (2015).
- [5] Blaha P., Schwarz K., Madsen G. K. H. et al. *WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties* (Karlheinz Schwarz, Vienna University of Technology, Austria, 2021).
- [6] Tran F., Blaha P., *Phys. Rev. Lett.* **102**, 226401 (2009).
- [7] Perdew J. P., Wang Y., *Phys. Rev. B* **45**, 13244 (1992).
- [8] Orlov V. G., Sergeev G. S., *Physica B* **536**, 839 (2018).
- [9] Orlov V. G., Sergeev G. S., *JMMM* **475**, 627 (2019).
- [10] Кравченко Э. А., Орлов В. Г., Сергеев Г. С., *ЖЭТФ* **158**, 876 (2020).
- [11] Hord R., Cordier G., Hofmann K. et al., *Z. Anorg. Allg. Chem.* **637**, 1114 (2011).
- [12] Vaknin D., Sinha S. K., Moncton D. E. et al., *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2802 (1987).
- [13] Terauchi M., Tanaka M., *Micron* **30**, 371 (1999).
- [14] Takahashi T., Maeda F., Katayama-Yoshida H. et al., *Phys. Rev. B* **37**, 9788 (1988).

- [15] Shen Z.-X., Allen J. W., Yeh J. J. et al., *Phys. Rev. B* **36**, 8414 (1987).
 [16] Uchida S., Ido T., Takagi H. et al., *Phys. Rev. B* **43**, 7942 (1991).

Исследование двумерной модели локальных бозонов квантовым методом Монте-Карло

В. С. Рюмшин*, В. А. Улитко, Ю. Д. Панов

Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

**E-mail: vitaliy.riumshin@urfu.ru*

Бозонные модели широко используются для описания систем, демонстрирующих нетривиальную фазовую диаграмму с конкурирующими или смешанными состояниями. Различные варианты этих моделей в настоящее время используются для описания характеристик большого числа физических систем, включая высокотемпературные сверхпроводники [1], магнитные изоляторы во внешнем поле [2] и многие другие. Интерес к этим моделям возрос в последние годы после открытия сосуществования зарядового упорядочения и сверхпроводимости в купратах [3].

Мы рассматриваем двумерную модель локальных бозонов с гамильтонианом:

$$H = V \sum_{i,j} n_i n_j - t \sum_{i,j} (a_i^+ a_j + a_j^+ a_i) - \mu \sum_i n_i, \quad (1)$$

где a_i^+ , a_j — операторы рождения (уничтожения) локального бозона, n — оператор числа частиц, V — кулоновское отталкивание ближайших соседей, t — интеграл переноса и μ — химический потенциал.

Эта модель эквивалентна анизотропной XXZ модели со спином 1/2 в магнитном поле. Бозонная модель исследует роль корреляций в возникновении упорядоченных фаз многих квантово-механических частиц и природу квантовых фазовых переходов между этими фазами.

Однако существует проблема, связанная с появлением области фазового расслоения между сверхтекучей и твердой фазами [4]. Расчеты в рамках среднего поля и приближения Бете не предсказывают появление «критической линии» [5], в отличие от моделирования квантовым методом Монте-Карло.

Целью данной работы является построение фазовых диаграмм, определение характера перехода порядок-беспорядок при разных отношениях V/t и уточнение результатов работы [4], в которых изучалась бозонная модель в различных вариациях квантового Монте-Карло.

Исследование проводилось с использованием квантового метода Монте-Карло (SSE — Stochastic Series Expansion) с операторно-петлевым алгоритмом [6]. Моделирование проводилось для решеток размером до 96×96 . Для возможности исследования модели локальных бозонов, опираясь на работы [6, 7], взятая за основу расчетная программа для модели Гейзенберга была адаптирована путем реализации нового петлевого алгоритма на языке программирования C++.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект FEUZ-2023-0017.

Список литературы

- [1] Lindner N.H., Auerbach A., *Phys. Rev. B*. **81**, 054512 (2010).
- [2] Giamarchi T. et al., *Nat. Phys.* **4**, 198 (2008).
- [3] Ghiringhelli G. et al., *Science*. **337**, 821 (2012).
- [4] Schmid G. et al., *Phys. Rev. Lett.* **88**, 167208 (2002).
- [5] Spevak E. L. et al. *Physics of the Solid State*. 1 (2021).
- [6] Sandvik A.W., *Phys. Rev. B*. **59**, R14157, (1999).
- [7] Syljuåsen O. F., Sandvik A. W., *Phys. Rev. E*. **66**, 046701, (2002).

Эффект тепловых флуктуаций спиновой структуры в фракционированных топологических изоляторах: метод функционального интеграла $su(2)$

О. Г. Садыкова^{*}, К. К. Кешарпу, Е. А. Кочетов

*Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова
Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

^{}E-mail: issaeva@theor.jinr.ru*

Недавно в работе [1] с помощью техники функционального интеграла $su(2)$ получена модель перемещения электронов в спиновом поле большой величины ($S > 1/2$) для сильно-коррелированных материалов,

где обычная зонная теория неприменима [2]. Вторым важным результатом работы [1] является факт возникновения топологического эффекта Холла с нулевой скалярной спиновой киральностью. В данной работе на примере конической спиновой конфигурации в рамках интегрального подхода $SU(2)$, аналогично [1], получено влияние малых тепловых флуктуаций в спиновых текстурах на электронную структуру решетки и на проявление топологического эффекта Холла.

Рассмотрим $2D$ решетку L , состоящую из двух подрешеток A и B ; $L = A \oplus B$. Атомы A и B являются ближайшими или соседями первого порядка (NN) друг другу. Атомы AA или соответственно BB — есть соседи второго порядка, то есть через атом A (NNN). Спиновое поле определено следующим образом:

$$\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z) \equiv \left(\epsilon(T) \cos \vec{q}\vec{r}_i, \epsilon(T) \sin \vec{q}\vec{r}_i, \sqrt{S^2 - \epsilon^2(T)} \right), \quad (1)$$

где \vec{S}_i есть спин на i -го узла решетки, \vec{q} — вектор спиновой модуляции, \vec{r}_i — радиус-вектор i -го узла, S — некоторая произвольная константа спиновой величины, и $\epsilon(T)$ есть некоторый маленький параметр, удовлетворяющий $\epsilon \ll S$. Положим, что ϵ есть функция температуры. Рассмотрим для начала простой случай не очень высоких температур, так чтобы в разложении функции $\epsilon(T)$ можно было исключить все члены выше первого порядка. А именно, представим функцию $\epsilon(T)$ в виде линейной функции:

$$\epsilon(T) \approx \epsilon_0 + \delta T, \quad (2)$$

где ϵ_0 есть маленький параметр при температуре $T = 0$, $\delta = \frac{\partial \epsilon(T)}{\partial T}$. Будем считать, что δ удовлетворяет условию $\delta \ll \epsilon_0 \ll T$. Используя метод $su(2)$ функционального интеграла, гамильтониан можно записать в виде:

$$\begin{aligned} H = & -t_2 \sum_{i,j \in A} \bar{f}_i f_j \left(1 + i \frac{\epsilon_0^2 + \epsilon_0 \delta T}{S} \sin \frac{\vec{q}\vec{r}_{ij}}{2} e^{i\vec{q}\vec{r}_{ij}/2} \right) e^{-iS\vec{q}\vec{r}_{ij}} - \\ & -t_2 \sum_{i,j \in B} \bar{f}_i f_j \left(1 - i \frac{\epsilon_0^2 + \epsilon_0 \delta T}{S} \sin \frac{\vec{q}\vec{r}_{ij}}{2} e^{-i\vec{q}\vec{r}_{ij}/2} \right) e^{iS\vec{q}\vec{r}_{ij}} - \\ & -t_1 \left(\frac{\sqrt{\epsilon_0^2 + \epsilon_0 \delta T}}{S} \right)^{2S} \sum_{\substack{i \in A \\ j \in B}} \bar{f}_i f_j \left| \sin \frac{\vec{q}\vec{r}_{ij}}{2} \right|^{2S} + H.c. \end{aligned} \quad (3)$$

Для понимания отметим, что \vec{r}_{ij} в первом и во втором слагаемых (3) отличаются от \vec{r}_{ij} в третьем слагаемом. Третье слагаемое в (3) действительное и соответствует NN «перескокам». Оно определяет взаимодействие атомов A и B . Первое и второе слагаемое соответствуют вкладу в гамильтониан NNN «перескоков» между атомами одного типа AA и BB и являются комплексными величинами.

Физически гамильтониан (3) описывает взаимодействие между спиновой текстурой и странствующими бесспиновыми фермионами. Когда $S = 1/2$, гамильтониан сводится к полученному в работе [3]. Ожидается, что включение в модель температуры приведет к изменению зависимости полной энергии системы от вектора спиновой модуляции \vec{q} .

Список литературы

- [1] Kesharpu K. K., Kochetov E. A., and Ferraz A. arxiv:arXiv:2212.02812.
- [2] Maciejko J., Fiete G. A. *Nature Physics*, volume 11, 385–388 (2015).
- [3] Ferraz A. and Kochetov E. *Physical Review B* **105**, 245128 (2022).

Орбитальный порядок в двойном перовските Pb_2CuMoO_6

Л. С. Таран^{1,*}, С. В. Стрельцов¹

¹*Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН,
г. Екатеринбург, Россия
E-mail: taran@imp.uran.ru

Двойные перовскиты с химической формулой $AA'BV'O_6$ (где A/A' — щелочной или редкоземельный металл, B/V' — переходный/непереходный металл) — интенсивно исследуются в последние годы. Особое внимание к этим системам обусловлено их уникальными свойствами такими как, например, гигантское магнитосопротивление [1], относительно высокие температуры магнитных фазовых переходов [2] и так далее.

Одним из представителей двойных перовскитов является Pb_2CuMoO_6 с особенностями в кристаллической структуре. Октаэдры CuO_6 и MoO_6 представленные на рисунке 1, содержат две длинные $Cu-O$ и одну длинную $Mo-O$ связь, но при этом имеют разные упорядочения на плоскости $\mathbf{b}'\mathbf{c}'$ и $\mathbf{a}'\mathbf{c}'$ (рис. 2). Атомы молибдена смещены из центров октаэдров. Наличие сильных искажений CuO_6 октаэдров связано с эффек-

том Яна–Теллера, а смещение Мо вероятно связано с наличием неподеленной электронной пары в конфигурации d^0 (такая же неподеленная пара электронов имеется и у атомов Pb). В результате кристаллическая структура $\text{Pb}_2\text{CuMoO}_6$, с одной стороны, оказывается достаточно сложной, а с другой она приводит к модификации обменного взаимодействия. Существование ферро-орбитального упорядочения вдоль оси \mathbf{b}' приводит к АФМ взаимодействию по данному направлению, а антиферро-орбитальное упорядочение по \mathbf{c}' к гораздо более слабому ФМ взаимодействию. В результате можно ожидать появление квазиодномерных антиферромагнитных цепочек.

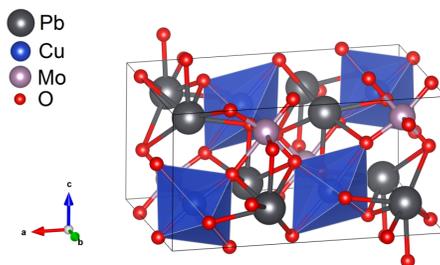


Рис. 1. Модель кристаллической структуры $\text{Pb}_2\text{CuMoO}_6$ с обозначениями атомов. Синие октаэдров соответствуют CuO_6 с медью в центре

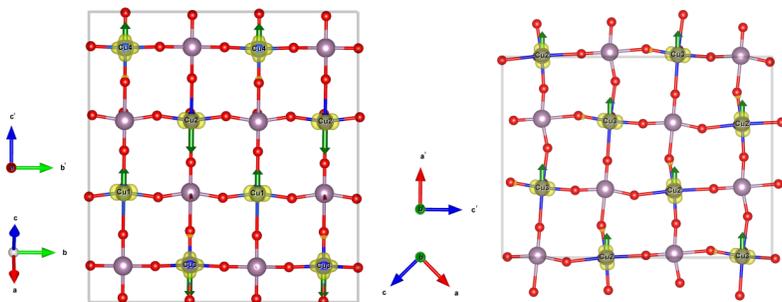


Рис. 2. Орбитальные упорядочения атомов меди в виде парциальных зарядовых плотностей (жёлтый цвет) в двух плоскостях. Зелёные стрелки соответствуют направлению спина и составляют антиферромагнитную конфигурацию. Для наглядности элементарная ячейка с базисными векторами \mathbf{a} , \mathbf{b} и \mathbf{c} (рис. 1) была преобразована в сверхъячейку с базисными векторами $\mathbf{a}' = \mathbf{a} + 2\mathbf{c}$; $\mathbf{b}' = 2\mathbf{b}$; $\mathbf{c}' = -\mathbf{a}' + 2\mathbf{c}$ и были скрыты атомы свинца

Работа выполнена при частичной поддержке проекта РФФ № 23-42-00069.

Список литературы

- [1] Martin C., Maignan A., Pelloquin D., Nguyen N. and Raveau B., Magneto-resistance in the oxygen deficient $\text{LnBaCo}_2\text{O}_{5.4}$ ($\text{Ln} = \text{Eu, Gd}$) phases, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 1421–1423 (1997) <https://doi.org/10.1063/1.119912>.
- [2] Sterkhov E. V., Chtchelkatchev N. M., Mostovshchikova E. V., Ryltsev R. E., Uporov S. A., Pascut G. L., Fetisov A. V., Titova S. G., The origin of the structural transition in double-perovskite manganite $\text{PrBaMn}_2\text{O}_6$, *Journal of Alloys and Compounds* **892**, 162034 (2022), 10.1016/j.jallcom.2021.162034.
- [3] Li B., Wu X., Zhang S., Li Z., Gao D., Chen X., Xiao S., Chueh C.-C., Jen Alex. K.-Y., Zhu Z. Efficient and stable $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ double perovskite solar cells through in-situ surface modulation, *Chemical Engineering Journal*, Vol. 446, Part 3, 2022, 137144, 10.1016/j.cej.2022.137144.

Interplay of the Jahn–Teller effect and spin-orbit coupling: The case of trigonal vibrations

F. V. Temnikov^{1,*}, S. V. Streltsov^{1,2}, K. I. Kugel^{3,4}, D. I. Khomskii⁵

¹*Institute of Metal Physics, Ural Branch of Russian Academy of Sciences,
Ekaterinburg, Russia*

²*Department of Theoretical Physics and Applied Mathematics,
Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia*

³*Institute for Theoretical and Applied Electrodynamics,
Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

⁴*National Research University Higher School of Economics, Moscow, Russia*

⁵*II. Physikalisches Institut, Universität zu Köln, Köln, D-50937, Germany*

*E-mail: temnikov.fedor.v@gmail.com

The effects related to spin-orbit coupling (SOC) have recently become quite topical especially due to their decisive role in the physics of topological insulators and other topological materials. These effects are also important in such strongly correlated electron systems as $4d$ and $5d$ transition metal compounds. In contrast with $3d$ compounds, the large SOC characteristic of $4d$ and $5d$ transition

metal ions can play a dominant role in the formation of electron structure determining the sequence and multiplet characteristics of the energy levels. This means that the spin and orbital degrees of freedom become intermixed leading to a more pronounced contribution of magnetism to the orbital characteristics.

Indeed, the orbital degeneracy, leading in particular to the Jahn–Teller (JT) effect, is quite common in many transition metal compounds. Until recently, it was predominantly studied in $3d$ systems containing such well-known JT ions as Mn^{3+} and Cu^{2+} . Currently, however, the attention is gradually shifting to the study of $4d$ and $5d$ compounds. In this case, the SOC starts to play a more and more important role. Therefore a question arises: what is the concerted outcome of the JT effect and strong SOC?

We study an interplay between the cooperative JT effect and SOC giving rise to spin-orbital entangled states in concentrated systems. As a specific example, we analyze the interaction of electrons occupying triply degenerate single-ion t_{2g} levels with trigonal vibrations (the $t \otimes T$ problem). A more general problem of the electron-lattice interaction involving both tetragonal and trigonal vibrations is also considered. It is shown that the result of such interaction crucially depends on the occupation of t_{2g} levels leading to either the suppression or the enhancement of the JT effect by the SOC [1].

This work was financially supported by the Russian Science Foundation, grant 23-42-00069.

References

- [1] Streltsov S.V. et al. *Phys. Rev. B* **105**, 205142 (2022).

Изменение орбитального упорядочения в $Fe \cdot Fe_{2-x}Cr_xO_4$

Н. А. Фоминых^{1,2}, В. В. Стегайлов^{1,2,3}

¹Объединенный институт высоких температур РАН

²Московский физико-технический институт (НИИ)

³НИУ Высшая школа экономики

Точное описание свойств оксидов железа в частности электронной структуры магнетита Fe_3O_4 , хромита $FeCr_2O_4$ и их переходных состояний необходимо для понимания механизмов коррозии стали [1]. Сложный

механизм орбитального и магнитного упорядочения в магнетите приводит к таким эффектам как разделение зарядов в тетраэдрической подрешетке железа на Fe^{2+} и Fe^{3+} , а также переходу Вервея между низкотемпературной моноклинической фазой и высокотемпературной кубической фазой [2, 3].

В данной работе в рамках теории функционала плотности с учетом сильных корреляций в приближении DFT+U представлены расчеты электронной структуры как кубических, так и низкотемпературных вариантов кристалла при различных концентрациях хрома. Показано изменение характера орбитального упорядочения при высоких концентрациях хрома. Результаты расчетов электронной структуры рассмотрены в контексте данных по электронному хоппину при высоких температурах.

Список литературы

- [1] Fominykh N. A., Nikolskiy V. P., Stegailov V. V. *Comput. Mater. Sci.* 220, 112061 (2023).
- [2] Шутикова М. И., Стегайлов В. В. *ЖЭТФ*, 160 (2), 249 (2021).
- [3] Shutikova M. I., Stegailov V. V. *J. Phys. Condens. Matter.* 34 (47), 475701 (2022).

2D- И 1D-СИСТЕМЫ

Спиновый резонанс в течении вязкой жидкости из двумерных электронов

А. Н. Афанасиев, П. С. Алексеев, А. А. Даниленко,
А. А. Грешнов, М. А. Семина

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

Гидродинамический режим электропроводности, обусловленный формированием пространственно неоднородных течений вязкой жидкости из электронов, был открыт в последние 8 лет в сверхчистых образцах графена [1], слоистых металлов [2], квантовых ям на основе GaAs [3], и других материалов. Простейшим типом образцов, в которых реализуется такой режим для двумерных электронов, являются длинные полоски, внутри которых дефекты практически отсутствуют, а края которых являются шероховатыми. На краях поток жидкости обращается в нуль за счёт прилипания к ним: $J_{y=W/2} = 0$ (см. рис. 1).

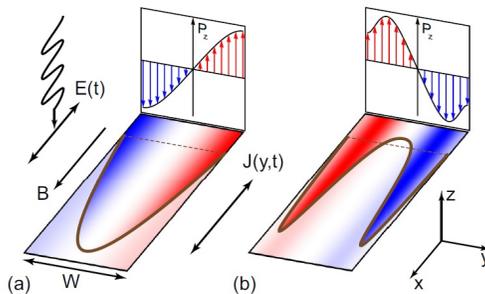


Рис. 1. Предельно медленное, $\omega \ll \eta/W^2$ (а), и умеренно медленное, $\omega \sim \eta/W^2$ (б), течения двумерной электронной жидкости в длинном образце с шероховатыми краями в электрическом $E(t)$ и магнитном B полях. По вертикали показаны распределения спиновой поляризации $P_z(y,t)$, возникающие в течениях за счёт эффекта вращательной вязкости

Из решения обычного уравнения Навье-Стокса для электронной жидкости в полосках следует, что стационарные и очень медленные течения имеют параболический профиль Пуазейля, $J(y,t) \sim E(t)[(W/2)^2 - y^2]$, а более быстрые течения имеют вид течения Уомерсли [4]:

$$J(y,t) = J(y)e^{-i\omega t} + c.c. , \quad J(y) = \frac{if_0}{\omega} \left[1 - \frac{\cosh(\kappa y)}{\cosh(\kappa W/2)} \right], \quad (1)$$

где ω — частота внешнего электрического поля $E(t)$, которая считается значительно меньшей частоты межэлектронных столкновений; $\kappa = \sqrt{-i\omega/\eta}$ — обратная характерная ширина прикраевой области течения Уомерсли (см. рис. 1, *b*), η — сдвиговая вязкость электронной жидкости; $f_0 = eEn/m$, n и m — плотность и масса электронов, E — амплитуда $E(t)$.

Известно, что в вязких течениях металлической или электронной жидкости существует связь между спиновой плотностью жидкости и градиентом её потока, обусловленная на микроскопическом уровне спин-орбитальным взаимодействием частиц жидкости [5, 6]. Простейшим типом такой связи является эффект вращательной вязкости, состоящий в появлении асимметрии у тензора вязких напряжений Π_{ik} при наличии завихрённости течения, $\text{rot } \mathbf{J} \neq 0$ [5]. Асимметрия тензора Π_{ik} возможна за счёт спин-орбитальных поправок у скоростей частиц жидкости. Для двумерных вырожденных электронов в наноструктурах эффект вращательной вязкости описывается соотношением [7]:

$$\frac{\Pi_{ik} - \Pi_{ki}}{2m} = \eta_r \varepsilon_{ikl} \left[\text{rot } \mathbf{J} - \frac{\mu(\mathbf{P} - \mathbf{P}_0)}{\hbar} \right]_l, \quad (2)$$

где η_r — коэффициент вращательной вязкости электронной жидкости, пропорциональный квадрату силы спин-орбитального взаимодействия электронов в кристаллической решётке; ε_{ikl} — абсолютно антисимметричный единичный тензор третьего ранга; μ — химический потенциал электронов; \mathbf{P} — безразмерная спиновая поляризация; $\mathbf{P}_0 = c\mathbf{V}/n$ — равновесная спиновая поляризация; χ — магнитная восприимчивость электронов, \mathbf{V} — магнитное поле.

Взаимодействие (2) приводит, с одной стороны, к тому, что асимметрия тензора Π_{ik} , пропорциональная $\text{rot } \mathbf{J}$, вызывает генерацию спи-

новой плотности $\partial \mathbf{P} / \partial t$ в жидкости за счёт сохранения полного углового момента жидкости. С другой стороны, подстановка выражения (2) в уравнение Навье–Стокса даёт пропорциональную величине $\text{rot } \mathbf{P}$ поправку к полной силе, действующей на элементы объёма жидкости (основная её часть — сила Лоренца). Комбинация этих двух эффектов приводит к тому, что у течений с ненулевой завихрённостью потока $\text{rot } \mathbf{J}$ (например, у плоских течений $J(y, t)$, изображённых на рис. 1) за счёт генерации спиновой плотности $P_z(y, t)$ появляется спин-орбитальная поправка к току $J_2(y, t)$, пропорциональная квадрату вращательной вязкости η_r .

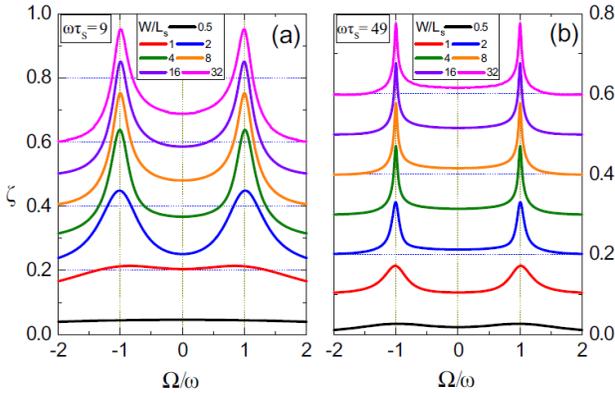


Рис. 2. Отношение $\zeta = \text{Re}(\Delta Z) / \text{Re}(Z_0)$, где ΔZ — спин-орбитальный вклад к импеданс образца, обусловленный генерацией спиновой поляризации P_z , и Z_0 — импеданс в нулевом магнитном поле. По горизонтальной оси отложено безразмерное магнитное поле Ω / ω . Кривые при разных параметрах W / L_s масштабированы и сдвинуты по вертикальной оси по разному для разных W / L_s для достижения лучшей видимости.

Нами был выполнен расчёт спин-орбитальной поправки к току для течения (1) в рамках модели, состоящей их уравнения Навье–Стокса, уравнения баланса спиновой плотности и уравнения спиновых потоков [8]. Рассмотрен случай медленных течений, возникающих за счёт поляризованного вдоль образца электрического поля $E(t)$ с частотами $\omega \lesssim \eta / W^2$ при наличии слабого магнитного поля B в том же направлении. В этом случае зависимости сдвиговой η и вращательной η_r вязко-

сти от B и ω являются несущественными. Показано, что, за счёт прецессии спинов электронов, генерируемых в течении (1) благодаря связи (2), зависимость амплитуды спин-орбитальной поправки к току, J_2 , от магнитного поля при фиксированной частоте может иметь резонансы при ларморовской частоте: $\omega = \pm\Omega$. Появление резонансов и их ширина контролируются безразмерными параметрами $\omega\tau_s$ и W/L_s , где τ_s — время спиновой релаксации, L_s — длина спиновой диффузии (см. рис. 2).

Таким образом, предсказан электрически детектируемый спиновый резонанс в вязких течениях двумерной электронной жидкости.

Работа поддержана Фондом развития теоретической физики и математики «Базис» (проект № 20-1-3-51-1).

Список литературы

- [1] Bandurin D. A., et al., *Science* 351, 1055 (2016).
- [2] Moll P. J. W., et al., *Science* 351, 1061 (2016).
- [3] Alekseev P. S., *Phys. Rev. Lett.* 117, 166601 (2016).
- [4] Womersley J. R., *J. Physiol.* 127, 553 (1955).
- [5] Matsuo M., Ohnuma Y., and Maekawa S., *Phys. Rev. B* 96, 020401 (2017).
- [6] Glazov M. M., *2D Mater.* 9, 015027 (2021).
- [7] Doornenbal R. J., Polini M., and Duine R. A., *J. Phys.: Mater.* 2, 015006 (2019).
- [8] Afanasiev A. N., Alekseev P. S., Danilenko A. A., Greshnov A. A., Semina M. A., *Phys. Rev. B* 106, L041407 (2022).

Экситоны и трионы с отрицательной приведенной массой в двумерных полупроводниках

М. М. Глазов^{1,*}, Д. В. Мамедов², М. А. Семина¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе, г. Санкт-Петербург, Россия

²НИУ Высшая школа экономики, г. Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: glazov@coherent.ioffe.ru

Кулоновские корреляции особенно ярко проявляются в двумерных полупроводниках на основе дихалькогенидов переходных металлов, например, в MoS_2 или WSe_2 , где энергии связи экситонов — электрон-

дырочных пар — составляют сотни мэВ, а трионов или заряженных экситонов — трехчастичных комплексов из электрона и двух дырок или двух электронов и дырки — десятки мэВ [1, 2]. В недавних экспериментальных работах [3, 4] сообщалось о наблюдении «высоколежащих» экситонов и трионов в таких атомарно тонких полупроводниках, где один из электронов находится в далекой (возбужденной) зоне проводимости. Особенность зонной структуры этих материалов такова, что эта зона характеризуется отрицательной эффективной массой [2, 3].

Здесь представлены результаты теоретического исследования состояний экситонов и трионов в атомарно тонких полупроводниках, где один из носителей заряда находится в «далекой» зоне и имеет отрицательную эффективную массу.

В рамках модели с параболической дисперсией нами было получен критерий на соотношения между эффективными массами носителей заряда, при которых кулоновские комплексы, экситоны и трионы, могут быть связаны. Область существования стабильных трионов оказывается узкой, причем она не соответствует известным значениям эффективных масс в далеких зонах [3, 4]. Комплексы могут быть стабилизированы при учете вкладов четвертой степени по волновому вектору в дисперсию электрона в далекой зоне. Расчеты энергий связи экситонов и трионов проводились как в рамках вариационного метода, так и путем численной диагонализации гамильтониана на базисе гауссиан [5]. На основе аналитических расчетов с короткодействующим потенциалом предложены вариационные функции с малым числом подгоночных параметров, которые применимы при любом виде межчастичного взаимодействия и произвольных знаках эффективных масс.

Проанализированы зависимости энергий связи экситона и триона как от приведенной массы высоколежащего экситона (как положительной так и отрицательной), так и от параметра, описывающего непараболичность дисперсии возбужденной зоны проводимости. Получены асимптотики энергий связи экситона и триона в пределах сильной непараболичности или малой по абсолютной величине и отрицательной эффективной массы электрона. Проанализированы отклонения экситонной серии от водородоподобной. Описаны результаты недавних экспериментов [4] по наблюдению и исследованию положительно и отрицательно заряженных трионов с отрицательной эффективной массой электрона.

Список литературы

- [1] Wang G., Chernikov A., Glazov M. M., et al., *Rev. Mod. Phys.* **90**, 021001 (2018).
- [2] Дурнев М. В., Глазов М. М., *УФН* **188**, 913 (2018).
- [3] Lin K.-Q., et al., *Nature Comm.* **12**, 5500 (2021).
- [4] Lin K.-Q., Semina M. A. et al., *Nat. Commun.* **13**, 6980 (2022).
- [5] Semina M. A., Mamedov J. V., Glazov M. M., *Oxford Open Materials Science*, itad004, <https://doi.org/10.1093/oxfmat/itad004> (2023).

Новые особенности растекания магнитоэкситонного конденсата в квантово-холловском диэлектрике

А. В. Горбунов, А. В. Ларионов, Л. В. Кулик, В. Б. Тимофеев

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

Триплетные циклотронные магнитоэкситоны (ТЦМЭ или спин-флип экситоны) в квантово-холловском изоляторе (электронный фактор заполнения $\nu = 2$) образованы в зоне проводимости электронной вакансией (ферми-дыркой) на полностью заполненном нулевым уровне Ландау и возбужденным электроном с перевернутым спином на пустом первом уровне Ландау. Спин-флип экситоны – это оптически неактивные («темные») возбуждения, время жизни которых при температуре $T < 1$ К достигает ~ 1 мс, поэтому с помощью слабой нерезонансной оптической накачки удастся без перегрева достичь концентраций $n_{ex} \sim (1-10) \%$ от плотности квантов магнитного потока. ТЦМЭ являются композитными бозонами со спином 1. В данной системе это возбуждения, низжайшие по энергии [1]. В результате при включении оптической накачки в холловском изоляторе образуется качественно новая фаза — магнитоэкситонный конденсат [2]. Это состояние является экспериментальным примером конденсации композитных бозонов в пространстве обобщенных импульсов \mathbf{q} — величин, зависящих как от пространственных координат, так и от их градиентов [3].

В наших экспериментах основным способом обнаружения ТЦМЭ является фотоиндуцированное резонансное отражение (ФРО) света, со-

ответствующего оптическому переходу «0–0» между состояниями нулевых уровней Ландау тяжелой дырки в валентной зоне и электрона в зоне проводимости. Резонансное отражение для перехода «0–0» отсутствует в равновесии и появляется только при включенной накачке [4]. Этот метод детектирует фотовозбужденные ферми-дырки, входящие в состав циклотронных магнитоэкситонов. С его помощью было обнаружено, в частности, что конденсат спин-флип экситонов способен растекаться из области фотовозбуждения фактически на весь образец (~2–3 мм) [2]. В квантовой яме GaAs/AlGaAs шириной 35 нм с электронной концентрацией $2 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и подвижностью $15 \cdot 10^6 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ транспортная длина ТЦМЭ в конденсированном состоянии на три порядка больше, чем длина диффузии в магнитоэкситонном газе [5].

Отличительной особенностью ТЦМЭ является то, что минимум их дисперсионной зависимости находится не при $q = 0$, а вблизи обратной магнитной длины: $q_{\min} \approx 1/l_B$ [6]. В поле 4 Тл $l_B = \sqrt{ch/eB} \approx 10^{-6} \text{ см}$, т. е. для релаксации нужно отдать довольно большой импульс. В работе [7] было экспериментально доказано, что ансамбль ТЦМЭ в холловском диэлектрике всегда является неравновесным и состоит из экситонного газа с обобщенными импульсами $q \sim 0$ и конденсата экситонов в ротонном минимуме с импульсами $q \sim 1/l_B$. Быстрый перенос экситонной плотности на большие расстояния осуществляется именно последними.

Использование в экспериментах проекционной оптической системы с высоким пространственным разрешением и прецизионная подстройка в резонанс при регистрации сигнала ФРО позволили обнаружить качественно новые закономерности растекания магнитоэкситонного конденсата [8]. Из полученных картин распределения сигнала ФРО (см. рис. 1b, 1c) следует, что не только магнитоэкситонный конденсат, но и ТЦМЭ с малой величиной обобщенного импульса распространяются в «объеме» холловского диэлектрика далеко не тривиально. Распределение спин-флип экситонов с малыми импульсами также не имеет ничего общего с диффузией. По существу, плотность ТЦМЭ описывается ступенчатой функцией (рис. 1, b). Диаметр этого плато, составляющий десятки микрон, на два порядка величины превосходит длину свободного пробега одиночного ТЦМЭ в разреженном экситонном газе [2]. Таким образом, можно предположить, что в плотном ансамбле ТЦМЭ растекание экситонов с малыми импульсами также имеет коллективный характер. Это наблюдение качественно подтверждает теоретическое утверждение, сде-

ланное в работе [9], о том, что при $\nu = 2$ должны существовать два типа конденсированных состояний: одно формируется из ТЦМЭ с $q \sim 0$, а второе — это магнитоэкситонный конденсат с $q \sim 1/l_B$. В обоих случаях зависимость от мощности накачки сигнала ФРО (регистрируется либо спектрально, по интенсивности в отраженном свете линии зондирующего лазера, либо по площади видимой области отражения) носит пороговый характер. Природу самих процессов растекания еще предстоит выяснить.

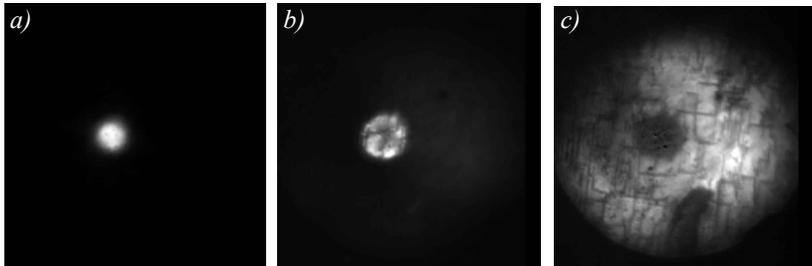


Рис. 1. Пятно фотовозбуждения, видимое в свете фотолюминесценции (a). Картины растекания в свете фотоиндуцированного резонансного отражения для спин-флип экситонов с малыми обобщенными импульсами, $q \sim 0$ (b) и для магнитоэкситонного конденсата с импульсами $q \sim 1/l_B$ (c). Размер стороны кадра ≈ 300 мкм; $P_{\text{pump}} = 10$ мкВт, $T \approx 0.55$ К

Список литературы

- [1] Kulik L. V., Kukushkin I. V., Dickmann S., Kirpichev V. E., Van'kov A. B., Parakhonsky A. L., Smet J. H., von Klitzing K., Wegscheider W., *Phys. Rev. B* **72**, 073304 (2005).
- [2] Kulik L. V., Zhuravlev A. S., Dickmann S., Gorbunov A. V., Timofeev V. B., Kukushkin I. V., Schmult S., *Nature Commun.* **7**, 13499 (2016).
- [3] Avron J. E., Herbst I. W., Simon B., *Ann. Physics* **114**, 431 (1978).
- [4] Kulik L. V., Gorbunov A. V., Zhuravlev A. S., Timofeev V. B., Dickmann S., Kukushkin I. V., *Scientific Reports* **4**, 10354 (2015).
- [5] Kulik L. V., Kuznetsov V. A., Zhuravlev A. S., Gorbunov A. V., Solovyev V. V., Timofeev V. B., Kukushkin I. V., Schmult S., *Scientific Reports* **8**, 10948 (2018).
- [6] Kallin C., Halperin B. I., *Phys. Rev. B* **30**, 5655 (1984).

- [7] Журавлев А. С., Кузнецов В. А., Горбунов А. В., Кулик Л. В., Тимофеев В. Б., Кукушкин И. В., *Письма в ЖЭТФ* **110**, 260 (2019).
- [8] Горбунов А. В., Ларионов А. В., Кулик Л. В., Тимофеев В. Б., *Письма в ЖЭТФ* **116**, 756 (2022).
- [9] Dickmann S., Kulik L. V., Kuznetsov V. A., *Phys. Rev. B* **100**, 155304 (2019).

Логарифмическая релаксация фотопроводимости в вискерах слоистого квазиодномерного полупроводника TiS_3

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

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

**E-mail: gori@cplire.ru*

Фотопроводимость, $\delta\sigma$, и другие оптические свойства слоистого квазиодномерного полупроводника TiS_3 с запрещенной зоной ~ 1 эВ интенсивно исследуются в связи с возможным применением монокристаллов этого соединения в оптоэлектронике. На основе вискеро́в TiS_3 нанометровой толщины были изготовлены фотодетекторы, чувствительность которых достигала ~ 3000 А/Вт, а граничная частота ~ 1000 Гц [1]. Чувствительность и быстродействие детектора определяются временем релаксации фотопроводимости, которое для TiS_3 до сих пор измерено не было. На основании величины $\delta\sigma$ были сделаны оценки времени рекомбинации возбужденных электронов и дырок, которое оказалось ~ 20 пс при 300 К [2]. Было высказано предположение, что рекомбинация происходит через донорный уровень с большим временем жизни носителей [2].

В этой работе приводятся результаты прямых измерений релаксации фотопроводимости монокристаллических вискеро́в TiS_3 в диапазоне температур $79 \text{ К} < T < 300 \text{ К}$ при разных интенсивностях облучения в области длин волн, λ , от ближнего ИК до ближнего УФ. Экспериментально исследованы кривые возрастания и спада $\delta\sigma$ при облучении кристаллов прямоугольными импульсами излучения светодиодов (рис. 1).

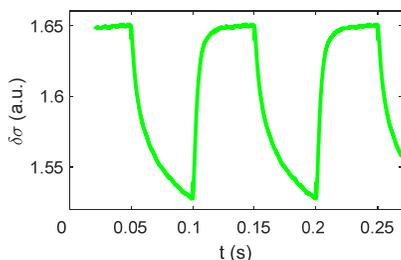


Рис. 1. Осциллограмма фотопроводимости, полученная при облучении вискера TiS_3 прямоугольными импульсами света: $\lambda = 405$ нм, $T = 100$ К

Оказалось, что ни возрастание, ни спад $\delta\sigma$ нельзя описать одним экспоненциальным законом в течении всего времени переходного процесса, и кинетика фотопроводимости не может быть охарактеризована одним временем релаксации. Кривые можно приблизить экспонентой только в узком интервале времён (20–50 мс). Определенное таким образом время релаксации составляет ~ 1 мс при 300 К и растет с понижением температуры.

При фиксированной температуре скорость релаксации зависит от величины фотопроводимости в стационарном состоянии. Чем выше интенсивность облучения, тем больше $\delta\sigma$, и тем быстрее происходит релаксация. Это означает, что процесс релаксации нельзя объяснить не зависящими друг от друга электронными переходами между уровнями, на которых времена жизни носителей не зависят от заселённости. Результат указывает на сильную корреляцию электронных состояний в TiS_3 .

Установлено, что при выключении светодиода фотопроводимость снижается линейно в зависимости от логарифма времени в диапазоне от сотых долей секунды до десятков секунд (рис. 2). С понижением температуры от 300 К до ~ 150 К наклон линейной зависимости уменьшается, т. е. релаксация замедляется. В области $80 \text{ К} < T < 150 \text{ К}$ релаксационная зависимость почти не меняется.

Логарифмическая релаксация фотопроводимости наблюдалась ранее в полупроводниковых соединениях, например, в твердых растворах $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$, допированных In [3], и в материалах с волной зарядовой плотности [4]. В случае TiS_3 это явление может быть связано с разбросом по энергии центров захвата фотовозбужденных носителей из-за наличия характерных для этого соединения дефектов кристаллической структуры

и вакансий серы [5]. Недавно методами фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) в вискерах TiS_3 была обнаружена минizona донорных состояний вблизи уровня Ферми [6], возникновение которой, скорее всего, обусловлено присутствием дефектов.

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

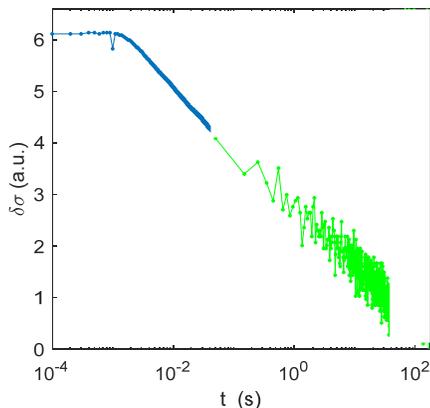


Рис. 2. Релаксация фотопроводимости в логарифмическом масштабе по времени. Две кривые измерены при импульсах света разной длительности: $\lambda = 525$ нм, $T = 100$ К

Список литературы

- [1] Island J. O., Molina-Mendoza A. J., Barawi M., Biele R., Flores E., Clamagirand J. M., Ares J. R., Sanchez C., van der Zantl H. S. J., D'Agosta R., Ferrer I. J., and Castellanos-Gomez A., *2D Mater.*, **4**, 022003 (2017).
- [2] Gorlova I. G., Nikonov S. A., Zybtshev S. G., Pokrovskii V. Ya. and Titov A. N., *Appl. Phys. Lett.*, **120**, 153102 (2022).
- [3] Волков Б. А., Рябова Л. И., Хохлов Д. Р., *УФН*, **172**, 876 (2002).
- [4] Zaitsev-Zotov S. V., Minakova V. E., Nasretdinova V. F., Zybtshev S. G., *Physica B*, **407**, 1868 (2012).
- [5] Trunkin I. N., Gorlova I. G., Bolotina N. B., Bondarenko V. I., Chesnokov Y. M., A.L. Vasiliev, *J. Mater. Sci.*, **56**, 2150 (2021).
- [6] Gilbert S. J., Yi H., Paudel T., Lipatov A., Yost A. J., Sinitiskii A., Tsymbal E. Y., Avila J., Asensio M. C., Dowben P. A., *J. Phys. Chem. C*, **126**, 17647 (2022).

Мультистабильность экситон-поляритонов в хиральном полупроводниковом микрорезонаторе

О. А. Дмитриева^{1,2,3*}, Н. А. Гиппиус³, С. Г. Тиходеев^{1,2,3}

¹Физический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, г. Москва, Россия

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

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

*E-mail: dmitrieva.oa16@physics.msu.ru

В докладе теоретически исследованы особенности эффектов мультистабильности экситон-поляритонов в хиральном микрорезонаторе при когерентной резонансной линейно-поляризованной накачке. Хиральность микрорезонатора обеспечена изготовлением на его верхнем зеркале фотонно-кристаллического слоя с пониженной точечной симметрией C_4 [1]. Показано [2], что даже при малой степени циркулярной поляризации фотолюминесценции хирального микрорезонатора при низкой интенсивности резонансной накачки, с ростом интенсивности в системе должен происходить резкий мультистабильный переход в состояние с высокой степенью циркулярной поляризации фотолюминесценции.

Для описания эффектов мультистабильности в хиральном микрорезонаторе использованы связанные уравнение Гросса–Питаевского для когерентной экситон-поляритонной моды в квантовых ямах в активном слое микрорезонатора и уравнения Максвелла для определения локального распределения электрического поля внутри микрорезонатора [3]. Эти связанные уравнения решены численно и, для учета эффектов нелинейности, самосогласованно, с помощью метода оптической матрицы рассеяния и Фурье-модального разложения [4].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-12-00351, <https://rscf.ru/project/22-12-00351/>.

Список литературы

- [1] Maksimov A. A., Filatov E. V., Tartakovskii I. I., Kulakovskii V. D., Tikhodeev S. G., Schneider C., and Höfling S., Circularly Polarized Laser Emission from an Electrically Pumped Chiral Microcavity, *Phys. Rev. Appl.* **17**, L021001 (2022).

- [2] Дмитриева О. А., Гиппиус Н. А., Тиходеев С. Г., Мультистабильность в хиральном полупроводниковом микрорезонаторе, *Доклады РАН. Физика. Технические науки*. Принято к печати (2023).
- [3] 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).
- [4] Tikhodeev S. G., Yablonskii A. L., Muljarov E. A., Gippius N. A., Ishihara Teruya, Quasiguidded modes and optical properties of photonic crystal slabs, *Phys. Rev. B* **66**, 045102 (2002).

Плазменные резонансы в ограниченных двумерных электронных системах

И. В. Загороднев¹, Д. А. Родионов^{1,2}, А. А. Заболотных¹

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

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

Относительно недавно возник интерес к изучению плазменных колебаний в двумерных электронных системах в режиме, когда важны эффекты электромагнитного запаздывания, т. е. в структурах, характерные размеры которых сравнимы с длиной волны возбуждающего электромагнитного излучения. Оказалось, например, что в таких системах затухание плазменных колебаний ведет себя нетривиально [1].

В данной работе, основанной на публикациях [2–4], рассмотрены плазменные колебания, возникающие в ограниченных двумерных электронных системах на примере двух геометрий — полоса и диск — в том числе в ситуации, когда важны эффекты электромагнитного запаздывания. Кроме того, учтено наличие рядом с 2D-системой металлического электрода (затвора). В пределе, когда электрод расположен на расстоянии много меньших характерной длины волны плазменных колебаний, возможно точное решение, как в диске, так и в полосе, в том числе и во внешнем магнитном поле (в рамках так называемого приближения локальной ёмкости). Интересно, например, что в таком случае затухание плазменных резонансов в таких системах обычно меньше, чем темп ре-

лаксации носителей (т. е. обратное время рассеяния). Однако в таком предельном случае отсутствует радиационное затухание плазмонов, которое может быть важно в системах с высокой подвижностью носителей заряда, например, в квантовых ямах GaAs/AlGaAs при гелиевых температурах. Радиационное затухание может быть учтено либо по теории возмущений, либо в рамках других (приближенных) методов, которые также будут обсуждены. Будет детально проанализирована нетривиальная зависимость затухания плазменных колебания от размера и других параметров системы.

Список литературы

- [1] Gusikhin P. A., Muravev V. M., Zagitova A. A. et al., *Phys. Rev. Lett.* **121**, 176804 (2018).
- [2] Zagorodnev I. V., Zabolotnykh A. A., Rodionov D. A., Volkov V. A., *Nanomaterials*, **13**, 975 (2023).
- [3] Rodionov D. A., Zagorodnev I. V., *Phys. Rev. B* **106**, 235431 (2022).
- [4] Zagorodnev I. V., Rodionov D. A., Zabolotnykh A. A., *Phys. Rev. B* **103**, 195431 (2021).

Многокомпонентная динамика фотолюминесценции экситонов в нанокристаллах металлогалогенидных перовскитов в матрице фторфосфатного стекла

Е. В. Кулебякина¹, М. Л. Скориков¹, Е. В. Колобкова^{2,3},
М. С. Кузнецова⁴, Д. Р. Яковлев^{1,5,6}, В. В. Белых¹

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

²Университет ИТМО, г. Санкт-Петербург

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

⁴Санкт-петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург

⁵Технический университет Дортмунда, г. Дортмунд

⁶Физико-технический университет им. А. Ф. Иоффе, г. Санкт-Петербург

E-mail: kulebyakinaev@lebedev.ru

В последнее десятилетие нанокристаллы (НК) из неорганических металлогалогенидных перовскитов привлекают большое внимание вследствие высокой квантовой эффективности и узкополосного излу-

ния этих материалов. Однако плохая устойчивость НК к воздействиям окружающей среды, таким как влага и кислород, особенно при повышенных температурах, препятствует их практическому применению в светоизлучающих приборах. Одним из вариантов решения существующей проблемы может быть использование матрицы из неорганического стекла, обеспечивающей химическую стабильность НК.

В настоящей работе методом спектроскопии фотолюминесценции (ФЛ) экспериментально исследована низкотемпературная экситонная динамика в НК перовскитов, заключенных в матрицу фторфосфатного стекла. Исследовались нанокристаллы двух составов — $\text{CsPb}(\text{Cl},\text{Br})_3$ и CsPbBr_3 . Процесс изготовления образцов состоял из двух этапов [1, 2]. Первый этап, высокотемпературный синтез, происходил в закрытом стеклоглеродном тигле при температуре 1000 °С. Шихту массой 50 г состава $\text{CsPb}(\text{Cl},\text{Br})_3$ расплавляли при данной температуре в течение 20 минут, состава CsPbBr_3 той же массы — 30 минут. Второй этап представлял собой отлитие расплавов на стеклоглеродные пластины с последующей термообработкой. Обработка в муфельной печи происходила в диапазоне температур 400–450 °С по времени от 20 до 40 минут с целью получить серию образцов с разными размерами НК. В данной работе представлены результаты для образцов CsPbBr_3 с размерами НК 9, 12 и 16 нм, для $\text{CsPb}(\text{Cl},\text{Br})_3$ — 8 нм.

При измерениях стационарных спектров ФЛ образцы возбуждались полупроводниковым лазером на длине волны 405 нм, а при измерениях динамики ФЛ — второй гармоникой импульсного титан-сапфирового лазера на длине волны 400 нм. Измерения проводились при низких температурах в гелиевом оптическом криостате. Криостат оборудован системой температурного контроля, что позволило провести измерения в широком температурном диапазоне от 6 до 270 К. Каждый спектр стационарной ФЛ демонстрирует ярко выраженный одиночный экситонный пик, находящийся в зависимости от состава либо ближе к инфракрасной области спектра, как для НК CsPbBr_3 , либо к ультрафиолетовой, как в случае НК $\text{CsPb}(\text{Cl},\text{Br})_3$. Динамика ФЛ экситонов проявляет сильно неэкспоненциальный характер и характеризуется тремя компонентами: быстрой ($\approx 0,3$ нс), медленной (≈ 10 мкс) и переходной между этими двумя (≈ 10 нс). На рис. 1 показана динамика ФЛ НК $\text{CsPb}(\text{Cl},\text{Br})_3$ при разных температурах в разных временных диапазонах. Видно, что времена затухания и соотношение интенсивностей компонент ФЛ существенно зави-

сят от температуры. Самая быстрая компонента ($\approx 0,3$ нс) доминирует при низких температурах и пропадает при более высоких (рис. 1, а). Более медленная компонента характеризуется временем ≈ 10 нс при 25 К (рис. 1, б). При низких температурах данная компонента проявляет себя достаточно слабо, однако доминирует при более высоких. Время затухания самой медленной компоненты ФЛ достигает 10 мкс при низких температурах (рис. 1, с). С повышением температуры амплитуда медленной компоненты увеличивается, а время ее затухания уменьшается. Аналогичная многокомпонентная динамика ФЛ с похожей температурной зависимостью времен затухания наблюдается и для других вышеперечисленных образцов. Неэкспоненциальный характер медленной компоненты затухания ФЛ связан с неоднородным распределением энергетического расщепления между «темным» и «светлым» состояниями экситонов в НК.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (соглашение № 18-72-10073-П).

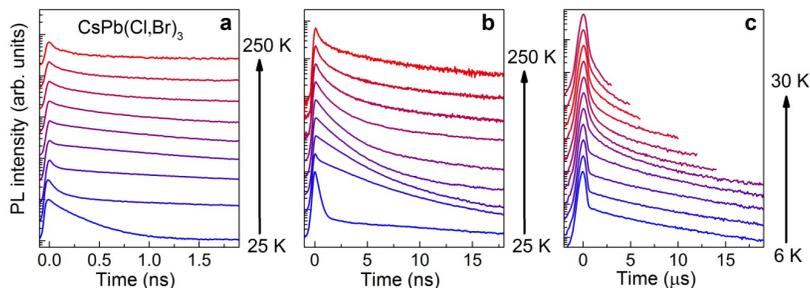


Рис. 1. Динамика фотолюминесценции НК перовскитов $\text{CsPb}(\text{Cl},\text{Br})_3$ в матрице фторфосфатного стекла в разных временных диапазонах при разных температурах

Список литературы

- [1] Kolobkova E. V., Kuznetsova M. S., Nikonorov N. V. // Perovskite CsPbX_3 ($X = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) nanocrystals in fluorophosphate glasses // *Bulletin of non-crystalline solids*, 563, 120811 (2021).
- [2] Kolobkova E. V., Semaan R., Kuznetsova M. S., Nikonorov N. V. // High-temperature photoluminescence of CsPbBr_3 perovskite nanocrystals in the fluorophosphate glasses // *Journal of Luminescence*, 255, 119541 (2023).

Тензоры внутрислоевых проводимости и сопротивления в магнитном поле в квазидвумерных слоистых металлах

Т. И. Могилюк^{1,*}, П. Д. Григорьев^{2,3}

¹НИИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия

²Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН,

г. Черноголовка, Россия

³Университет науки и технологий МИСИС, г. Москва, Россия

*E-mail: 5taras@mail.ru

Развивается теория поперечного магнетосопротивления в слоистых квазидвумерных металлах. Используя формулу Кубо–Стреды [1, 2], мы вычисляем холловскую внутрислоевую проводимость в магнитном поле, перпендикулярном проводящим слоям квазидвумерного металла, пренебрегая межэлектронным взаимодействием и влиянием фононов. Мы выводим аналитические выражения для амплитуды и фазы магнитных квантовых осцилляций и так называемых медленных (разностных) осцилляций и анализируем их поведение в зависимости от нескольких параметров: напряженности магнитного поля, интеграла межслоевого перескока электронов и ширины уровней Ландау. Магнитные квантовые осцилляции, как и медленные осцилляции, внутрислоевой и межслоевой проводимостей приблизительно находятся в противофазе в слабом магнитном поле и синфазны в сильном поле. Амплитуда медленных осцилляций холловской компоненты внутрислоевой проводимости меняет знак при $\omega_c \tau_0 = 1/\sqrt{3}$ в отличие от диагональной компоненты, меняющей знак при $\omega_c \tau_0 = \sqrt{3}$ [3], где ω_c — циклотронная частота, τ_0 — время свободного пробега электронов в нулевом магнитном поле. Мы также находим тензор магнетосопротивления, выписывая выражения для его магнитных квантовых и медленных осцилляций. Амплитуда медленных осцилляций холловской и диагональной компонент тензора внутрислоевого сопротивления также зануляются при особых значениях $\omega_c \tau_0$. При вычислении тензора магнетосопротивления встает важный вопрос: следует ли его находить из усреднённого по термодинамическому ансамблю тензора магнетопроводимости или усреднять по термодинамическому ансамблю уже после обращения тензора магнетопроводимости при нулевой температу-

ре. В режиме сильных квантовых осцилляций ответы заметно различаются. Полученные результаты полезны для анализа экспериментальных данных по магнетосопротивлению в различных сильно анизотропных квазидвумерных металлах, так как на эксперименте часто измеряются холловское сопротивление и диагональная компонента тензора магнетосопротивления.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 21-52-12027.

Список литературы

- [1] Smrcka L., Streda P., Phs J. C: *Solid State Phys.*, **10**, 2153 (1977).
- [2] Chadova K., Electronic transport within the Kubo-Bastin Formalis, Ludwig-Maximilian-Universitat-Munchen (2017).
- [3] Mogilyuk T.I., Grigoriev P.D., *Phys. Rev. B*, **98**, 045118 (2018).

Ступеньки Шапиро при синхронизации волны зарядовой плотности акустическими волнами

М. В. Никитин, В. Я. Покровский, Д. А. Кай, С. Г. Зыбцев,
В. В. Колесов, В. В. Кашин

ИРЭ им. В. А. Котельникова РАН, Россия

Волна зарядовой плотности (ВЗП) — коллективное состояние электронов (электронный кристалл), которое можно рассматривать как упругую среду, способную деформироваться и скользить при приложении электрического поля [1]. Недавно было обнаружено влияние динамической деформации кристалла на проводимость ВЗП в квазиодномерном проводнике TaS_3 [2]: наблюдалась синхронизация ВЗП (ступеньки Шапиро) при возбуждении в образце механических вибраций на частотах до 1 МГц. Возникновение «механических» ступенек Шапиро (СШ) свидетельствует об аномально сильной модуляции тока ВЗП в режиме синхронизации. В работе [3] было теоретически показано, что ультразвук или поверхностные акустические волны (ПАВ) могут индуцировать СШ.

В настоящей работе изучалась возможность наблюдения СШ в нитевидных образцах квазиодномерных проводников при воздействии на

них ПАВ и ультразвуковых волн. Было исследовано соединение NbS_3 II фазы, в котором ВЗП существует при комнатной температуре.

Для изучения воздействия ПАВ были отобраны образцы NbS_3 с характерными размерами (д./ш./т.) 20 мкм/500 нм/300 нм. Образцы располагались на пластине из ниобата лития, LiNbO_3 , с нанесенными на неё встречно-штыревыми преобразователями (ВШП). Вискеры нанометровой толщины прочно фиксируются на поверхности благодаря электростатическим силам. Кроме того, ВЗП в тонких образцах обладает высокой когерентностью, что позволяет наблюдать в них чёткие СШ. Были измерены ВАХ образцов при различных частотах. Обнаружено, что на частоте резонанса ПАВ (42 МГц) на ВАХ наблюдалось подавление порогового поля, а также особенности, имеющие вид СШ. Особенности наблюдались только на частоте акустического резонанса. Таким образом, можно заключить, что в режиме возбуждения ПАВ на ВАХ можно наблюдать эффекты синхронизации ВЗП. Действительно, аналогичные особенности возникают при подаче непосредственно на образец электрического поля на той же частоте.

Также был предложен другой способ высокочастотного механического воздействия на образец: с помощью стоячей акустической волны в кварцевом резонаторе. Образец NbS_3 длиной 85 мкм и шириной 800 нм был закреплён на пластине, в которой возбуждалась продольная мода на частоте акустического резонанса 38.2 МГц. При такой конфигурации можно ожидать большей, чем в случае ПАВ, деформации образца. При этом, воздействие на образец электрического поля снижается благодаря экранирующему слою металла между образцом и резонатором. Было обнаружено подавление порогового поля на частоте 19.5 МГц, заметно ниже резонансной. На этой частоте также наблюдались СШ.

На данный момент мы не можем однозначно различить воздействие на образец механической деформации и ВЧ электрического поля, возникающего в кварцевом резонаторе или ниобате лития. Согласно [3], различить СШ, вызванные ультразвуковыми или электрическими колебаниями, возможно, сравнивая их амплитуды на различных гармониках: ожидается, что ультразвук усиливает нечётные СШ сильнее, чем чётные. В докладе также планируется обсудить другие отличия «механических» и «электрических» СШ. Так, в условиях наблюдения «электрических» СШ ВЧ электрическое поле существенно превышает постоянное, застав-

ляя ВЗП двигаться поочерёдно то в одном направлении, то в противоположном. Воздействие же механических колебаний сводится к модуляции потенциала пиннинга. В этом случае возможна лишь модуляция дрейфовой скорости ВЗП, без изменения её направления. Это отличие должно проявиться при больших значениях ВЧ напряжений и, соответственно, деформации образца.

Отметим, что наблюдение выраженных особенности на ВАХ нитевидных образцов с ВЗП, появляющихся при воздействии ПАВ, означает, что эти образцы являются готовыми детекторами ультразвуковых колебаний с частотным разрешением.

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

Список литературы

- [1] Pokrovskii Ya., Zybtev S. G., Nikitin M. V., Gorlova I. G., Nasretdinova V. F., and Zaitsev-Zotov S. V., *Uspekhi. Fiz. Nauk* **183**, 33 (2013) [Physics-Uspekhi 56, 29 (2013)].
- [2] Nikitin M. V., Zybtev S. G., Pokrovskii V. Ya. and Loginov B. A., *Appl. Phys. Lett.* 118, 223105 (2021).
- [3] Michiyasu Mori and Sadamichi Maekawa, *Appl. Phys. Lett.* 122, 042202 (2023).

Усиление спиновой поляризации, созданной током, в квантовой точке за счёт эффекта Кондо

В. Н. Манцевич¹, Д. С. Смирнов^{2,*}

¹МГУ им. М. В. Ломоносова, г. Москва, Россия

²ФТИ им. А. Ф. Иоффе, г. Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: smirnov@mail.ioffe.ru

Локализованные спины в квантовых точках активно исследуются в последнее время в виду перспектив их применения для обработки квантовой информации. Одним из способов создания спиновой поляризации являются эффекты ориентации спинов током и спиновый эффект

Холла [1]. Однако, степень спиновой поляризации, как правило, невелика из-за слабости спин-орбитального взаимодействия.

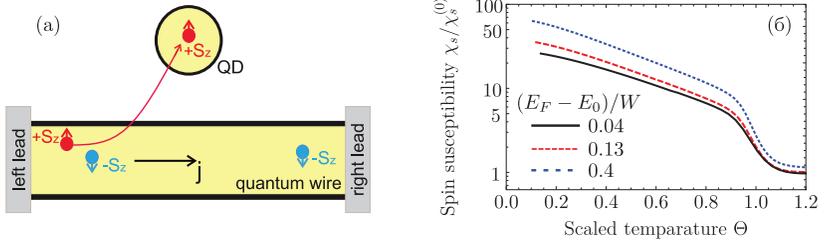


Рис. 1. (а) Схематическое изображение квантовой точки, связанной с квантовым проводом спин-зависимым туннелированием. (б) Отношение спиновых восприимчивостей по отношению к электрическому току, вычисленных с учётом и без учёта многочастичных корреляций, как функция температуры

Нами предложен эффект накопления спиновой поляризации в квантовой точке, туннельно связанной с квантовым проводом, по которому течёт электрический ток, см. рис. 1, а [2]. Эффект возникает из-за того, что спин-орбитальное взаимодействие приводит к спин-зависимому туннелированию и делает квазистационарные состояния электронов и дырок в квантовой точке хиральными. Методом неравновесных функций Грина выполнен учёт многочастичных корреляций между квантовой точкой и квантовым проводом, приводящих к эффекту Кондо [3]. Учёт этих корреляций может приводить к увеличению спиновой восприимчивости квантовой точки по отношению к электрическому току при низких температурах почти на два порядка, см. рис. 1, б. Предложенные эффекты могут наблюдаться в современных наноструктурах на основе двумерного электронного или дырочного газа [4].

Список литературы

- [1] Dyakonov M. I., *Spin Physics in Semiconductors* (Springer, 2017).
- [2] Mantsevich V. N. and Smirnov D. S., *Nanoscale Horiz.* **7**, 752 (2022).
- [3] Mantsevich V. N. and Smirnov D. S., arXiv:2303.11778 (2023).
- [4] Smith L. W., et al., *Phys. Rev. Lett.* **128**, 027701 (2022).

Коллективная локализация дырок в сильно- коррелированном p -GaAs/AlGaAs с высокой подвижностью

И. Ю. Смирнов¹, И. Л. Дричко¹, А. В. Суслов², L. N. Pfeiffer³,
K. W. West³, Ю. М. Гальперин^{1,4}

¹ФТИ им. А. Ф. Иоффе, г. Санкт-Петербург, Россия

²National High Magnetic Field Laboratory, Tallahassee, FL 32310, USA

³Princeton University, Princeton, NJ 08544, USA

⁴Department of Physics, University of Oslo, 0316 Oslo, Norway

Если энергия кулоновского взаимодействия носителей заряда, E_{ee} , превышает энергию Ферми, E_F , то в двумерных системах с высокой подвижностью носителей заряда, при низких температурах ($T < 100$ мК) и в больших магнитных полях можно ожидать образования т. н. вигнеровского стекла — электронного кристалла, искаженного беспорядком. В высококачественных структурах n -GaAs/AlGaAs этот эффект наблюдался экспериментально во многих работах (см., например, [1]).

В системах p -GaAs/AlGaAs эффективная масса тяжелых дырок, ответственных за перенос заряда, почти в 8 раз больше, чем эффективная масса электронов в n -GaAs/AlGaAs, поэтому можно ожидать сильного влияния эффектов дырочно-дырочного взаимодействия на кинетические эффекты. Определение этого влияния и было целью настоящей работы. Кроме того, такая большая величина эффективной массы дырок в p -GaAs/AlGaAs ($m^* \sim 0.5m_0$) приводит к росту коэффициента $\kappa = E_{ee}/\hbar\omega_c$, который является мерой смещения уровней Ландау.

Исследования проводились акустическими методами на образцах p -GaAs/AlGaAs с шириной квантовой ямы 17 нм, концентрацией дырок 1.2×10^{11} см⁻² и их подвижностью 1.76×10^6 см²/Вс при $T = 0.3$ К. Измерялись поглощение, Γ , поверхностной акустической волны (ПАВ) и изменение ее скорости, $\Delta V/V$, при температурах (20–300) мК в магнитных полях до 18 Тл, в частотном диапазоне (28–306) МГц. Из измеренных одновременно в эксперименте величин Γ и $\Delta V/V$ были рассчитаны компоненты высокочастотной проводимости σ_1 и σ_2 в формуле $\sigma^{AC}(\omega) = \sigma_1(\omega) - i\sigma_2(\omega)$.

Рисунок 1(а) демонстрирует зависимость вещественной части проводимости σ_1 от магнитного поля при разных температурах. Кроме цело-

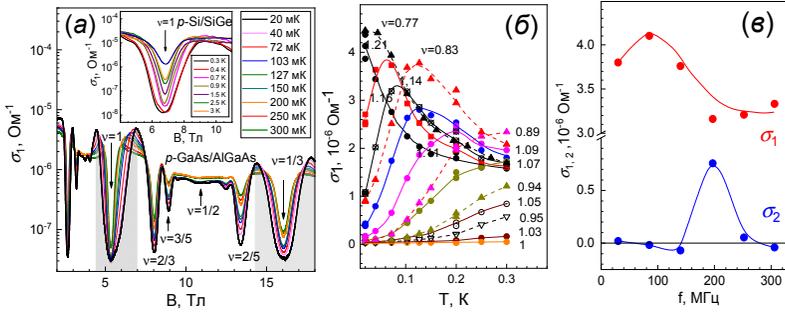


Рис. 1. (а) Зависимость σ_1 от магнитного поля B при разных температурах, $f = 85$ МГц, вставка — $\sigma_1(B)$ в структуре $p\text{-Si/SiGe}$; (б) зависимость σ_1 от температуры для разных ν вблизи $\nu = 1$, (в) зависимость σ_1 и σ_2 от частоты для $\nu = 1.2$, $T = 20$ мК

численного ($\nu = 1$) квантового эффекта Холла наблюдаются еще и осцилляции, соответствующие дробному квантовому эффекту Холла при $\nu = 2/3$, $2/5$ и $1/3$. Обращает на себя внимание наличие так называемых «крыльев» в магнитных полях вокруг $\nu = 1$, $\nu = 2/3$, $\nu = 2/5$ и $\nu = 1/3$. Для сравнения, на вставке к рисунку 1(а) показана осцилляция в окрестности $\nu = 1$ при разных температурах для образца $p\text{-Si/SiGe}$ с концентрацией дырок $p = 1.6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и подвижностью $1 \times 10^4 \text{ см}^2/\text{Вс}$. Видно, что в этом образце никаких «крыльев» в магнитных полях вблизи $\nu = 1$ не образуется. Анализ температурных, магнито-полевых и частотных зависимостей компонент σ_1 и σ_2 высокочастотной проводимости для чисел заполнения вокруг $\nu=1$ ($r_s = E_{ee}/E_F = 18.7$) показывает, что в области магнитных полей, соответствующих $0.96 < \nu < 1.03$, носители заряда (дырки) локализованы в случайном потенциале примесей (одночастичная, андерсоновская локализация). Механизм высокочастотной проводимости — прыжковый [2]. По мере изменения магнитного поля, когда числа заполнения отклоняются от $\nu = 1$, именно в области «крыльев», начинают образовываться делокализованные дырки, число которых возрастает при росте указанного отклонения. В тривиальном случае невзаимодействующих носителей эти дырки образовали бы металлическое состояние, которому соответствует отсутствие частотных зависимостей σ_1 и σ_2 . Однако при $\nu = 1.2$ выполняется соотношение $\sigma_1/|\sigma_2| \gg 1$, температурная зависимость $\sigma_1 \sim 1/T$, а частотная зависимость компонент σ^{AC} соответствует ин-

дуктивному характеру отклика (рис. 1(в)). Эти факты свидетельствуют о коллективной локализации носителей, которая проявляется в образовании кластеров вигнеровского стекла [3]. В магнитных полях, соответствующих возникновению «крыльев»: $0.96 < \nu < 0.77$ и $1.03 < \nu < 1.2$, наблюдается постепенный переход от одноэлектронной локализации к коллективной, при этом наблюдается изменение характера температурной зависимости σ_l : от роста при увеличении температуры к уменьшению при росте температуры (рис. 1,б).

Вблизи $\nu = 1/3$ ($r_s = 32.5$) в области магнитных полей, соответствующих $0.32 < \nu < 0.34$, наблюдается несжимаемая жидкость, соответствующая состоянию системы в режиме дробного квантового эффекта Холла. При изменении магнитного поля в областях, соответствующих $0.3 < \nu < 0.32$ и $0.34 < \nu < 0.37$, также происходит постепенный переход к коллективной локализации, которая характеризуется, как и в предыдущем случае для $\nu = 1$, изменением характера температурной зависимости σ_l и частотными зависимостями σ_1 и σ_2 ($\nu = 0.37$ и 0.3), аналогичными рис. 1,б и 1,в. Причиной этого перехода является подавление дробного квантового эффекта Холла в пользу образования вигнеровского стекла при отклонении магнитного поля от $\nu = 1/3$ в результате сильного эффекта смешивания (mixing) уровней Ландау [4].

Перечисленные выше экспериментальные факты привели нас к заключению, что в исследуемом образце *p*-GaAs/AlGaAs даже с $p = 1.2 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$, было успешно зарегистрировано образование доменов вигнеровского кристалла при сравнительно высокой концентрации дырок (обычно образование вигнеровского кристалла исследуют при $p \ll 10^{11} \text{ см}^{-2}$) на фоне одноэлектронных локализованных состояний ($\nu = 1$) и дробного квантового эффекта Холла при $\nu = 1/3$.

Список литературы

- [1] Shayegan M., in *Perspectives in Quantum Hall Effects*, edited by Das Sarma S. and Pinczuk A. (Wiley, New York, 1997) pp. 343–383. Shayegan, M., *Nature Reviews Physics* **4**, 212 (2022).
- [2] Galperin Y. M., Gurevich V. L., and Parshin D. A., in *Hopping transport in solids*, edited by Pollak M. and Shklovskii B. (Elsevier, New York, NY, 1991) pp. 81–124.
- [3] Fogler M. M. and Huse D. A., *Phys. Rev. B* **62**, 7553 (2000).
- [4] Zhao J., Zhang Y., and Jain J. K., *Phys. Rev. Lett.* **121**, 116802 (2018).

**Разупорядоченность в структуре кристаллов
органического проводника κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Cl₂
и его влияние на проводящие свойства**

Э. И. Хасанова^{*}, А. В. Кузьмин

*Институт физики твердого тела имени Ю. А. Осипьяна
Российской академии наук (ИФТТ РАН), Россия
E-mail: hasanova.leo@issp.ac.ru*

Металлическая проводимость в низкоразмерных органических кристаллах на основе плоских π -сопряженных молекул BEDT-TTF (или ET) реализуется за счет их особой кристаллической структуры: слоистой укладки донорных молекул [1] с относительно большим перекрыванием фронтальных молекулярных орбиталей (МО). Благодаря высокой степени взаимодействия соседних молекул, в таких слоях могут образовываться узкие энергетические зоны электронных состояний. Донорные слои, как правило, 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 .

Среди представителей широкого класса ET-проводников соль κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Cl₂ (или сокращенно κ -Cl) выделяется своими нетривиальными физико-химическими свойствами [2]. Кристаллы κ -Cl имеют слоистую структуру [3], причем молекулы ET в проводящем слое димеризуются и образуют треугольную решетку, что является характерным признаком κ -фазы. Среди необычных свойств можно отметить скачкообразное изменение сопротивления кристаллов κ -Cl в зависимости от приложенного напряжения, что позволяет говорить о возможности создания логических элементов на их основе [4]. Согласно литературным данным, проводящие свойства соли κ -Cl сильно зависят от деталей внутренней структуры катионных и анионных слоев. Существует ряд работ, предполагающих связь проводимости со структурным бес-

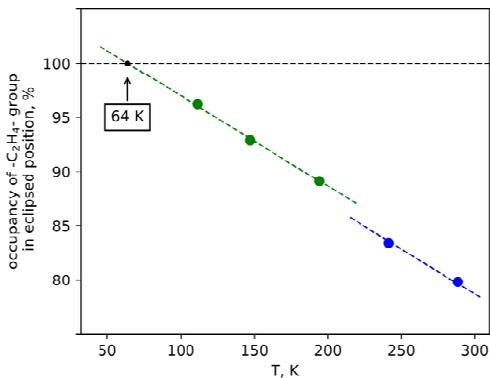
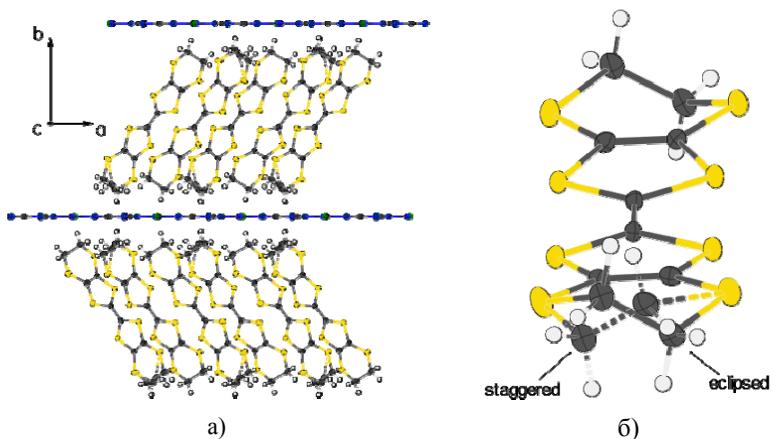
порядком в этиленовых группах молекул ET [4]. Считается, что данный тип беспорядка имеет термоактивационную природу.

В данной работе методом РСА были исследованы особенности температурного поведения беспорядка в этиленовых группах ET молекул в кристаллах κ -Cl в интервале температур 100–300 К. В рамках этого интервала были экспериментально уточнены параметры кристаллической решетки с шагом по температуре в 10 К. Исходя из полученных данных были построены кривые температурного поведения параметров $a(T)$, $b(T)$, $c(T)$ и объема $V(T)$ элементарной ячейки. Анализ температурных зависимостей позволил обнаружить особенность в области 180–240 К, связанную с скачкообразным изменением коэффициента термического расширения. Данная особенность и раньше наблюдалась для некоторых соединений ET, по-видимому, она связана с влиянием анионного слоя [1], однако вопрос о причинах ее возникновения до сих пор остается дискуссионным. При температурах 289, 241, 194, 147 и 112 К были проведены полные рентгенодифракционные эксперименты с последующим рентгеноструктурным анализом (структура соли κ -Cl изображена на рис. 1,а).

Детальный кристаллохимический анализ структурных данных позволил установить температурное поведение беспорядка в концевых этиленовых группах ET молекул (рис. 1,б).

Температурные зависимости параметра заселённости этиленовых групп (рис. 1, в) указывают на то, что возможное полное упорядочение в структуре катионного слоя достигается в интервале 44–64 К, при этом в области 180–240 К на графиках заселённости наблюдается такая же особенность, как и на графиках параметров ячейки.

На основе полученных структур методами квантово-химического моделирования, с использованием полуэмпирического расширенного метода Хюккеля, было проанализировано, как структура электронных состояний в катионном слое соединения зависит от беспорядка данного типа. В частности, результаты расчетов позволили установить, как плотность состояний, энергия Ферми и зарядовое распределение внутри димеров меняется при перераспределении заселённости концевых групп. Были выявлены основные типы диспропорционирования заряда между молекулами в димере. Показано, что неравномерное распределение электронной плотности в димере ET₂ может быть связано с «переключением» ориентаций $-C_2H_4-$ концевых групп и локальным понижением симметрии, а именно, нарушением центра инверсии внутри димера ET₂.



в)

Рис. 1. Структура кристаллов соли κ -Cl: а) упаковка проводящих и изолирующих слоев, б) две ориентации этиленовых групп молекул ET: заторможенная (staggered) и заслоненная (eclipsed), заселённость заслоненной (eclipsed) конфигурации в зависимости от температуры

Список литературы

- [1] Прохорова Т. Г., Ягубский Э. Б. Органические проводники и сверхпроводники на основе катион-радикальных солей бис(этилентидио)тетрафульвалена с супрамолекулярными трис(оксалато)металланными анионами // *Успехи химии*. 2017. Т. 86, № 2. С. 164–180.

- [2] Yagubskii E. B., Kushch N. D., Kazakova A. V., Buravov L. I., Zverev V. N., Manakov A. I., Khasanov S. S., Shibaeva R. P. Superconductivity at Normal Pressure in κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Cl₂ Crystals // *JETP Letter*. 2005. V. 82, № 2. P. 93–95.
- [3] Zverev V. N., Manakov A. I., Khasanov S.S., Shibaeva R. P., Kushch N. D., Kazakova A. V., Buravov L. I., Yagubskii E. B., Canadell E. Transport properties and structural features of the ambient-pressure superconductor κ' -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Cl₂ // *Phys. Rev. B*. 2006. V. 74, № 10. P. 104504.
- [4] Huang Y., Hu Y., Ren S. Low-power anisotropic molecular electronic memristors // *Applied Materials Today*. 2022. V. 29. P. 101569.

Угловые майорановские моды в двумерном сильно коррелированном топологическом сверхпроводнике высокого порядка

С. В. Аксенов¹, А. Д. Федосеев¹, М. С. Шустин¹, А. О. Злотников¹

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

Двумерные топологические сверхпроводники и изоляторы высокого порядка отличаются от традиционных тем, что их бесщелевые возбуждения имеют размерность на два меньше, чем размерность системы [1]. Угловые майорановские состояния, возникая в сверхпроводящих системах, отделены энергетической щелью как от краевых, так и от объемных возбуждений. Учитывая строгую локализацию в углах двумерной системы, такие объекты могут оказаться более привлекательными с точки зрения реализации топологически защищенных квантовых вычислений по сравнению с классическими майорановскими состояниями [2, 3]. На сегодняшний день ведутся дискуссии относительно того, какой из инвариантов наиболее полно описывает топологические фазы высокого порядка как в системах без взаимодействия, так и в ситуации, когда зарядовые корреляции играют существенную роль. Наряду с анализом дираковской массы [4–6], вычисление топологических индексов предлагается проводить, например, на основе собственных значений обратной функции Грина [7], электрических мультипольных моментов [8], поляризации

и других свойств квантовой запутанности [9, 10], фазы Бэрри [11]. В настоящей работе мы приводим подробный анализ дираковской массы для двумерного топологического сверхпроводника высокого порядка (ТСВП) с сильными электронными корреляциями в режиме $U \rightarrow \infty$ (где U — интенсивность кулоновского отталкивания на одном узле). На основе полученных выражений анализируется топологическая фазовая диаграмма.

Получено аналитическое выражение для волновых функций крайних состояний и соответствующего им дираковского энергетического спектра в топологическом изоляторе при формировании ансамбля хаббардовских фермионов в режиме предельно сильных кулоновских корреляций (параметр взаимодействия $U \rightarrow \infty$). По сравнению с невзаимодействующим случаем полученный дираковский спектр имеет уменьшенный угол наклона и смещенную дираковскую точку. При этом показано, что во всей параметрической области реализации отмеченных решений дираковские массы на смежных границах квадратной решетки имеют разные знаки, приводя к формированию фазы топологической сверхпроводимости высокого порядка, в которой реализуются майорановские моды, локализованные в углах решетки.

В ограниченных областях параметров с бесщелевыми возбуждениями в объемном энергетическом спектре топологического изолятора (тривиальная фаза для изолятора), полученном при рассмотрении периодических граничных условий вдоль обоих направлений квадратной решетки, также продемонстрирован механизм появления угловых мод (см. рис. 1). В этих областях дираковского решения для крайних состояний не существует и определенные в работе дираковские массы становятся неприменимыми. Однако в этом случае куперовские спаривания могут индуцировать щель как в объемном, так и в краевом спектрах. В результате в 2D-системе формируются угловые моды с нулевой энергией возбуждения, которые связаны с майорановскими угловыми модами в фазе с нетривиальным отношением дираковских масс на разных границах посредством изменения параметров без закрытия щелей в спектрах обоих типов. Таким образом, отмеченные моды также являются топологически защищенными. Также доказано, что в фазе топологической сверхпроводимости высокого порядка закрытие щели в краевом спектре не приводит к топологическому фазовому переходу. В остальных областях параметров объемный спектр остается бесщелевым даже при наличии сверхпроводимости, и крайних, а также угловых состояний не возникает. Результаты работы опубликованы в [12].

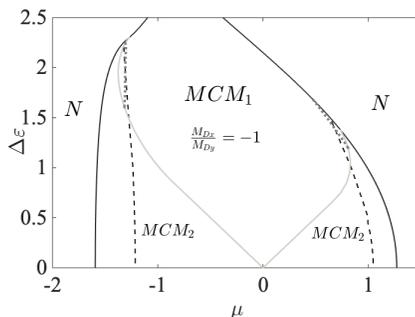


Рис. 1. Топологическая фазовая диаграмма ТСВП в переменных μ — $\Delta\varepsilon$ с фазой MCM_1 , в которой отношение дираковских масс равно -1 и реализуются майорановские угловые моды. В фазе MCM_2 дираковское решение отсутствует, однако в ней также формируются майорановские угловые моды. В nodальных фазах N объемный спектр ТСВП является бесщелевым и топологических состояний не возникает. Штриховыми линиями показаны условия закрытия щели в краевом спектре ТСВП, однако на данных линиях топологических переходов не происходит. Пунктирные линии в фазе MCM_1 — приближенные решения, полученное из обращения в нуль дираковских масс

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда № 22-22-20076, Красноярского краевого фонда науки.

Список литературы

- [1] Zlotnikov A. O., Shustin M. S., and Fedoseev A. D. *J. Supercond. Nov. Magn.* **34**, 3053 (2021).
- [2] Zhang S.-B., Rui W. B., Calzona A., Choi S.-J., Schnyder A. P., and Trauzettel B. *Phys. Rev. Res.* **2**, 043025 (2020).
- [3] Zhang S.-B., Calzona A., and Trauzettel B. *Phys. Rev. B* **102**, 100503(R) (2020).
- [4] Langbehn J., Peng Y., Trifunovic L., von Oppen F., and Brouwer P. W. *Phys. Rev. Lett.* **119**, 246401 (2017).
- [5] Khalaf E. *Phys. Rev. B* **97**, 205136 (2018).
- [6] Fedoseev A. D. *Phys. Rev. B* **105**, 155423 (2022).
- [7] Li H., Kee H.-Y., and Kim Y. B. *Phys. Rev. B* **106**, 155116 (2022).
- [8] Wheeler W. A., Wagner L. K., and Hughes T. L. *Phys. Rev. B* **100**, 245135 (2019).
- [9] Fukui T., Hatsugai Y. *Phys. Rev. B* **98**, 035147 (2018).

- [10] You Y., Bibo J., and Pollmann F. *Phys. Rev. Research* **2**, 033192 (2020).
- [11] Araki H., Mizoguchi T., and Hatsugai Y. *Phys. Rev. Research* **2**, 012009 (2020).
- [12] Aksenov S. V., Fedoseev A. D., Shustin M. S., Zlotnikov A. O. *Phys. Rev. B* **107**, 125401 (2023).

Тонкая структура ферми-поляронов в двумерных полупроводниках

З. А. Яковлев, М. М. Глазов

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

В монослоях дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ) наблюдаются экситоны с энергиями связи $\sim 200\text{--}500$ meV и трехчастичные кулоновские комплексы — трионы или заряженные экситоны с энергией связи $\sim 20\text{--}30$ meV [1]. Большие энергии связи позволяют производить разнообразные экспериментальные исследования и управлять тонкой структурой энергетического спектра кулоновских комплексов в том числе за счет упругих напряжений. Линейное расщепление радиационного дублета экситона в атомарно-тонких ДПМ при наличии упругих деформаций наблюдалось и было описано теоретически в недавней работе [2]. Вопрос о тонкой структуре состояний трионов до сих пор остается открытым. В данной работе построена последовательная теория тонкой структуры трионов в монослоях ДПМ.

В отличие от нейтральных экситонов трехчастичные трионные состояния описываются ферми-статистикой. Это приводит к тому, что воздействие инвариантных по отношению к инверсии времени упругих деформаций не приводит к расщеплению трионных состояний. Однако, строго говоря, оптическое возбуждение электронного газа создает трионы, скоррелированные с дырками в ферми-море резидентных электронов. Тем самым в отражении, поглощении и люминисценции полупроводников наблюдаются ферми-поляроны (тетроны Суриса) [3]. Таким образом, ферми-поляроны состоят из четырех ферми-частиц и описываются бозе-статистикой, что снимает запрет на их анизотропное расщепление.

С использованием волновых функций, учитывающих корреляции между трионом и дыркой в море Ферми [3] а также методом функций

Грина, аналитически и численно найдены спектры поглощения ферми-поляронов при наличии анизотропной упругой деформации. Определены энергии и расщепления радиационных дублетов заряженных экситонов в зависимости от величины деформации и энергии Ферми E_F . На рис. 1 показаны результаты расчетов для монослоя WSe_2 , где имеется два ферми-полярона: внутри и междолинный [1]. При $E_F = 0$ каждое состояние двукратно вырождено по поляризации. При этом амплитуда поглощения определяется количеством резидентных носителей, поэтому при $E_F = 0$ поглощение отсутствует. Вырождение снимается при $E_F \neq 0$, причем каждый из уровней линейно поляризован в главных осях тензора деформаций. Зависимости расщепления внутримолинного и междолинного трионов от энергии Ферми представлены на рис. 2. При малых концентрациях резидентных электронов расщепление линейно как по энергии Ферми, так и по деформации и описывается выражением

$$\hbar\Omega_{FP} = \frac{\left(\frac{M_X}{M_T}\right)^3}{2 \sinh^2 \left[\frac{1}{2} \left(\frac{M_X}{M_T}\right)^2 \right]} \frac{\hbar\Omega_X E_F}{\Delta}, \quad (1)$$

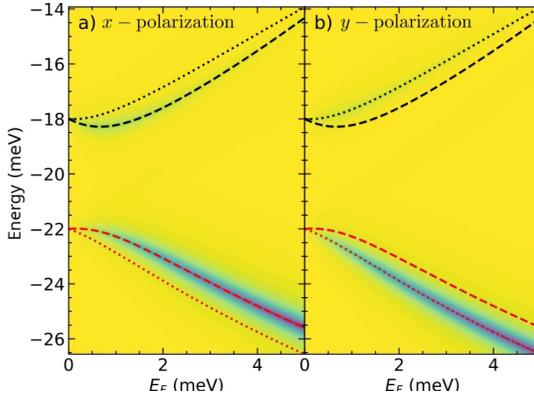


Рис. 1. Спектр поглощения а) x -поляризованного света и б) y -поляризованного света для WSe_2 в зависимости от энергии Ферми. Красные и черные линии показывают энергии внутри- и междолинного дублетов ферми-поляронов, соответственно. Штриховые линии соответствуют x -поляризованным уровням, линии из точек — y -поляризованным уровням

где M_X — масса экситона, M_T — масса триона, $\hbar\Omega_X \propto u_{xx} - u_{yy}$ — наведенное деформацией расщепление нейтрального экситона, u_{ij} — компоненты тензора деформаций, x и y — его главные оси, Δ — разность энергий внутри- и междолинного трионов [1]. Развита модель описывает недавний эксперимент [5].

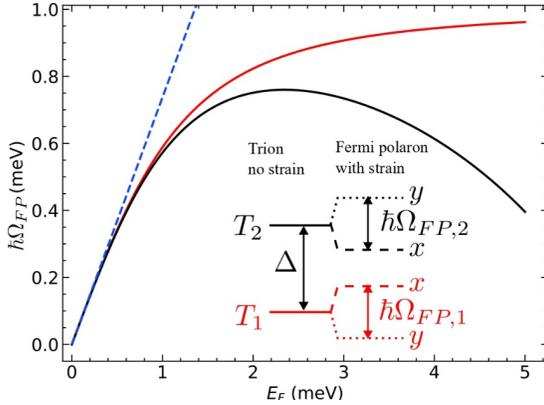


Рис. 2. Расщепление энергии ферми-поляронов. Красные и черные линии показывают энергии внутри- и междолинного дублетов ферми-поляронов, соответственно. Синяя пунктирная линия соответствует линейному режиму малых энергий Ферми (1). Вставка показывает тонкую структуру ферми-полярона в отсутствие и при наличии натяжения

Список литературы

- [1] Courtade E., Semina M., Manca M., Glazov M. M., Robert C., Cadiz F., Wang G., Taniguchi T., Watanabe K., Pierre M., Escoffier W., Ivchenko E. L., Renucci P., Marie X., Amand T., and Urbaszek B., *Phys. Rev. B* **96** 085302 (2017).
- [2] Glazov M. M., Dimberger F., Menon V. M., Taniguchi T., Watanabe K., Bougeard D., Ziegler J. D., Chernikov A., *Phys. Rev. B* **106** 125303 (2022).
- [3] Suris R. A., Kochereshko V. P., Astakhov G. V., Yakovlev D. R., Ossau W., Nurnberger J., Faschinger W., Landwehr G., Wojtowicz T., Karczewski G., and Kossut J., *Physica Status Solidi (b)* **227(2)** 343–352 (2001).
- [4] Glazov M. M., *J. Chem. Phys.* **153** 034703 (2020).
- [5] Jasinski J., Balmgarkashi A., Piazza V., Dede D., Surrente A., Baranowski M., Maude D. K., Banerjee M., Frisenda R., Castellanos-Gomez A., Fontcuberta i Morral A., Plochocka P., *2D Materials* **9** 045006 (2022).

ТОПОЛОГИЧЕСКИ НЕТРИВИАЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И СТРУКТУРЫ

Эффекты межзонного перекрытия в дираковском гамильтониане: наклон, анизотропия и псевдоэрмитовость

З. З. Алисултанов¹, Э. Г. Идрисов¹, Н. А. Демиров²

¹Московский физико-технический институт (МФТИ),
г. Долгопрудный, Московская обл., Россия

²Объединенный институт высоких температур РАН (ОИВТРАН),
г. Москва, Россия

Показано, что в системах с дираковскими точками, возникающими при пересечении зон, принадлежащих эквивалентным представлениям группы симметрии возможно перекрытие этих зон. Такое перекрытие приводит к наклону и дополнительной анизотропии дираковского спектра, а также перенормировке скорости. В то же время, учет перекрытия не нарушает общих условий существования устойчивой точки пересечения зон. Эффективный дираковский гамильтониан при наличии перекрытия зон является псевдоэрмитовым (спектр вещественный) и соответствует эффективному действию безмассового спинорного поля в искривленном пространстве-времени.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (№ 22-72-00110).

Список литературы

- [1] Alisultanov Z. Z., Idrisov E. G., *Phys. Rev. B* **107**, 085135 (2023).
- [2] Алисултанов З. З., Демиров Н. А., *Письма ЖЭТФ*, **117**(10) (2023).

$SU(2)$ интегральный подход для фракционированного топологического изолятора

К. К. Кешарпу, Е. А. Кочетов, О. Г. Садыкова

*Лаборатория теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова
Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия*

В ключевой статье Холдейна доказано, что магнитное поле не является необходимым для возникновения квантового эффекта Холла (КЭХ). В модели Халдейна КЭХ возникает из-за мнимых прыжков электронов на ближайшего соседа. Однако модель Холдейна построена в рамках теории электронной зонной структуры, в которой отсутствует сильная электронная корреляция. Отсюда, естественно, возникает вопрос, возникает ли в случае сильной электронной корреляции — когда обычная электронная зонная теория не работает — КЭХ в отсутствие магнитного поля?

В настоящей работе мы рассматриваем систему сильно коррелированных электронов, перемещающихся по двумерной решетке, которая описывается моделью Хаббарда при бесконечно сильном локальном отталкивании $U \approx \infty$. В этом случае квантовые числа электрона распадаются. Следовательно, электрон не является четко определенной квазичастицей, и система не может быть описана электронной зонной структурой.

Сначала мы сформулируем теорию эффективного низкоэнергетического $su(2|1)$ -интегрального действия по траекториям для описания сильно коррелированных электронов. В этом случае электроны можно описать как бесспиновые заряженные фермионные поля ξ_j , которые известны как холоны или допоны, и спиновые бозонные поля z_i , известные как спиноны. Поле z_i описывает спиновые степени свободы в супералгебре $su(2|1)$. На самом деле эту супералгебру можно рассматривать как простейшее расширение спиновой $su(2)$ алгебры с фермионами, описываемыми числами Грассмана ξ_i . Наш второй шаг — ограничить динамику спина, зафиксировав классический фон спина, чтобы нарушить симметрию относительно обращения времени. Таким образом мы приходим к топологическому зонному изолятору, который возникает из-за квазичастиц ξ без участия электронной зонной структуры. Наш главный результат таков: сильные корреляции могут управлять КЭХ без внешнего магнитного поля при условии, что холоны приобретают собственную

зонную структуру, которая, если она имеет щель, может быть классифицирована по числам Черна. Это так, если спиновые — другая фракционированная степень свободы — допускают их описание через теорию среднего поля. Такой подход может быть полезен для описания сильно коррелированных (из-за большого кулоновского потенциала на атомах) электронов, если можно полностью подавить квантовые спиновые флуктуации.

Список литературы

- [1] Maciejko J. and Fiete G. A., *Nature Physics* **11**, 385 (2015).
- [2] Kesharpu K. K., Kochetov E. A., and Ferraz A., arXiv:2212.02812 [cond-mat].
- [3] Ferraz A. and Kochetov E., *Phys. Rev. B* **105**, 245128 (2022).

Термоэлектрические свойства топологических изоляторов теллуридов висмута-мышьяка

А. С. Апрелева, В. Г. Кытин, В. А. Кульбачинский

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

Теоретически было показано, что целый класс полупроводников Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 являются топологическими изоляторами [1]. Оказалось, что именно учёт спин-орбитального взаимодействия в этих кристаллах приводит к инверсии двух ближайших к уровню Ферми зон с разной четностью, результатом чего является их нетривиальная топологическая классификация. Существование топологических поверхностных состояний в кристаллах Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 , Sb_2Te_3 было установлено в различных экспериментах [2–6]. С другой стороны, Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 , Sb_2Te_3 — это хорошо известные термоэлектрики для применения при комнатной температуре. Эффективность термоэлектрического материала выражается параметром $ZT = \sigma S^2 T / \kappa$, где σ — проводимость, S — коэффициент Зеебека, κ — теплопроводность. Вариация транспортных свойств, а именно σ , S и κ термоэлектрических материалов, важна для достижения лучших термоэлектрических характеристик. Материалы типа Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 тщательно исследованы с целью понимания их термоэлектрических свойств

и их связи со структурой, точечными дефектами, концентрацией носителей заряда [7–10]. Этот процесс стимулируется применением этих материалов в термоэлектрических устройствах в качестве твердотельных охладителей или генераторов. В полупроводниках типа Bi_2Te_3 имеются две валентные зоны (легкие и тяжелые дырки) и две зоны проводимости (легкие и тяжелые электроны). Этот факт важен при моделировании их термоэлектрических свойств.

Твердые растворы, т. е. кристаллы типа $(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_3$ или $\text{Sb}_2\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$, представляют особый интерес из-за их высоких значений термоэлектрической эффективности ZT . Твердые растворы обладают высокими термоэлектрическими характеристиками вблизи комнатной температуры по сравнению с Bi_2Te_3 [11,12]. В зависимости от концентрации носителей заряда максимальное значение ZT обычно наблюдается около комнатной температуры. As_2Te_3 существует в двух аллотропных модификациях: α и β - As_2Te_3 , из которых только последняя кристаллизуется в той же ромбоэдрической структуре, что и Bi_2Te_3 [13]. β - As_2Te_3 принадлежит к семейству полупроводников типа Bi_2Te_3 , хорошо известному классу эффективных термоэлектрических материалов при комнатной температуре. Метастабильный β - As_2Te_3 ($R\bar{3}m$, $a = 4,047 \text{ \AA}$ и $c = 29,492 \text{ \AA}$ при 300 К) изоструктурен слоистому Bi_2Te_3 и известен как хороший термоэлектрик около 400 К. Кристаллизация As_2Te_3 приводит к многофазным образцам, тогда как β - As_2Te_3 действительно может быть синтезирован с высокой фазовой чистотой закалкой расплава. β - As_2Te_3 испытывает фазовый переход и превращается в стабильный α - As_2Te_3 ($C2/m$, $a = 14,337 \text{ \AA}$, $b = 4,015 \text{ \AA}$, $c = 9,887 \text{ \AA}$ и $\beta = 95,06^\circ$) при 480 К [14].

Известна возможность замены As на Bi в системе $\text{As}_{2-x}\text{Bi}_x\text{Te}_3$ до $x = 0,035$. Твердые растворы $\text{As}_{2-x}\text{Bi}_x\text{Te}_3$ имеют уменьшенное удельное электрическое сопротивление при сохранении теплопроводность менее $1 \text{ Вт/м}\cdot\text{К}$ в диапазоне температур $5 < T < 300 \text{ К}$. В этих материалах получено значение ZT около 0,2 при комнатной температуре [13]. Кроме того исследовалась дефектность твердых растворов $\text{Bi}_{2-x}\text{As}_x\text{Te}_3$ [15].

В настоящей работе нами исследованы термоэлектрические свойства монокристаллов $\text{Bi}_{2-x}\text{As}_x\text{Te}_3$ ($0 < x < 0.1$) в интервале температур $0 < T < 330 \text{ К}$. Для приготовления монокристаллов исходные поликристаллические материалы помещались в конические кварцевые ампулы. В ампулы были загружены Bi, Te (чистота 5N) и As_2Te_3 (предварительно синтезированные из элементов чистотой 5N) в соотношении, соответствующем

стехиометрии $\text{Bi}_{2-x}\text{As}_x\text{Te}_3$ ($x = 0,00-0,1$). Затем ампулы откачивали до давления 10^{-4} Па и запаивали. Синтез был осуществлен в горизонтальной печи при температуре 1073 К в течение 48 часов. Монокристаллы выращивались в тех же ампулах по модифицированной методике Бриджмена [16].

Электрическое сопротивление образцов определялось четырехконтактным методом на постоянном токе. Величина тока, пропускаемого через образец и создаваемого стабилизированным источником питания, обычно составляла 10 мА. Направление тока выбиралось вдоль оси C_2 . Ток через образец и напряжение на нем регистрировались, соответственно, цифровыми ампервольтомметрами. Коэффициент Зеебека для всех образцов измерялся в температурном интервале $77 < T < 330$ К при температурном градиенте вдоль плоскостей скола по методике, описанной в [17].

Установлено, что коэффициент Зеебека α положителен в $\text{Bi}_{2-x}\text{As}_x\text{Te}_3$ ($x = 0,00-0,1$), что соответствует p -типу проводимости и α существенно возрастает при замещении Bi на As. Теплопроводность при увеличении количества мышьяка при комнатной температуре незначительно возрастает, оставаясь тем не менее меньше 3 Вт/мК. Замещение висмута на мышьяк в монокристаллах $\text{Bi}_{2-x}\text{As}_x\text{Te}_3$ в целом понижает электрическую проводимость, то есть мышьяк действует как донор. Такое поведение объясняется уменьшением числа точечных заряженных дефектов в теллуриде висмута при увеличении концентрации мышьяка. При стехиометрической загрузке компонентов теллурида висмута получают кристаллы с небольшим избытком висмута. Избыточные атомы Bi занимают положения теллура, образуя дефекты замещения. Поскольку они отрицательно заряжены, кристаллы Bi_2Te_3 , выросшие при стехиометрической загрузке компонентов, всегда обладают проводимостью p -типа и имеют значительную концентрацию дырок. Безразмерная термоэлектрическая эффективность ZT достигает величины 0.7, причем максимум ее смещается от комнатной T к температуре $T = 250$ К при увеличении содержания мышьяка в твердых растворах $\text{Bi}_{2-x}\text{As}_x\text{Te}_3$.

Авторы благодарят за поддержку Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, грант № 075-15-2021-1353.

Список литературы

- [1] Zhang H., Liu C.-X., Qi X.-L. et al., *Nature Physics*, **5**, 438 (2009).
- [2] Hsieh D., Xia Y., Qian D. et al., *Nature*, **460**, 1101 (2009).

- [3] Hsieh D., Xia Y., Qian D. et al., *Phys. Rev. Lett.*, **103**, 146401 (2009).
- [4] Kulbachinskii V. A., Buga S. G., et al., *J. Physics: Conf. Series*, **969**, 012152 (2018).
- [5] Buga S. G., Kulbachinskii V. A., Kytin V. G., et al., *Chem. Phys. Lett.*, **631–632**, 97 (2015).
- [6] Kim H.-J., Kim K.-S., Wang J.-F., et al., *Phys. Rev. Lett.*, **110**, 136601 (2013).
- [7] Thermoelectric Properties of Bismuth Antimony Telluride Solid Solutions / H. Scherrer and S. Scherrer, *Macro to Nano Handbook*, edit. D. M. Rowe, 2006.
- [8] Stordeur M., *Phys. Stat. Sol. (b)*, **161**, 831 (1990).
- [9] Kulbashinskii V. A., Kytin V. G., et al., *Materials Today: Proceedings*, **8**, 573 (2019).
- [10] Кульбачинский В. А., Зиновьев Д. А., Маслов Н. В., и др., *ЖЭТФ*, **155**, 1091 (2019).
- [11] Thermoelectric Materials — New Directions and Approaches, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, 1997, vol. 478. Edited by Tritt T. M., Kanatzidis M G., Lyon H. B., Mahan G. D.
- [12] Thermoelectric Materials 1998-The Next Generation Materials for Small-Scale Refrigeration and Power Generation Applications, edited by Tritt T. M., Kanatzidis M. G., Mahan G. D., Lyon Jr. H. B., *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 1999, vol. **545**, 233–246.
- [13] Vaney J.-B., Carreaud J., Delaizir G. et al., *J. Electr. Mater.*, **45**, No. 3, (2016).
- [14] Morin C., Corallini S., Carreaud J., et al., *Inorg. Chem.*, **54**, 9936 (2015).
- [15] Bachan D., Novorkova A., Drasar C., et al., *J. Phys. Chem. Sol.*, **68**, 1079 (2007).
- [16] Kulbachinskii V. A., Inoue M., Sasaki M., et al., *Phys. Rev. B*, **50**, No. 23, 16921 (1994)
- [17] Kulbachinskii V. A., Kytin V. G., et al., *J. Sol. St. Chem.*, **193**, 154 (2012).

Геликоидальные кристаллы: зонная структура, мультикритическое поведение и топологические дефекты

Р. А. Ниязов^{1,2}, Д. Н. Аристов^{1,2}, В. Ю. Качоровский²

¹НИЦ КИ — ПИЯФ, Гатчина

²ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург, Россия

Рассмотрен геликоидальный кристалл (ГК) на основе туннельно-связанных краевых состояний, возникающих в массиве упорядоченных антиоточек (АТ) в двумерном топологическом изоляторе (см. рис. 1,а,

взятый из экспериментальной работы [1]). Ранее были исследованы отдельные АТ [2]. Рассчитана зонная структура ГК для модели 1D массива, помещенного в магнитное поле. Показано, что при целых и полуцелых значениях магнитного потока через антиточку запрещенные зоны ГК закрываются. При малом отклонении магнитного потока от этих значений возникают массивные дираковские конусы (ДК), расстояние по энергии между которыми можно контролировать чисто электрическим способом (затворными электродами).

Электрон-электронное взаимодействие приводит к мультикритическому поведению ГК, которое проиллюстрировано на фазовой диаграмме (см. рис. 1, *b*) в плоскости α (туннельная связь между АТ) и β (удвоенный угол между осями квантования в соседних АТ). Черные линии разделяют три фазы: «независимые кольца», «независимые плечи» и «спин-флип киральные каналы».

При наличии дефектов в ГК, например, стенки между областями колец с большим и малым радиусом, возникает пара локализованных состояний (топологически-защищенный кубит) с энергиями, лежащими в середине запрещенных зон массивных ДК (см. рис. 1, *c*). Расщепление между уровнями энергии кубита можно контролировать как магнитным полем, так и чисто электрически. Такие состояния можно использовать для квантовых вычислений.

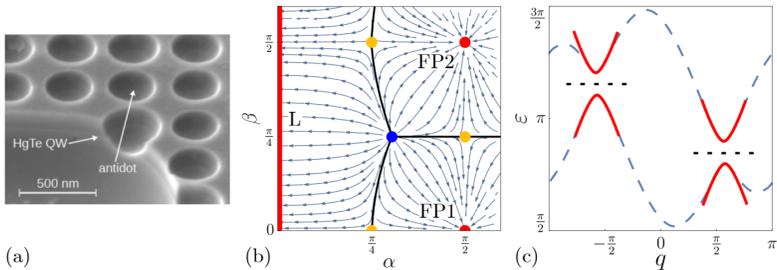


Рис. 1. (a) Массив АТ в 2D HgTe (взято из [1]); (b) мультикритическое поведение во взаимодействующем случае: синий цвет — полностью неустойчивая мультикритическая фиксированная точка, разделяющая три фазы (красные цвета), соответствующие линии L (независимые кольца) и фиксированным точкам FP1 (независимые плечи) и FP2 (спин-флип киральные каналы), желтый цвет — неустойчивые седловые точки; (c) топологически-защищенные локализованные состояния (черный пунктир), возникающие посередине запрещенных зон ГК (красным показаны массивные ДК).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, грант № 23-12-45016.

Список литературы

- [1] Ziegler J., Quantum transport in HgTe topological insulator nanostructures, PhD, Universität Regensburg (2019).
- [2] Niyazov R. A., Aristov D. N., Kachorovskii V. Y., Aharonov–Bohm Interferometry Based on Helical Edge States (Brief Review), *JETP Lett.*, 113, 689–700, (2021).

Magnetoresistance and Kohler rule in the topological chiral semimetals CoSi

A. E. Petrova*, O. A. Sobolevskiy, S. M. Stishov

P. N. Lebedev Physical Institute, Leninsky pr., 53, Moscow, Russia

E-mail: petrovaae@lebedev.ru

It is well known that for the majority of normal metals the transverse magnetoresistance (TMR) is proportional to H^2 in small fields, whereas the longitudinal magnetoresistance (LMR) is zero in the case of spherical Fermi surface. But in a general case, the LMR can be also significant and positive (see [1, 2]). However, it has been recently proposed that in nonmagnetic Weyl semimetals the chiral anomaly leads to a novel kind of the low field LMR: negative and quadratic in magnetic field [3, 4]. Then the negative LMR phenomena were discovered in some topological chiral materials with the Weyl points in electron spectra (Ref. [5–7]). So, the negative LMR may serve as a signature of so-called chiral anomaly. A violation of the Kohler rule, which is a scaling law ($MR = f[H / \rho_0]$) [1, 2] can also be one of the features of topological chiral materials [8].

In this connection, the chiral semimetal CoSi is a subject of interest. CoSi belongs to the class of transition metal silicides and germanides with a non-centrosymmetric B20-type crystal structure. Interest in compounds of this kind has increased significantly due to their topological properties, which are determined by the specific symmetry of their crystal lattice. A violation of spatial symmetry in the B20 structure type causes an existence of special points,

including Weyl points, in electronic and phonon spectra, characterized by topological Chern numbers (see [9, 10]). At the same time, semimetals such as CoSi and RhSi, and, possibly, CoGe and RhGe occupy a special position, revealing the nontrivial fermions of various kinds [11, 12].

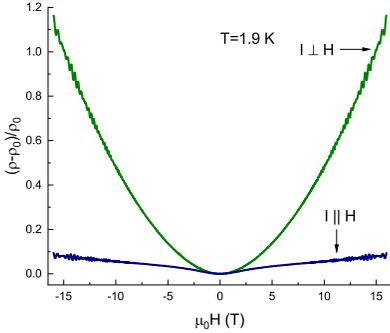


Fig 1. Relative change of resistance of CoSi-1 in magnetic fields, corrected for the Hall contribution

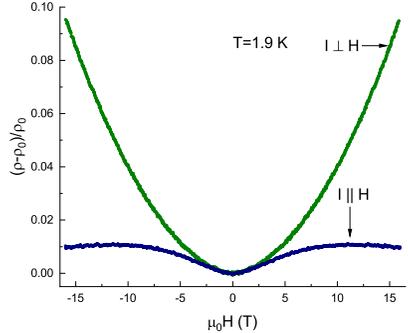


Fig. 2. Relative change of resistance of CoSi-2 in magnetic fields, corrected for the Hall contribution

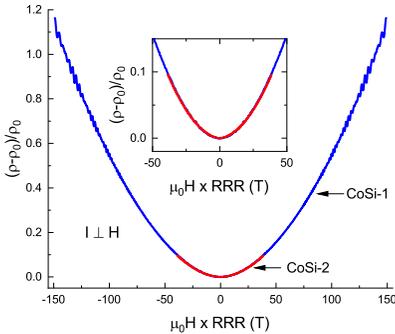


Fig. 3. Kohler plot for TMR of samples CoSi-1 and CoSi-2

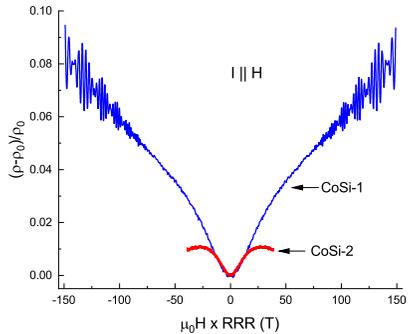


Fig. 4. Kohler plot for LMR of samples CoSi-1 and CoSi-2

CoSi is a diamagnetic semimetal with a very high residual resistance, which suggests a presence of a fairly large number of defects [13]. Currently, CoSi is being actively studied as a kind of model material demonstrating new types of Fermi quasiparticles (see Fig. 1, where the crystal and electron structures of CoSi are depicted.)

The transverse and longitudinal magnetoresistance (MR) of two samples of the topological chiral semimetal CoSi with different RRR was studied. Results of magnetoresistance measurements, corrected for the Hall contributions, arising due to the sample misalignments and not quite correct positions of the electrical contacts, are illustrated in Figs. 1 and 2. It is shown that the Kohler rule works for the transverse MR. The Kohler rule is also fulfilled in the case of longitudinal MR at a low reduced magnetic field. It should be pointed out that approximations of the LMR data (Figs. 3, 4) by the expression $MR \sim H^n$ give an overall value $n \cong 1.8$ in some agreement with data [14–16]. Changes n from the theoretical value 2 to 1.8 may be a result of upcoming saturation.

A sharp deviation of longitudinal MR curve for sample with low RRR from the Kohler prediction at high fields reveals its tendency to a sign change at higher magnetic fields. We do not probably see any specific MR features connected to the topological chiral anomaly in the electron spectra of CoSi. This observation should implies needs of certain revisions of the theoretical predictions. The Shubnikov – de Haas quantum oscillations were observed in both perpendicular and parallel configurations of the current and magnetic field in sample CoSi-1 with RRR = 9.33 at low temperatures. Two fundamental frequency peaks in the spectra arose after the Fast Fourier transform applied to the oscillation parts of the corresponding curves.

References

- [1] Blatt F. J., Physics of electronic conduction in solids, McGraw-Hill book company (1968).
- [2] Pippard A. B., Magnetoresistance in Metals, Cambridge University Press, Cambridge (1989).
- [3] Son D. T., Spivak B. Z., *Phys.Rev. B*, **88**, 104412 (2013).
- [4] Burkov A.A., *Phys. Rev. B*, **91**, 245157 (2015).
- [5] Xiaochun Huang, Lingxiao Zhao, Yujia Long, Peipei Wang, Dong Chen, Zhanhai Yang, Hui Liang, Mianqi Xue, Hongming Weng, Zhong Fang, Xi Dai, and Genfu Chen, *Phys. Rev. X* **5**, 031023 (2015).
- [6] Chenglong Zhang, Su-Yang Xu, Ilya Belopolski, Zhujun Yuan, Ziquan Lin, Bingbing Tong, Nasser Alidoust, Chi-Cheng Lee, Shin-Ming Huang, Hsin Lin, Madhab Neupane, Daniel S. Sanchez, Hao Zheng, Guang Bian, Junfeng Wang, Chi Zhang, Titus Neupert, M. Zahid Hasan and Shuang Jia, *Nat. Commun.* **7**, 10735 (2016).
- [7] Qiang Li, Dmitri E. Kharzeev, Cheng Zhang, Yuan Huang, Pletikosic I., Fedorov A. V., Zhong R. D., Schneeloch J. A., Gu G. D., and Valla T., *Nature Physics* **12**, 550 (2016).

- [8] Jing Xu, Fei Han, Ting-Ting Wang, Laxman R. Thoutam, Samuel E. Pate, Mingda Li, Xufeng Zhang, Yong-Lei Wang, Roxanna Fotovat, Ulrich Welp, Xiuquan Zhou, Wai-Kwong Kwok, Duck Young Chung, Mercouri G. Kanatzidis, and Zhi-Li Xiao, *Phys. Rev. X*, **11**, 041029 (2021).
- [9] Armitage N. P., Mele E. J., and Vishwanath Ashvin, Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015001 (2018).
- [10] Vanderbilt D., *Berry Phases in Electronic Structure Theory: Electric Polarization, Orbital Magnetization, and Topological Insulators*, Cambridge University Press (2019).
- [11] Tang P., Zhou Q., Zhang S. C., *Phys. Rev. Lett.* **119**, 206402 (2017).
- [12] Chang G., Xu S. Y., Wieder B. J., Huang D.S.S.M., Belopolski I., Chang T. R., Zhang S., Bansil A., Lin H., Hasan M. Z., *Phys. Rev. Lett.* **119**, 206401 (2017).
- [13] Stishov S. M., Petrova A. E., Sidorov V. A., Krasnorussky V. N., Mensel D., *Phys. Rev. B*, **86**, 064433 (2012).
- [14] Takane D., Wang Zh., Souma S., Nakayama K., Nakamura T., Oinuma H., Nakata Y., Iwasawa H., Cacho C., Kim T., Horiba K., Kumigashira H., Takahashi T., Ando Y., Sato T., *Phys. Rev. Lett.*, **122**, 076402 (2019).
- [15] Shanmukharao Samatham S., Venkateswarlu D., Ganesan V., *Materials Research Express*, **1**, 026503 (2014).
- [16] Xu X., Wang X., Cochran T. A., Sanchez D. S., Chang G., Belopolski I., Wang G., Liu Y., Tien H.-J., Gui X., Xie W., Zahid Hasan M., Chang T.-R., Jia Sh., *Phys. Rev. B*, **100**, 045104 (2019).

РТ-симметричная микроволновая фотопроводимость в толстых пленках на основе топологической фазы $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$

С. Н. Чмырь¹, А. С. Казаков¹, А. В. Галеева¹, Д. Е. Долженко¹,
А. И. Артамкин¹, А. В. Иконников¹, С. А. Дворецкий², Н. Н. Михайлов²,
М. И. Банников³, Л. И. Рябова¹, Д. Р. Хохлов^{1,3,*}

¹Физический факультет МГУ имени М. В. Ломоносова, г. Москва, Россия

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

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

*E-mail: khokhlov@mig.phys.msu.ru

Полупроводниковые твердые растворы $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ представляют собой необычный случай реализации топологических изоляторов. Энер-

гетический спектр электронов инвертирован и соответствует топологическому состоянию при $x < 0,16$, а при $x > 0,16$ спектр является прямым, и формируется тривиальная фаза. Следовательно, можно осуществить переход между топологической и тривиальной фазами при изменении состава сплава. Кроме того, современные методы эпитаксиального роста позволяют синтезировать пленки $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ с низкой свободной концентрацией носителей $\sim 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Это дает возможность измерять фотопроводимость на фоне этой довольно низкой равновесной концентрации носителей.

Ранее нами было установлено, что в пленках на основе $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ с инверсной структурой зон сигнал фотопроводимости, возбужденной терагерцовым излучением, оказывается асимметричным по магнитному полю. Данную ситуацию 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 подчеркнуть, что вышеуказанные эффекты нарушения симметрии наблюдаются только в неравновесной ситуации. Равновесные характеристики, такие как магнитосопротивление, симметричны по магнитному полю и не отличаются для зеркальных пар потенциальных контактов.

Следует подчеркнуть, что красная граница эффекта фотопроводимости в терагерцовой области экспериментально не наблюдалась. В настоящей работе исследована фотопроводимость в эпитаксиальных пленках $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ с инверсным энергетическим спектром при фотовозбуждении в СВЧ диапазоне.

Исследованные гетероструктуры синтезированы на полуизолирующей подложке GaAs [013] с буферными слоями CdTe и ZnTe методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Рабочий слой структур представляет собой твердый раствор $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($0.12 < x < 0.16$) толщиной ~ 4 мкм. Верхний слой пленки — закрывающий слой CdTe толщиной ~ 40 нм. Все образцы характеризуются *n*-типом проводимости. Значения концентрации свободных электронов в объеме активного слоя структуры составляют $\approx 10^{14} \text{ см}^{-3}$ при $T = 4.2$ К. Подготовка образцов к измерениям осуществлялась с помощью безмасковой фотолитографии. Электрические контакты изготовлены посредством индиевой пайки.

Исследование фотопроводимости проведено в условиях возбуждения излучением диода Ганна с частотой 50 ГГц и мощностью 10 мВт в широком температурном диапазоне — от 4.2 К до 300 К. При $T = 4.2$ К магнитное поле до 3 Тл прикладывалось перпендикулярно поверхности пленки. Измерения фотопроводимости проводились с помощью двойной модуляционной методики. Ток через образец модулировался с частотой около 700 Гц, затем сигнал сопротивления на переменном токе модулировался на частоте подачи СВЧ импульсов 13 Гц. Импульсы СВЧ имели скважность, равную 2. Все измерения проведены 4-зондовым методом.

Положительная микроволновая фотопроводимость наблюдалась при температурах ниже 12 К. Амплитуда фотопроводимости экспоненциально росла при понижении температуры (см. рис. 1).

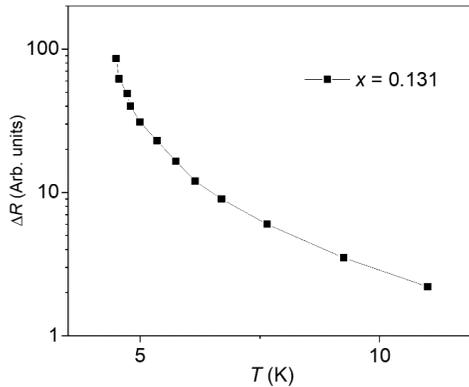


Рис. 1. Температурная зависимость сигнала фотопроводимости в нулевом магнитном поле

Фотопроводимость при гелиевой температуре обнаруживала РТ-симметричное поведение в малых магнитных полях до 0.25 Тл (см. рис. 2). Отметим, что магнитосопротивление в полях до 3 Тл являлось четной функцией магнитного поля (черная кривая на рис. 2).

Таким образом, обнаружено, что эффект РТ-симметричной фотопроводимости сохраняется и при фотовозбуждении микроволновым излучением, энергия кванта которого не превышает 0.2 мэВ, что заведомо ниже любых характерных значений энергии электронного спектра материала и даже ниже величины kT при гелиевой температуре. Следова-

тельно, можно считать доказанным, что эффект связан с разогревом свободных носителей заряда падающим излучением и в этом смысле не является квантовым.

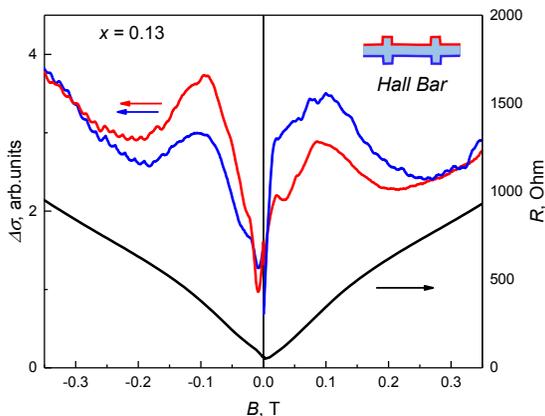


Рис. 2. Зависимость фотопроводимости от магнитного поля для двух сторон холловского мостика (красная и синяя кривые, левая ось). Магнитосопротивление образца (черная кривая, правая ось)

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 19-12-00034.

Список литературы

- [1] Galeeva A. V., Artamkin A. I., Kazakov A. S. et al. // *Beilstein J. Nanotechnol.* **9**, 1035 (2018).
- [2] Galeeva A. V., Kazakov A. S., Artamkin A. I., et al. // *Scientific Reports*, **10**, 2377 (2020).
- [3] Kazakov A. S., Galeeva A. V., Artamkin A. I., et al. // *Scientific Reports*, **11**, (2021).

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ И ОПТИЧЕСКИЙ ОТКЛИК НЕОДНОРОДНЫХ СИСТЕМ И МЕТАМАТЕРИАЛОВ

Эффект Зеебека и электропроводность поликристаллического хромита меди (I) легированного магнием

Е. Е. Куприянов, В. Г. Кыгин, В. А. Кульбачинский, И. Е. Корсаков

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

Хромит меди (I) привлекает значительный интерес исследователей благодаря своим магнитным и диэлектрическим свойствам. Хромит меди (I) является мультиферроиком и полупроводником р-типа частично прозрачным для видимого света [1]. Известные в настоящее время прозрачные полупроводники р-типа обладают значительно меньшей электропроводностью по сравнению с прозрачными полупроводниками n-типа, такими как $\text{In}_2\text{O}_3:\text{Sn}$, $\text{ZnO}:\text{Al}$, $\text{SnO}_2:\text{F}$. Поэтому задача повышения его электропроводности является актуальной. Электропроводность хромита меди (I) увеличивается на несколько порядков при легировании магнием. В нелегированном хромите меди (I) наличие подвижных дырок обусловлено нестехиометрией состава и присутствием дефектов. В настоящее время считается, что магний преимущественно замещает хром в кристаллической решётке, что приводит к увеличению концентрации подвижных дырок. Замещение магнитных ионов хрома на немагнитные ионы магния влияет на магнитные свойства хромита меди (I), в частности на температурные зависимости магнитной восприимчивости и ширину линии в спектре электронного парамагнитного резонанса [1, 2]. В свою очередь поляризуемость кристаллической решётки, а также наличие дефектов замещения должны оказывать воздействие на перенос дырок. Механизмы переноса дырок при разных температурах остаются предметом дискуссий до настоящего времени. Поэтому изучение переноса ды-

рок в хромите меди (I) представляется интересным как с научной, так и с практической точки зрения. Важная информация о переносе дырок в хромите меди (I), легированном магнием может быть получена из анализа температурных зависимостей коэффициента Зеебека.

В данной работе представлены результаты измерения и анализа температурных зависимостей коэффициента Зеебека в диапазоне температур от 77 К до 320 К и электропроводности в диапазоне температур от 4,2 до 293 К поликристаллического хромита меди (I), легированного магнием.

Поликристаллический хромит меди (I), легированный магнием был синтезирован твердофазным методом с применением процедуры химической гомогенизации [3] и спечён в виде керамических таблеток диаметром 10 мм. Содержание магния изменялось от 0,3 до 4 ат. %. Фазовый состав синтезированных образцов контролировался методом рентгенофазового анализа. Анализ рентгеновских дифрактограмм показал присутствие единственной фазы делафоссита при содержании магния до 1,3 ат. %. Геометрическая плотность получаемых образцов керамики заметно меньше их рентгеновской плотности. Геометрическая плотность синтезируемых образцов увеличивается при увеличении времени синтеза и при увеличении содержания магния. В таблице 1 представлены время синтеза, содержание магния и плотность для ряда исследованных образцов.

Температурные зависимости удельного сопротивления и коэффициента Зеебека исследованных образцов представлены на рис. 1 и 2 соответственно. Удельное сопротивление образцов с содержанием магния 0–0,3 ат. % зависит от температуры по закону близкому к активационному. При этом коэффициент Зеебека слабо зависит от температуры.

Такое поведение характерно для зонного переноса дырок в невырожденных полупроводниках [4]. При увеличении содержания магния от 0,3 до 4 ат. % удельное сопротивление уменьшается на несколько порядков. Температурная зависимость сопротивления при увеличении содержания магния отклоняется от активационной и может быть описана законом Мотта или законом Шкловского–Эфроса для прыжковой проводимости [5].

Коэффициент Зеебека при увеличении содержания магния уменьшается, а уменьшение коэффициента Зеебека при уменьшении температуры увеличивается. Это указывает на преобладание прыжкового переноса дырок в образцах с содержанием магния 0,6–4 ат. %. При увеличении времени синтеза образцов с содержанием магния 0,3–4 % сопротивление

и коэффициент Зеебека увеличиваются, что указывает на уменьшение концентрации дырок. Преобладание прыжкового механизма проводимости в образцах с содержанием магния 0,6–4 ат. % указывает на значительное увеличение концентрации дефектов при легировании хромита меди (I) магнием, что ограничивает увеличение электропроводности.

Авторы благодарят за поддержку Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, грант № 075-15-2021-1353.

Таблица 1

Обозначения исследованных образцов и их основные характеристики

Наименование образца	Содержание магния, ат. %	Время спекания керамики, ч	Плотность, г/см ³
1	0,3	24	2,73
2	0,3	48	2,97
3	0,6	24	2,85
3	0,6	48	3,12
5	1,3	24	3,6
6	1,3	48	4,05
7	4	24	3,84
8	4	48	4,11

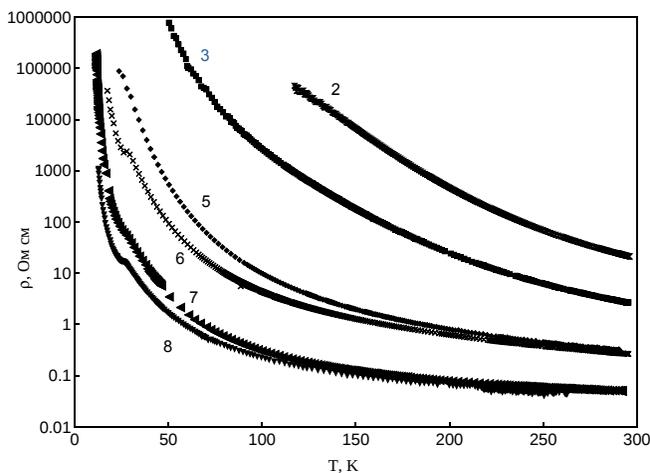


Рис. 1. Температурные зависимости удельного сопротивления (обозначения в табл. 1)

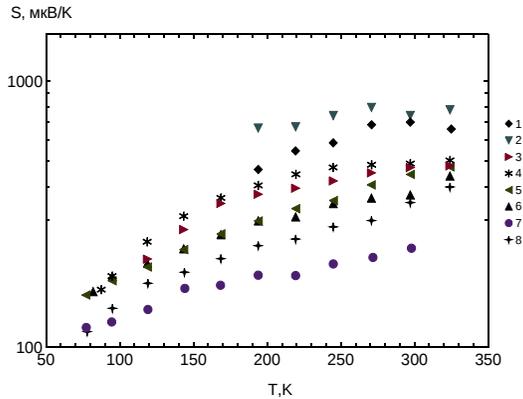


Рис. 2. Температурные зависимости Зеебека

Список литературы

- [1] Okuda T., Jufuku N., Hidaka S., et al. *Phys. Review B*, **72**, 144403 (2005).
- [2] Кытин В. Г., Дуваккина А. В., Константинова Е. А. и др. *Химическая физика* **41**, 30 (2022).
- [3] Kulbachinskii V. A., Kondratieva D. Yu., Konstantinova E. A. et al. *Low Temperature Physics*, **45**, 194 (2019).
- [4] Аскеров Б. М. Электронные явления переноса в полупроводниках. М: Наука, 1985, 320 с.
- [5] Звягин И. П. Кинетические явления в неупорядоченных полупроводниках. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1984, 192 с.

Хиральные свойства многослойных систем $[Ag-Al_2O_3]_N$

Ф. А. Пудонин, И. А. Шерстнев, Д. С. Косцов,
Д. Д. Носкова, А. П. Болтаев

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

В настоящее время исследования хиральных структур приобрели особую актуальность поскольку они могут иметь уникальные оптические и электромагнитные свойства. Например, предполагается, что отрица-

тельный коэффициент преломления может быть получен в метаматериалах с сильной хиральностью [1, 2]. Ранее, было установлено, что системы из магнитных наночастиц с вихревым типом намагничивания являются хиральными структурами. Хиральность в таких системах проявляется в форме эффекта оптической невзаимности [3, 4], которым было можно управлять внешним магнитным полем H . Недавно нами было установлено, что и многослойные структуры с наноостровковыми металлическими магнитными слоями типа $(\text{FeNi-Al}_2\text{O}_3)_N$ также являются хиральными объектами, что проявляется в возникновение в них аномально большого по величине эффекта оптической невзаимности [5]. Хиральность в таких островковых системах не была связана с особенностями топологии формы наноостровов (острова имели круглую форму), а была обусловлена их физическими свойствами, например, существованием супервихревого типа намагничивания магнитных островковых систем [6]. Особенностью этих структур явилось отсутствие зависимости эффекта невзаимности от внешних электрических и магнитных полей, что указывало на существование дополнительного, немагнитного механизма возникновения хиральности. Это значит, что эффект невзаимности может наблюдаться и в немагнитных многослойных островковых системах. В данной работе приведены результаты исследований эффекта невзаимности в многослойных структурах с немагнитными островковыми слоями из диамагнитного Ag.

Для исследований несколько серий образцов с различными толщинами слоев Ag и Al_2O_3 выращивались на полированных керамических подложках ситала (рутиловая фаза TiO_2) методом RF-распыления. Для слоев Ag был найден перколяционный порог d^* , который определялся как толщина, при которой пленка из сплошной становилась островковой, т. е. когда $\text{Re } \epsilon$ изменяет знак [7]. Слои Ag становились наноостровковыми при толщине $d < d^* \sim 2$ нм, когда $\text{Re } \epsilon > 0$. Необходимо отметить, что металлические острова Ag имели круглую форму. Поэтому хиральные эффекты, связанных с топологией поверхности структур, отсутствуют. Кроме того отметим, что в исследуемых структурах с диамагнитными слоями Ag трудно ожидать возникновение какой-либо пространственной анизотропии, связанной с магнетизмом как, например, вихревая намагниченность в системах из магнитных наночастиц. Поэтому, затруднительно предложить какие-то очевидные механизмы возникновения хиральных эффектов в структурах с островами Ag.

Эффект оптической невзаимности определялся как различие в величине коэффициента отражения света ΔR (или угла поворота плоскости поляризации $\Delta\omega$) от структуры, когда источник и приемник излучения менялись местами (или при повороте образца на 180°). В данной работе измерение эффекта невзаимности происходило следующим образом: р-поляризованный свет ($\lambda = 632.8$ нм) падал на структуру под углом 70° и измерялся угол поворота плоскости поляризации ω_1 р-поляризованного света, отраженного от образца. Далее, образец поворачивался на 180° и снова измерялся угол поворота плоскости поляризации ω_2 . Если: $\Delta\omega = \omega_1 - \omega_2 \neq 0$, то имеет место эффект оптической невзаимности. При исследовании структур $[\text{Ag}-\text{Al}_2\text{O}_3]_N$ с различными толщинами слоев Ag и фиксированной толщины слоев Al_2O_3 ($d \sim 7.0$ нм) был обнаружен аномально большой по величине ($\Delta\omega \sim 6^\circ$) эффект оптической невзаимности для структур с островковыми слоями Ag (рис. 1). Можно видеть существенное возрастание эффекта при эффективной толщине островковых слоев Ag $d < d^* \sim 2.0$ нм. Уменьшение эффективной толщины слоев Ag приводит к уменьшению размеров островов и возрастанию расстояния между островами. Можно сказать, что при уменьшении эффективной толщины слоев Ag взаимодействие между островами внутри слоя Ag ослабляется и возрастает эффект невзаимности. Также возрастает эффект невзаимности при уменьшении межслоевого взаимодействия между островковыми слоями Ag, что подтверждает зависимость $\Delta\omega$ от толщины разделяющих диэлектрических слоев Al_2O_3 (рис. 2).

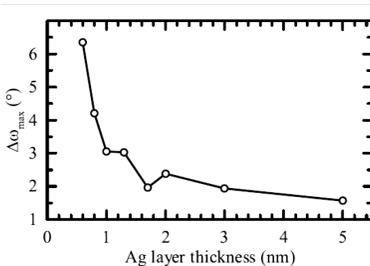


Рис. 1

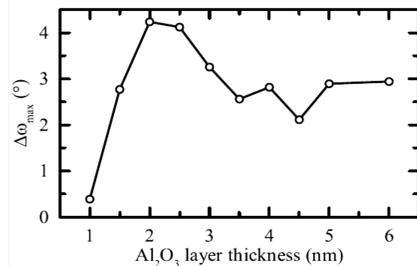


Рис. 2

Здесь необходимо отметить, что пока не очень понятен как физический механизм возникновения хиральности (эффект невзаимности)

в таких островковых структурах, так и причины возникновения зависимости эффекта оптической невязимности от межслоевого и внутрислоевого взаимодействия островов Ag. Однако, нами было установлено, что эффект оптической невязимности в данных структурах исчезает, если изменить поляризацию падающего на структуру света с p на s . Заметим, что, в случае структур из массивов магнитных наночастиц с вихревой намагничиванием, эффект невязимности существует и для падающего излучения с s -поляризацией. Поскольку только p -поляризованный свет может возбуждать локальные плазменные колебания в островах Ag, то можно предположить, что возникновение эффекта оптической невязимности связано с возбуждением и взаимодействием локализованных плазмонов в островах Ag (при s -поляризованном свете плазменные колебания в островах Ag не возбуждаются). Поэтому внутрислоевое и межслоевое взаимодействия в островковых структурах можно связать с межслоевыми и внутрислоевыми взаимодействиями локализованных плазмонов. Если это так, то можно сделать вывод, что межслоевые и внутрислоевые взаимодействия между плазменными колебаниями оказывает решающее влияние на возникновение эффекта оптической невязимности и хиральности многослойных островковых систем $[Ag-Al_2O_3]_N$.

Исследование выполнено за счет гранта РФФ (№22-22-00412):
<https://rscf.ru/en/project/22-22-00412/>.

Список литературы

- [1] Plum E., Zhou J., Dong J. et al., *Phys. Rev. B*, **79**, 035407, (2009).
- [2] Shuang Zhang, Yong-Shik Park et al., *Phys. Rev. Lett.* 102(2):023901, (2009).
- [3] Udalov O. G., Sapozhnikov M. V., Karashtin E. A. et al., *Phys. Rev. B*, **86** 094416, (2012).
- [4] Yakata S., Miyata M., Nonoguchi S. et al., *Appl. Phys. Lett.* 97 (22), 222503 (2010).
- [5] Boltaev A. P., Pudonin F. A., Sherstnev I. A., Egorov D. A., *J. Phys.: Condens. Matter.* 30 (29), 295804 (2018).
- [6] Boltaev A. P., Pudonin F. A., Sherstnev I. A., *Appl. Phys. Lett.* 102 (14), 142404, (2013). doi:10.1063/1.4800757.
- [7] Boltaev A. P., Pudonin F. A., Sherstnev I. A. et al., *JETP*, **125** (3), p. 465–468.

О коррелированных взаимодействиях свободных и связанных зарядов в растительных биоматериалах

А. А. Топоркова^{1,2}, Т. А. Аксенова², С. А. Винокуров²,
Н. В. Классен², И. С. Цебрук²

¹*Высшая школа экономики, факультет физики*

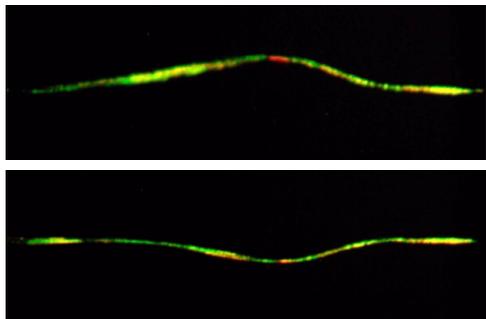
²*Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН*

E-mail: anna.toporkova@list.ru

Многообразные роли перемещений свободных электрических зарядов в жизнедеятельности растений изучаются более двух веков [1]. Это — и перенос питательных веществ в виде неорганических ионов (кальция, магния, фосфор, азот и др.) от корней к зонам фотосинтеза в листьях, и перенос биоорганических заряженных продуктов фотосинтеза (глюкоза, белки и др.) к зонам формирования растительных тканей, и движение электронов и протонов в клеточных мембранах при фотосинтезе. Но механизмы этих переносов свободных зарядов по микрокапиллярам и мембранам растений пока еще слабо проработаны, хотя рассмотрение этих процессов на квантово-механическом языке ведется [2]. Прояснение атомно-электронных нюансов транспортировки заряженных частиц в растениях важно не только для углубления представлений об их жизнедеятельности, но и с точки зрения применения действующих там закономерностей в других системах. Например, переносы заряженных частиц при фотосинтезе происходят почти без потерь энергии и поэтому их механизмы представляют интерес для электротехники и электроники [3]. Следует заметить, что растительные среды, в которых происходят переносы зарядов, характеризуются высокой электрической активностью: целлюлоза, составляющая основу клеточных стенок — сильный пьезоэлектрик, из электрически полярных аминокислот образованы белки, транспортирующие электроны и протоны через клеточные мембраны, а вода, образующая не менее 70 % массы и объема растений, обладает рекордной электрической поляризуемостью.

В наших экспериментах получена серия фактов, указывающая на существенную роль взаимодействий между переносимыми внутри растений свободными зарядами и связанными зарядами воды, целлюлозы, белков и других компонентов растительных тканей. Пьезоэлектрические коэффициенты между величинами деформации стеблей и возни-

кающей при этом электрической поляризации минимум на два порядка выше, чем у типовых неорганических пьезоэлектриков [4, 5]. Приведенные ниже два микрофото показывают необычно большие прогибы микроволокна из стебля крапивы при приложении к нему слабого электрического поля (100 В/см).



Важно подчеркнуть, что если из этого микроволокна удалить воду, такие прогибы не происходят. Это микроволокно наблюдается в поляризационном микроскопе и цветные полосы, которые при изгибах движутся вдоль волокна, указывают на перестройку целлюлозных цепочек в стенках волокна под действием электрического поля. Цепочки выстроены в спирали вдоль оси волокна и их деформации создают в его полости электрическое поле спиральной геометрии, увлекающее растворенные в воде вещества. Высокая поляризуемость воды усиливает амплитуду деформаций и соответствующего им электрического поля. Таким образом в системе пьезоэлектрические стенки – вода – растворенные в ней вещества возникают электромеханические волны [4–6], существенно повышающие эффективность переноса питательных веществ. Мы предполагаем, что в генерации этих волн активно участвуют ситовидные перемиčky, разделяющие питательные микрокапилляры растений на отдельные отсеки, за счет пьезоэлектричества целлюлозных волокон, образующих края ситовидных отверстий. Когда сгусток ионов подходит к мембране в «правильном направлении», его электрическое поле расширяет мембранные отверстия (для капилляров ксилемы «правильное» направление идет от корней к листьям, для капилляров флоэмы — наоборот). После прохождения ионами мембраны это поле действует на нее с противоположным знаком и отверстия закрываются. В момент про-

хождения ионами мембраны происходит всплеск электрического поля, вызывающий деформацию оболочки капилляра и генерирующий в ней электромеханическую волну, которая увлекает ионы к следующей мембране и т. д. Такие процессы обеспечивают асимметрию массопереноса капиллярами: по ксилеме положительные ионы идут от корней к листьям, а по флоэме отрицательно заряженные продукты фотосинтеза — от листьев к точкам формирования растительных тканей.

Косвенным подтверждением предлагаемого механизма служат обнаруженные нами автоколебания электропроводности листьев и стеблей растений, имеющие периоды от долей секунды до десятков секунд. Например, когда заряды подходят к мембране с «неправильной» стороны, их поле сужает отверстия и проводимость уменьшается. Но по мере накопления подвижных внешним полем зарядов у закрытой перемычки их давление на нее возрастает и при его превышении предела упругого сопротивления краев отверстий они приоткрываются. Пересечение частью зарядов плоскости перемычки изменяет знак поля и отверстия окончательно открываются, вызывая резкое увеличение электропроводности и т. д. Периоды возникающих таким образом автоколебаний сопротивления определяются характером взаимодействий подвижных и связанных зарядов, соотношениями упругих и пьезоэлектрических характеристик тканей и др.

Так как биополимеры, обеспечивающие транспортировку электронов, протонов и других участников фотосинтеза, содержат электрически полярные компоненты (аминокислоты и др.), в фотосинтетических процессах также должны активно участвовать коррелированные взаимодействия свободных и связанных зарядов.

Ранее нами была обнаружена значительная активизация выделения и аккумуляирования водорода при электрической обработке растительных водных суспензий, что также можно объяснить представленными выше взаимодействиями [7].

Список литературы

- [1] Медведев С. С. Электрофизиология растений: учебное пособие. — СПб.: Изд-во С.-Петербургского университета, 1997. — 122 с.
- [2] Gray H. B., Winkler J. R. Electron Transfer in Proteins, *Ann. Reviews Biochemistry*, 1996, 65:537–61.
- [3] Shrivastava S. K., Superconductivity in Organic Materials, *Journal of Emerging Technologies and Innovative Research*, 2019, v.6, p.-45–55.

- [4] Sanaev V. G., Gorbacheva G. A., Galkin V. P., Vinokurov S. A., Klassen N. V., Prospects for using unique physico-chemical properties of plants for self-regeneration in space, *AIP Conf. Proc.* 2171, 180002-1–180002-7, 2019.
- [5] Vinokurov S. A., Tsebruk I. S., Betenina T. D., Klassen N. V., Modulation of structure and optical properties micro-fibrils of plants by means of electrical, deformation and optical treatments. *Journal of Physics: Conference Series* 1560 012042, 2020.
- [6] Simon S. H. Coupling of surface acoustic waves to a two-dimensional electron gas, *Phys. Rev. B.* 1996. T.54. C.13878–13884. Doi:10.1103/PhysRevB.54.13878.
- [7] Топоркова А. А., Винокуров С. А., Покидов А. П., Цебрук И. С., Классен Н. В. О применении растительных материалов в водородной энергетике II Международная научно-практическая конференция «Редкие металлы и материалы на их основе: технологии, свойства и применение» посвященная памяти академика Н. П. Сажина (РЕДМЕТ-2022): сб. тр., Москва.

Лазерная генерация взаимосвязанных электронных, фононных и фотонных волн в линейных полимерах

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

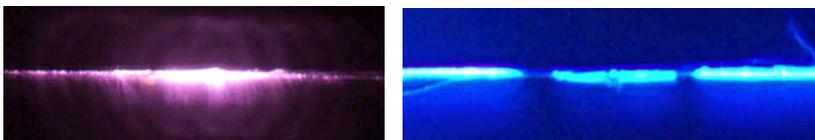
Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН, Черноголовка

Интерес к исследованиям физических свойств органических полимеров (особенно проводящих) заметно возрос в 60-х годах прошлого века после выхода теоретических работ В. Литгла, показавших возможность существенного повышения температуры сверхпроводящего перехода в органических проводниках за счет особо сильного электрон-фононного взаимодействия в них [1, 2]. Далее стали расширяться исследования гибридных материалов, где в наноразмерных масштабах формировались композиции из органических и неорганических (в том числе металлических) компонентов [3–5]. В этих ситуациях в заметной части объема такой композиции перемешиваются электронные состояния контактирующих органики и неорганики, что перспективно для достижения рекордных характеристик не только по сверхпроводимости, но и, например, в солнечных батареях. В наших работах по формированию нанокомпозитов из органических люминофоров и неорганических сцинтилляторов были представлены новые сцинтилляционные материалы для особо чувствительных радиационных детекторов и рентгеновских микро-

скопов [6, 7]. В последние годы активно развиваются приемы лазерной обработки композиций из органических и неорганических материалов для формирования оптических и микроэлектронных устройств [8].

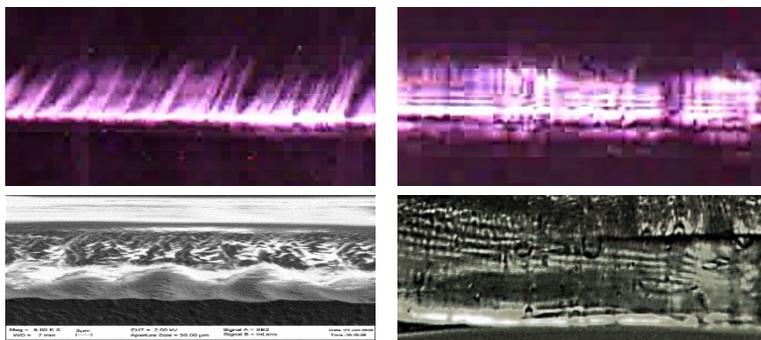
В 2022 г. на предыдущей конференции СКЭС-ХІХ мы представляли работу «Корреляции оптических и структурных превращений при многофотонном возбуждении молекулярных сред», где, в частности, сообщалось о результатах облучения импульсным инфракрасным лазером с длиной волны 1,064 мкм пленок полистирола. Были обнаружены многофотонная генерация свечения пленки и образование двух видов микроструктур — систем концентрических колец и прямоугольных включений [9]. Продолженные в прошедшем году исследования лазерного облучения пленок и микроволокон на основе полистирола и полиэтилена позволяют предположить, что в этих линейных полимерах импульсы многофотонного поглощения генерируют взаимосвязанные волны неравновесных электронов, фононных колебаний и фотонных потоков, распространяющиеся вдоль полимерных цепочек. За счет высокой плотности энергии эти волны создают динамические изменения атомно-молекулярной структуры облучаемого полимера, которые, в свою очередь, воздействуют как на процесс многофотонного поглощения непосредственно во время лазерного импульса, так и формируют остаточные модификации полимерных композиций, выявленные ранее [9].

Далее приведены некоторые из новых фактов, на которых основаны эти предположения. Они получены при облучении микроволокон полистирола, вытягиваемых из его раствора в бензоле. Варьированием состава раствора и скорости вытягивания регулировались диаметр и внутренняя структура волокон. Первый ряд из двух микрофотографий показывает слева вспышку свечения микроволокна полистирола в момент его облучения 20-наносекундным импульсом лазера, а справа — распределение голубой фотолюминесценции того же волокна, возбуждаемой ультрафиолетовым светодиодом (полистирол был пролегирован активатором голубой люминесценции). Зона яркого свечения на левом снимке соответствует диаметру лазерного пучка (около 5 мм).



Яркое свечение в зоне лазерного пучка на левом снимке указывают сильное возбуждение материала многофотонным поглощением. На правом снимке отчетливо видны две темные зоны, расположенные по краям лазерного пучка. Это объясняется разрушением молекул активатора в результате облучения. Более длительное облучение волокон лазерными импульсами приводит к разрушению молекул и самого полистирола, в результате чего волокно разрывается в зоне первоначального разрушения активатора. Обращает на себя внимание, что указанные разрушения происходят не в области максимального выделения энергии, т. е. не в середине лазерного пучка (область максимума свечения на левом снимке). Мы предполагаем, что это расхождение объясняется тем, что свечение на левом снимке вызвано не равновесным разогревом волокна, а неравновесным возбуждением его электронной подсистемы поглощением лазерными фотонами, энергия которой из-за кратковременности импульса не успевает передаться атомной подсистеме полимера. Возбужденные электроны, имея отрицательную поляризуемость на частоте лазерного излучения, выталкиваются из зоны максимума интенсивности в края лазерного пучка, где и отдают свою энергию атомно-молекулярной системе. Эта энергия перегревает молекулы, приводя сначала к разрушению активатора, а потом и всего волокна.

Еще два ряда снимков показывают соответствие геометрии возбуждаемого лазером светового излучения, выходящего из волокна (верхний ряд), и внутренней морфологии полистирольных цепочек, определяемой электронной и оптической микроскопией (нижний ряд). То есть генерируемые световые волны идут преимущественно вдоль полимерных цепочек как при коррелированном излучении образованных на полимерах возбуждений.



Список литературы

- [1] Little W. A. Possibility of synthesizing superconductors, *Phys. Rev. A*, 1964, 134, p. 1416–1424. Little W.A., Superconductivity at room temperature, *Sci. Am.*, 1965, 212, p. 21–27.
- [2] Shrivastava S/K., Superconductivity in Organic Materials, *Journal of Emerging Technologies and Innovative Research*, 2019, v. 6, p. 45–55.
- [3] Bennet T. D. et al., Interplay between defects, disorder and flexibility in metal — organic frameworks, *Nature Chemistry*, 2017, v. 9, p. 11–13.
- [4] Gratzel M., Photoelectrochemical cells. *Nature* 2001, 414, 338.
- [5] Sanches C., Soler-Illia G., Hybrid Materials (Organic – Inorganic), *Encyclopedia of Chemical Processing*, Taylor and Francis, 2006.
- [6] Klassen N. Y. et al., Nanoscintillators for Microscopic Diagnostics of Biological and Medical Objects and Medical Therapy. *IEEE Transactions on Nanobioscience*, 2009, V. 8, No 1, p. 20–32.
- [7] Cebruk I. S., Pokidov A. P., Kedrov V. V., Klassen N. V. Dynamical forming and applications of nanocomposites from organic and inorganic components for new trends in material research and technologies. *J. Phys.: Conf. Ser.* 1309 012002 (2019).
- [8] Ribollar E., Castillejo M., Laser Interaction with Organic/Polymer Materials, in *Handbook of Micro and Nano Engineering*, Springer, Nature Switzerland AG, 2020, p. 3–49.
- [9] Классен Н. В., Провоторов П. В., Цебрук И. С. Корреляции оптических и структурных превращений при многофотонном возбуждении молекулярных сред», Сборник тезисов XIX конференции «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления», ФИАН, г. Москва, 2022, стр. 255–257.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ТЕХНИКА, МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ И СОЗДАНИЯ МАТЕРИАЛОВ

Камера высокого давления с алмазными наковальнями и устройством нагрева образца для *in situ* рентгеновских и оптических исследований фазовых переходов

А. В. Боков, Д. А. Саламатин, А. П. Новиков, С. Г. Ляпин, А. В. Цвященко

*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН,
г. Троицк, Россия
E-mail: bokov@hppi.troitsk.ru*

В современном эксперименте при высоких давлениях часто появляется необходимость проведения рентгеноструктурного и оптического анализа, который легко выполняется в синхротронных центрах по всему миру. Как правило, такие эксперименты являются очень дорогими, а подача заявки (и её рассмотрение) на соответствующих мегаустановках зачастую занимает несколько месяцев. Для того чтобы «не стоять в очереди», в ИФВД РАН была создана камера высокого давления с алмазными наковальнями и устройством нагрева образца для *in situ* рентгеновских и оптических исследований материалов. А также разработан совершенно новый способ изготовления коллиматора рентгеновского излучения, позволяющий получать прямой параллельный пучок рентгеновского излучения с диаметром пятна менее 100 мкм и работать при высоких температурах. Данный коллиматор можно использовать в работе на рентгеновском дифрактометре [1]. Использование этих устройств «в паре» позволяет проводить экспериментальные работы по изучению фазовых переходов практически в любой рентгеновской лаборатории при давлениях до 100 ГПа и температуре до 650 °С. Конструкция камеры была также приспособлена для проведения оптических исследований с помощью ме-

тогда комбинационного рассеяния света и показала свою надёжность и эффективность в процессе эксплуатации. При этом для камеры достаточно только воздушного охлаждения и не требуется дополнительного водяного охлаждения как в работе [2], что позволяет применять её в самых прецизионных экспериментах.

Вышеперечисленное оборудование планируется использовать для изучения фазовых переходов в функциональных материалах. В частности, чтобы исследовать фазовую P - T диаграмму соединений $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_3$ и $\text{Bi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$.

Работа была частично поддержана за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-00014, <https://rscf.ru/project/22-72-00014/>.

Список литературы

- [1] Новиков А. П., Саламатин Д. А., Цвященко А. В., Бражкин В. В. Способ изготовления коллиматора рентгеновского излучения / Патент на изобретение № 2790441 от 21.02.2023 (Роспатент)
- [2] Приборы и техника эксперимента, 2021, № 3, с. 158–160.

Электропроводность, оптические свойства и термическая стабильность легированных бором наноалмазов

Е. А. Екимов¹, А. А. Ширяев², В. А. Сидоров¹, М. В. Кондрин¹,
Ю. В. Григорьев³, Р. А. Хмельницкий⁴, С. Г. Ляпин¹, Н. Н. Мельник⁴

¹Институт физики высоких давлений РАН, г. Троицк, Москва, Россия

²Институт физической химии и электрохимии РАН, г. Москва, Россия

³Институт кристаллографии РАН, г. Москва, Россия

⁴Физический институт РАН, г. Москва, Россия

Легированные бором проводящие наноалмазы (B-ND) рассматриваются в качестве перспективного электродного материала для прорывных технологий в медицине, накопителях энергии, электронных устройствах и решения многих других прикладных задач. Однако, убедительных данных, свидетельствующих о возможности легирования бором «single-digit» наноалмазов, пока нет. Расчёты указывают на предпочтительное

расположение атомов бора на поверхности наноалмазов, а не в объеме наночастиц [1].

Попытки получения В-ND в детонационном синтезе не дали однозначного результата [2]. Характерные спектральные особенности (КР, ИК), свидетельствующие о вхождении бора в алмазную решетку, не были обнаружены.

Известно также о синтезе В-ND из 9-борабицикло[3.3.1]нонан димера $C_{16}H_{30}B_2$ (9BBN) при высоких статических давлениях и температурах [3]. Такие важные физические свойства, как степень легирования, электро-транспортные, оптические, а также термическая стабильность В-ND не были исследованы, что ограничивает их потенциальное применение.

В сравнительном исследовании нано- и микроалмазов, синтезированных при высоких давлениях температурах из 9BBN, мы впервые убедительно демонстрируем вхождение бора в кристаллическую решетку наноалмазов, делаем оценку уровня легирования, констатируем высокую термическую стабильность «single-digit» наноалмазов.

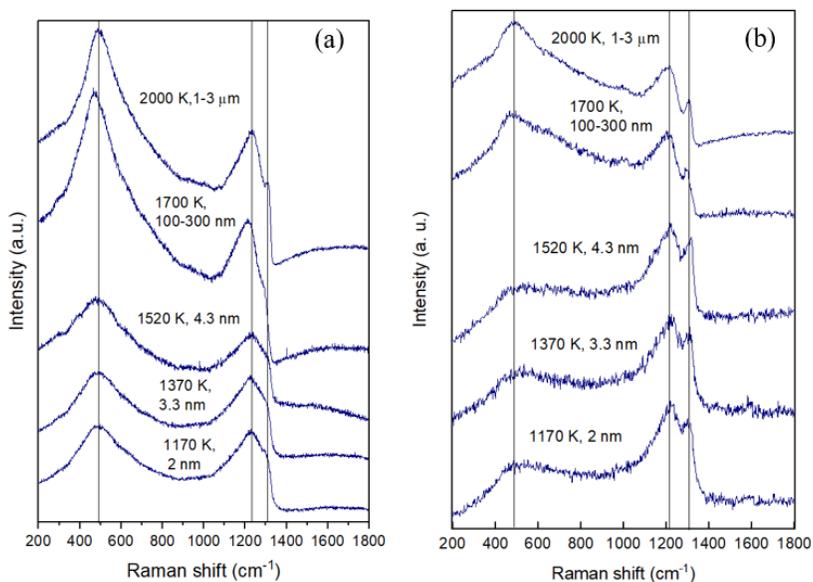


Рис. 1. Спектры КР очищенных нано- и микроалмазов, синтезированных в системе С-Н-В: возбуждение 785 нм (а) и 488 нм (б)

В спектрах КР нанодiamondов (рис. 1) обнаружены характерные особенности, свидетельствующие о сильном легировании бором. Проводимость микро- и нанодiamondов, измеренная на образцах порошка в миниатюрной ячейке высокого давления, демонстрирует полупроводниковое поведение с энергией активации 0,02 и 0,10 эВ соответственно (см. пример на рис. 2). Мы показываем, что B-ND со средним размером кристаллов 4,3 нм термически стабильны до 1070-1270 К и могут быть использованы вместо детонационных нанодiamondов в качестве центров кристаллизации при осаждении полупроводниковых CVD-алмазных пленок без ухудшения проводимости на подложке.

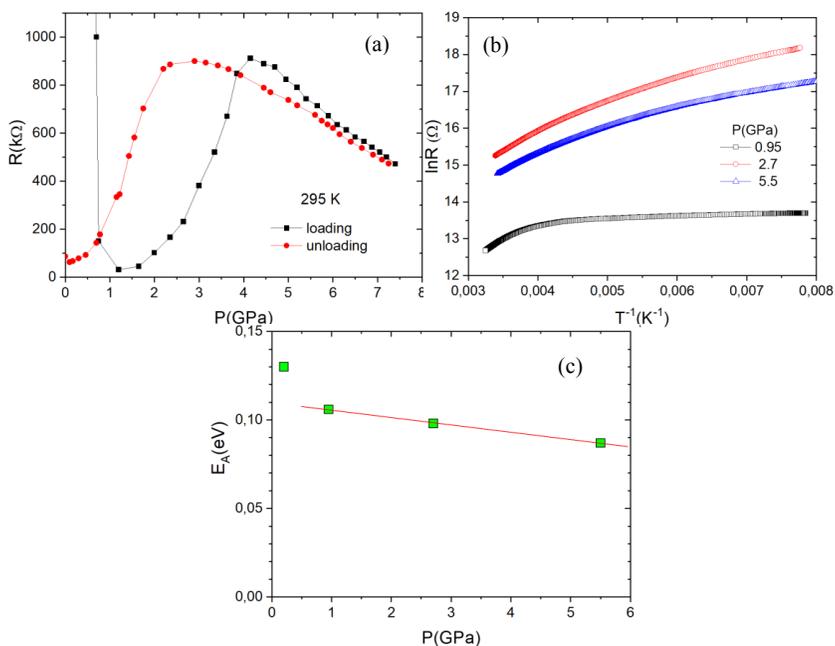


Рис. 2. Сопротивление (a, b) и энергия активации проводимости (c) B-ND с размером кристаллов 3,3 нм в зависимости от давления и температуры при различных давлениях.

Представленное исследование выполнено при поддержке РФФИ и GACR, проект № 20-52-26017.

Список литературы

- [1] Barnard A. S., Sternberg M., Can we predict the location of impurities in diamond nanoparticles?, *Diam. Relat. Mater.* 16 (2007) 2078–2082.
- [2] Afandi A., Howkins A., Boyd I. W., Jackman R. B., Nanodiamonds for device applications: An investigation of the properties of boron-doped detonation nanodiamonds, *Sci. Rep.* 8 (2018) 3270.
- [3] Ekimov E. A., Kudryavtsev O. S., Khomich A. A., Lebedev O. I., Dolenko T. A., Vlasov I. I., High-Pressure Synthesis of Boron-Doped Ultrasmall Diamonds from an Organic Compound, *Adv. Mater.* 27 (2015) 5518–5522.

Тонкие пленки иридатов стронция, получаемые распылением на постоянном токе и лазерной абляцией: сравнение технологий

Ю. В. Кислинский^{1,*}, К. И. Константибян¹, И. Е. Москаль¹,
А. М. Петржик¹, А. В. Шадрин^{1,2}, Г. А. Овсянников¹

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

²МФТИ, Долгопрудный, Московская область, Россия

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

Интерес к иридатам стронция: диэлектрику Sr_2IrO_4 (SIO_4) [1], также к металлу с сильным электрон-электронным взаимодействием SrIrO_3 (SIO_3) [2] связан со значительным спин-орбитальным взаимодействием в этих материалах. За счет спин-орбитального взаимодействия возможно возникновение дальнедействующего эффекта близости путем туннелирования триплетных куперовских пар в переходах сверхпроводник – ферромагнетик – сверхпроводник [3]. Нами получены переходы Джозефсона с прослойками из иридата: $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}/\text{Sr}_2\text{IrO}_4/\text{Au}/\text{Nb}$. Характерные напряжения $I_c R_N$ в этих переходах были порядка 10–50 μV , при толщине иридатной прослойки t в 5–7 nm [4]. Однако тонкие пленки SIO_4 , синтезированные эксимерным лазером (методом PLD), отличались по величине проводимости на 1–2 порядка в зависимости от условий напыления и от материала подложки [5]. Нами получены первые результаты напыления пленок иридатов стронция путем катодного распыления на постоянном токе (методом DC распыления). Данная работа посвящена сравнению электрофизических свойств тонких пленок иридатов, полученных DC распылением, с пленка-

ми, получаемыми методом PLD. До сих пор метод PLD применялся для напыления иридатов в большинстве работ, например [1, 2, 5].

Синтез тонких плёнок проводился методом катодного распыления из мишени Sr_2IrO_4 на постоянном токе в чистом аргоне на подложки $(110)\text{NdGaO}_3$. Металлический иридат SrIrO_3 синтезируется при более высоких давлениях и низких температурах, порядка 1.3 mBar и 770 °C. Для синтеза диэлектрического иридата стронция Sr_2IrO_4 требуются: низкое давление, около 0.5 mBar, и более высокая температура, около 820 °C.

Тонкие пленки металлического иридата SIO_3 имели удельные сопротивления около 0.2 mΩ cm в интервале температур 77–300 K. Сопротивления того же порядка для пленок SIO_3 получены и в работе [2].

Аппроксимация экспериментальных зависимостей сопротивления от температуры для пленок SIO_4 проведена по активационной модели:

$$\rho(T) = \rho_0 \exp(\Delta E / 2kT),$$

где k — константа Больцмана. Предэкспоненциальный множитель ρ_0 и энергия активации ΔE — были параметрами аппроксимации, как показано на рис. 1. Типичные значения для пленок, полученных методом DC распыления, были: $\Delta E \sim 70$ meV и $\rho_0 \sim 10^{-2}$ Ω cm. Для пленки SIO_4 , синтезированной методом PLD, нами были получены величины: $\Delta E \sim 200$ meV и $\rho_0 \sim 10^{-1}$ Ω cm.

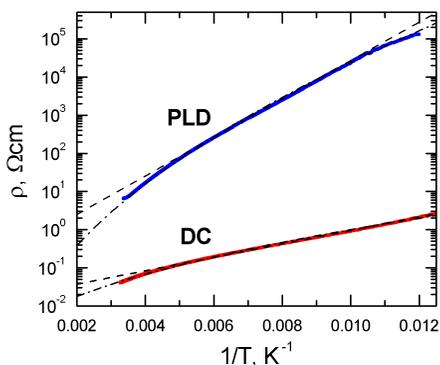


Рис. 1. Температурные зависимости удельных сопротивлений пленок SIO_4 , полученных методом PLD — синие символы, методом DC распыления — красные символы. Аппроксимации по активационной модели показаны пунктирами, по модели Эфроса – Шкловского — штрихпунктирами

Обсуждается применимость других моделей электронного транспорта, например, механизма Эфроса – Шкловского [6], при котором:

$$\rho(T) = \rho_0 \exp \left[\frac{(T_{ES} / T)^2}{2} \right],$$

где параметрами аппроксимации являются множитель ρ_0 и температура T_{ES} .

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

Список литературы

- [1] Lu Chengliang, Quindeau Andy, Deniz Hakan et al. *Appl. Phys. Lett.* **105**, 082407 (2014).
- [2] Biswas Abhijit, Kim K. S., Jeong Y. H. *Journal of Appl. Phys.* **116**, 213704 (2014).
- [3] Bobkova I. V., Bobkov A. M. *Phys. Rev. B* **95**, 184518 (2017).
- [4] Petrzhik A. M., Constantinian K. Y., Ovsyannikov G. A. et al. *Phys. Rev. B* **100**, 024501 (2019).
- [5] Петржик А. М., Cristiani G., Логвенов Г. и др., *Письма в ЖЭТФ*, **43**, 12 (2017).
- [6] Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. *Электронные свойства сильно легированных полупроводников*. М.: Наука, 1979.

Синтез мультиферроика $\text{Bi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$ при высоком давлении

И. Е. Костылева¹, Д. А. Саламатин^{1,2}, Л. Ф. Куликова¹, А. В. Боков¹,
И. П. Зибров¹, А. В. Цвященко¹

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

²Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия

Использование в технологических целях интенсивно изучавшегося из-за наличия при высоких температурах одновременно ферроэлектрического и магнитного упорядочения мультиферроика BiFeO_3 ограничено

из-за существования пространственной спин-модулированной циклоиды с длинным периодом 620 Å, препятствующей проявлению линейного магнитоэлектрического эффекта и суммарного макроскопического магнитного момента. Одним из способов подавления магнитной циклоиды является частичное замещение ионов Vi^{3+} на ионы редкоземельных металлов, в частности ионы Tb^{3+} , имеющие значительно меньший ионный радиус и создающие вследствие этого как внутреннее химическое давление, так и искажение кристаллической структуры. Дополнительное внешнее воздействие высоким давлением в процессе синтеза позволяет более направленно влиять на качество получаемых образцов.

Для синтеза образцов $\text{Vi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0.05, 0.1, 0.3$) нами использовалась двухэтапная схема. На первом этапе были получены прекурсоры из смеси окислов исходных металлов стандартным твердофазным синтезом порошкового спекания на воздухе при температурах 820–860 °С, в зависимости от содержания Tb, с промежуточным перетирированием и прессованием в таблетки. Затем образцы заново перетирались, прессовались в таблетки, запаивались в герметичные золотые капсулы и помещались в ячейку из графита со вставками из кубического нитрида бора. Ячейка затем помещалась в камеру высокого давления и подвергалась высокотемпературной барической обработке при давлении 60 кбар и температуре 980 °С в течение 90 минут. После выдержки образцов при заданных параметрах температура снижалась до комнатной в течение нескольких минут, давление же снижалось до атмосферного постепенно.

На каждом этапе синтеза производился рентгеноструктурный экспресс-анализ получившихся образцов. Было обнаружено, что обработка высоким давлением на конечной стадии синтеза приводит к компактированию образцов, улучшению их качества, и к минимизации или полному исчезновению паразитных фаз, следы которых наблюдались на образцах после первого этапа синтеза.

Исследование микроструктуры и элементный анализ образцов, проведенные с помощью электронного сканирующего микроскопа, подтвердили их соответствие заданному стехиометрическому составу и наличие отчетливых квадратно-ограниченных гранул.

Таким образом, в результате синтеза были получены поликристаллические однофазные образцы, при этом $\text{Vi}_{0.95}\text{Tb}_{0.05}\text{FeO}_3$ и $\text{Vi}_{0.9}\text{Tb}_{0.1}\text{FeO}_3$ кристаллизовались в ромбоэдрически искаженную структуру перовскита (пространственная группа $R3c$), аналогичную родительскому соедине-

нию, в то время как образец с содержанием Tb $x = 0.3$ имел орторомбическую структуру GdFeO_3 типа (пространственной группой $Pnma$), что согласуется с данными других авторов.

Как и в предыдущих работах допирование Tb уменьшало объем элементарной ячейки по сравнению с родительским соединением. Однако, в отличие от работ предыдущих авторов, с помощью термобарического отжига, нам удалось повысить предел растворимости Tb в системе BiFeO_3 в исходной фазе $R3c$ до 10 % без перехода в орторомбическую структуру из-за вносимых допированием искажений кристаллической решетки.

Данная работа была поддержана за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-00014, <https://rscf.ru/project/22-72-00014/>.

РАЗНОЕ

Эффект Ефимова в квантовых системах

С. А. Позднеев

Физический институт им. П. Н. Лебедева, РАН

Отделение квантовой радиофизики

E-mail: pozdneev@sci.lebedev.ru

Исследование Бозе-конденсации, а также необычных свойств многочастичных квантовых систем (эффект Ефимова [1, 2]), разработка новых химических лазеров на электронных переходах атомов и молекул, эксперименты по лазерному термоядерному синтезу, астрофизические исследования, развитием новых нано-технологий, созданием новых химических соединений с заданными свойствами и целенаправленным поиском оптимальных путей их синтеза, с разработка ЭВМ новых поколений, в частности оптических и нейро-ЭВМ, и т. д. требуют новых методов и основанных на них средств для расчетов основных характеристик различных элементарных процессов, таких как взаимодействия излучения с веществом, столкновения электронов и атомов с атомами и молекулами, молекул и нуклонов между собой и т. п. Наиболее последовательным и математически корректным методом моделирования элементарных процессов в области низких и средних энергий является метод, основанный на интегральных и дифференциальных уравнениях, сформулированных Л. Д. Фаддеевым, О. Я. Якубовским и С. П. Меркурьевым [1], которые описывают нерелятивистское движение нескольких частиц, взаимодействующих при помощи парных потенциалов. Корректная формулировка задачи рассеяния для системы нескольких частиц, разработанная в этих работах позволила реализовать новые численные методы для моделирования различных процессов ядерной, атомной и молекулярной физики, математически строго обосновать различные, приведенные выше приближенные методы решения многочастичных за-

дач и корректно определить границы применимости этих приближений, а также взаимосвязь между ними.

Кроме этого только благодаря этим уравнениям было открыто одно из уникальных явлений квантовой физики — эффект Ефимова [1] состоящий в том, что в системе же трех частиц, даже с гладкими финитными парными потенциалами, при определенных условиях реализуется ситуация, когда число трехчастичных связанных состояний может оказаться бесконечным. Это происходит в случае, когда ни одна из парных подсистем не имеет связанных состояний, но хотя бы две из них обладают бесконечными длинами рассеяния.

Этот эффект в общем случае зависит от квантовых чисел трехчастичного состояния, момента, четности, симметрии относительно перестановок частиц, оценка для которых представлена в [1–2]. Наибольшее притяжение должно быть при орбитальном моменте трех частиц $L = 0$, т. к. там нет центробежных сил, симметрия этого состояния должна быть максимальной, в противном случае волновая функция будет иметь узлы и связь уменьшится. Таким образом количество резонансных состояний в трехчастичной системе определяется только специфическими свойствами парных подсистем. В связи с простотой представленной модели представляется интересным исследование влияния различных факторов на эти необычные состояния трехчастичной системы, в результате было показано, что [1–3]:

- центробежные силы разрушают эффект,
- данные состояния обладают максимальной симметрией,
- тройные силы не влияют на эффект,
- добавление частицы к трехчастичной системы разрушает эффект,
- заряд частиц влияет на эффект и в этом случае эффект выражен менее ярко,
- для спиновых частиц эффект выражен менее ярко.

Наиболее существенно влияют на эффект массы частиц. Имеется три характерных режима: режим одинаковых частиц, режим тяжелого центра и молекулярный режим [1–4]. Режим тяжелого центра имеет место когда две частицы имеют массы одного порядка m_l , а третья m_h намного тяжелее, причем у пары легких частиц нет уровня или они не взаимодействуют между собой, а взаимодействуют только с тяжелой частицей при помощи притягивающего потенциала. В этом случае при бесконечно тяжелой третьей частицы имеем случай пары частиц в сило-

вом центре и естественно в такой системе трехчастичные уровни не возникают. В случае конечной массе тяжелого центра число уровней пропорционально:

$$N \sim \frac{m_l}{m_h} \ln \frac{1}{e_0 m_l r_0^2}.$$

Особенность этого режима состоит в том, что для существования трехчастичных уровней необходимы чрезвычайно мелкие уровни в парных подсистемах в отличие от молекулярного режима, где требования на парные уровни значительно проще. В этом случае тяжелая частица не реагирует на движение невзаимодействующих частиц, которые движутся независимо друг от друга в поле неподвижной тяжелой частицы. Поэтому в этом пределе энергия связи трех частиц аддитивно складывается из энергий связи двухчастичных систем. Однако при конечной величине массы тяжелой частицы все три частицы движутся согласованно, оставляя неподвижным центр масс системы. При этом тяжелая частица реагирует на изменение положений двух других частиц, в движении которых возникает корреляция, несмотря на отсутствие прямого взаимодействия между ними. Таким образом, динамическая корреляция в движении связываемых частиц может трактоваться как специфическое притяжение. Необходимо отметить, что подобное динамическое притяжение возникает и в том случае, когда между связываемыми частицами действуют силы отталкивания. В этом случае динамическое притяжение компенсирует взаимное отталкивание и приводит к стабилизации системы.

Представлены результаты исследования этого эффекта в тримерах благородных газов.

Список литературы

- [1] Ефимов В. Н., Слабосвязанные состояния трех резонансно взаимодействующих частиц // ЯФ 12 (1970), с. 1080–1090.
- [2] Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М.: Наука, 1985, 398 с.
- [3] Позднеев С. А. Применение квантовой теории рассеяния для расчетов различных процессов ядерной, атомной и молекулярной физики. М., Янус-К, 2001, 412 с.
- [4] Позднеев С. А. Резонансы в рассеянии электронов молекулами // ЖЭТФ, 2004, т. 126, № 5, с. 1051–1072.

Application of multiple scattering approximation

S. Pozdneeov

*P. N. Lebedev Physical Institute, Department Quantum Radiophysics,
Laboratory of Theoretical Radiophysics, Moscow, Russia*

The quantum theory of few-body scattering based on the modified Faddeev–Yakubovsky equations (FYE) [1] is applied to the calculation of the ion-atom, ion-molecular and atommolecular collisions [2]. In this approach we consider all channels in this reaction (elastic, inelastic and ionization) simultaneously. In case of high energy (the velocity of the incoming particle is larger than 1 a.u. ($v \gg 1$)) FYE simplification and may used eikonal approximation [2]. Therefore by virtue of the well know fact that the scattering is concentrated about the principal directions and in calculating the cross sections can be used expand in a parameter characterizing the derivation from the eikonal direction, assuming this parameter to be small. Using this approximation the calculation of the different processes in the collisions H^+ , D^+ , T^+ with H and He, $He^+ + He$, $H_2^+ + He$ are present. The characteristic features (anomaly) in the ionization spectrum at forward angles (the continuum electron capture and binary encounter peak) and different mechanism of this processes are discussed. Nevertheless even this approximate calculation enables us to achieve satisfactory with experimental data [3].

The eikonal approximation for small angle for the scattering of fast particles not only makes it possible to express the scattering amplitude and cross section in simple form but also preserves many important properties of the exact solution for example it preserves the unitary relation, which the crude Born approximation does not do. In limiting cases the eikonal approximation reduces to the Born and classical approximations for small-angle scattering [3]. Note here that the analogous anomaly was obtained in elastic scattering by charged particles by set of two charges, equal magnitude and opposite to sign using eikonal approximation. According to [2, 3] the anomaly angles is determined by the ratio of the interaction of the target to the energy of the incident particles. In case $H^+ + He$ we have $\theta \sim E_{e+He^+} / E_p \sim 24.6 \text{ eV} / 20000 \text{ eV} \sim 1.23 \text{ mrad}$.

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] Demkov Yu. N. Sov. Phys. JETP, 1983, v. 53, 63, p. 681.

Образование связанного состояния позитрон + электрон в монокристалле вейлевского полуметалла CoSi

Д. А. Саламатин^{1,2}, А. В. Боков¹, М. Г. Козин³, И. Л. Ромашкина³,
А. В. Саламатин², М. В. Михин², А. Е. Петрова⁴, В. А. Сидоров¹,
А. В. Николаев³, З. Фиск⁵, А. В. Цвященко¹

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

²*Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия*

³*Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына,
МГУ им. М. В. Ломоносова, г. Москва, Россия*

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

⁵*Кафедра физики и астрономии Калифорнийского университета
в Ирвине, Калифорния*

Время жизни аннигиляции позитронов с использованием источника ^{48}V было измерено в нецентросимметричных кубических монокристаллах CoSi, FeSi и MnSi [1, 2, 3]. Из временных спектров аннигиляции позитронов были определены следующие времена жизни: 168(1) пс для CoSi, 114(1) пс для FeSi и 111(1) пс для MnSi (см. таблицу 1, рис. 1). С использованием источника ^{22}Na для монокристаллического CoSi было определено тоже время жизни аннигиляции позитронов (см. табл. 1). Различия в величинах времени жизни аннигиляции позитронов определенных в MnSi и FeSi, с одной стороны, и вейлевском полуметалле CoSi с другой, вызвано образованием связанного состояния позитрон + электрон (позитроний).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-12-00008 (<https://rscf.ru/project/22-12-00008/>).

Таблица 1. Измеренные времена жизни аннигиляции позитронов в монокристаллах Si, CoSi, MnSi и FeSi и доступные данные из литературы. τ_{exp} — данные по монокристаллам в данной работе, τ_b — литературные данные с ^{22}Na в качестве источника позитронов

Материал	τ_{exp} , пс (в данной работе)	τ_b , пс (по литературе)
Si	218(1) (на ^{48}V)	218(1) (монокристалл) [41]
CoSi	168(1) (на ^{48}V), 166(2) (на ^{22}Na)	115(2) (поликристалл) [26]
MnSi	111(1) (на ^{48}V)	119(3) (монокристалл) [27]
FeSi	114(1) (на ^{48}V)	130(3) (поликристалл) [29]

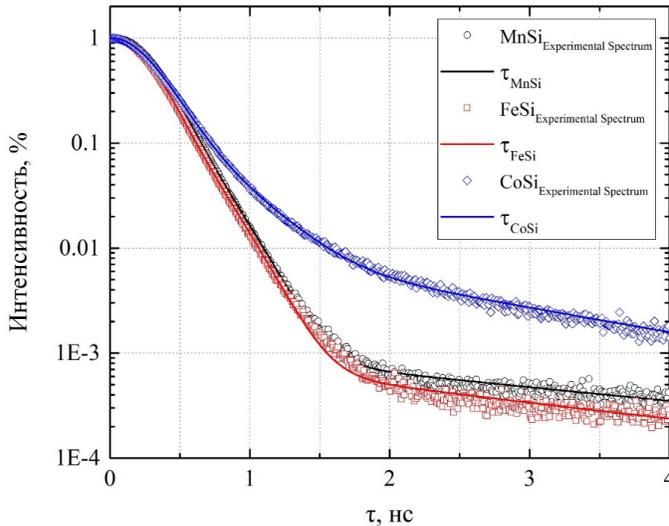


Рис. 1. Временные спектры аннигиляции позитронов с источником ^{48}V в титановой фольге и их фиттинг для монокристаллов CoSi, MnSi и FeSi

Список литературы

- [1] Stishov S. M., Petrova A. E., Khasanov S., Panova G. K., Shikov A. A., Lashley J. C., Wu D., Lograsso T. A. Magnetic phase transition in the itinerant helimagnet MnSi: Thermodynamic and transport properties. *Phys. Rev. B* 2007, 76, 052405. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.052405>.

- [2] Petrova A. E., Krasnorussky V. N., Shikov A. A., Yuhasz W. M., Lograso T. A.; Lashley J. C., Stishov S. M. Elastic, thermodynamic, and electronic properties of MnSi, FeSi, and CoSi. *Phys. Rev. B* 2010, 82, 155124. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.155124>.
- [3] Stishov S. M.; Petrova A. E. Thermodynamic, elastic and electronic properties of substances with chiral crystal structure: MnSi, FeSi, CoSi. *Phys. Usp.* 2021, 65. <https://doi.org/10.3367/UFNe.2021.11.039104>.

Научное издание

**XX Конференция
«Сильно коррелированные электронные
системы и квантовые критические явления»**

ФИАН, г. Москва
25 мая 2023 г.

Сборник тезисов

Технический редактор А. В. Бакиев

Подписано в печать 11.05.2023. Формат 60×84¹/₁₆.
Усл. печ. л. 11,51. Уч.-изд. л. 12,11. Гарнитура «Таймс».
Бумага для цифровой печати. Печать цифровая. Заказ № 23-20.

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».
