

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

ФИАН, г. Москва
23 мая 2024 г.

СБОРНИК ТЕЗИСОВ



Москва ♦ Ижевск

2024

УДК 530.1(065)

ББК 22.31я43

XXI Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления» : сборник тезисов. — М.–Ижевск : Институт компьютерных исследований, 2024. — 200 с.

ISBN 978-5-4344-1028-1

Настоящий сборник содержит тезисы докладов, заявленных на XXI 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. Магнетизм
2. Низкоразмерные системы
3. Сверхпроводимость и сверхтекучесть
4. Корреляции. Квантовые фазовые переходы
5. Топологические и тривиальные металлы и полуметаллы
6. Методы. Технология
7. 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, 2024

ISBN 978-5-4344-1028-1

Программный комитет

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

Предисловие

Настоящий сборник содержит тезисы докладов, представленных на XXI конференцию «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления», которая проводится в Физическом институте имени П. Н. Лебедева в Москве. Предыдущая XX юбилейная конференция, проведенная в ФИАНе в 2023 г., привлекла большое количество участников. Представленные тезисы были изданы и вручены всем авторам и участникам. Настоящая конференция также оказалась достаточно популярной, и организаторы надеются на ее успех.

Содержание

Предисловие	4
-------------------	---

Магнетизм

<i>А. А. Анисимова, Я. М. Плотников, Дм. М. Коротин</i> Цепочки магнитных ионов в материале катода перспективных Zn-ионных аккумуляторных батарей	14
<i>Д. Бер, Л. С. Таран, Д. Г. Портер, А. Бомбарди, Д. Прабхакаран, Р. Д. Джонсон, С. В. Стрельцов</i> Переключение доменов, вызванное деформацией во фрустрированном антиферромагнетике CoTi_2O_5	16
<i>С. К. Готовко, В. Ю. Иванов, А. А. Буш, В. И. Козлов, Е. Г. Николаев, Л. Е. Свистов</i> Магнитные свойства LiCu_3O_3 — квазидвумерного антиферромагнетика на разбавленной квадратной решетке	18
<i>М. Р. Джамалудинов, К. Ш. Муртазаев, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. К. Рамазанов</i> Фазовые переходы в четырехвершинной модели Поттса на слоистой треугольной решетке	20
<i>В. Е. Дмитриенко, В. А. Чижиков</i> Мультипольные магнитные структуры в «немагнитном» гексагональном железе: возможное решение старой загадки	21
<i>V. S. Zhandun, N. V. Kazak</i> Spin-state transitions in Co_2FeBO_5 ludwigite under high pressure: an ab-initio investigation	24
<i>Н. Н. Ковалева</i> Мотт–Хаббардовские возбуждения в оптических спектрах AFM изолятора LaTiO_3	27

<i>И. Е. Костылева, Д. А. Саламатин, Л. Ф. Куликова, А. В. Боков, И. П. Зибров, П. В. Энкович, А. В. Цвященко</i> Влияние допирования и термобарического отжига на микроструктуру мультиферрита $\text{Vi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$	30
<i>И. А. Крастилевский, В.Н. Глазков</i> Влияние немагнитного разбавления на магнитную фазовую диаграмму антиферромагнетика на треугольной решётке $\text{Rb}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}(\text{MoO}_4)_2$	32
<i>А. С. Москвин</i> Конкуренция орбитальных, зарядовых, спиновых и решеточных степеней свободы в ян-теллеровских магнетиках RNiO_3	34
<i>Д. Ю. Новосёлов, Д. М. Коротин, А. О. Шориков, А. Р. Оганов</i> Электронные корреляции и собственный магнетизм междузельных электронных состояний в электриде Li_8Au	38
<i>В. В. Оглобличев, А. Ф. Садыков, Ю. В. Пискунов, А. Г. Смольников, М. Е. Кашиникова, Н. А. Уткин, Д. Ф. Акрамов</i> Магнитное состояние слоистых халькогенидов $(\text{V},\text{Co})_7\text{X}_8$ ($\text{X} = \text{Se}, \text{Te}$) ...	40
<i>В. В. Оглобличев, Ю. В. Пискунов</i> Магнитный порядок в мононитриде урана по данным ЯМР	42
<i>А. В. Руткаускас, Н. М. Белозерова, О. Н. Лис, Е. В. Лукин, А. Л. Желудкевич</i> Влияние высокого давления на кристаллическую структуру наноструктурированных ферритов CoFe_2O_4 и $\text{Zn}_{0.34}\text{Fe}_{2.53}[\square]_{0.13}\text{O}_4$	44
<i>П. С Савченков, П. А. Алексеев</i> Необычный магнетизм в редкоземельных соединениях с сильными электронными корреляциями	46
<i>Д. А. Саламатин, А. В. Семено, И. Е. Костылева, А. В. Цвященко</i> Магнитные свойства соединений $\text{Vi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0.05, 0.1, 0.3$)	48
<i>А. И. Смирнов, Т. А. Солдатов</i> Кроссовер псевдоспиновый парамагнетик – цепочечная спиновая жидкость в фрустрированном антиферромагнетике Cs_2CoCl_4	50
<i>Т. А. Солдатов, А. И. Смирнов</i> Спиновая динамика ферро-антиферромагнетика на квадратной решетке $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$	53

<i>S. M. Stishov, A. E. Petrova, A. M. Belemuk</i> Spin-fluctuation heat capacity at magnetic phase transition in the Co ₂ Fe doped MnSi.....	54
<i>В. А. Чижиков, В. Е. Дмитриенко</i> Влияние антиферромагнитных спиновых скосов на волновое число магнитных геликоидов в кубических гелимагнетиках	59

Низкоразмерные системы

<i>П. С. Бережной, А. С. Кореев, А. В. Горбунов, В. В. Соловьев, Л. В. Кулик, В. Б. Тимофеев</i> Фазовая диаграмма магнитоэкситонного конденсата в квантово-холловском диэлектрике	61
<i>Д. М. Воронаев, М. М. Тюменцев, И. А. Кон, П. Д. Григорьев, С. В. Зайцев-Зотов, E. Pachoud, A. Hadj-Azzem, P. Monceau</i> Линейное магнетосопротивление при низких температурах в HoTe ₃	64
<i>И. Г. Горлова, С. А. Никонов, С. Г. Зыбцев, В. Я. Покровский, С. В. Зайцев-Зотов</i> Последовательная логарифмическая релаксация фотопроводимости в вискерах слоистого квазиодномерного полупроводника TiS ₃	67
<i>П. Д. Григорьев, А. А. Морочо Амбойя</i> Происхождение гистерезиса в тетрателлуридах редкоземельных элементов.....	70
<i>К. С. Денисов, К. А. Барышников, П. С. Алексеев</i> Эффекты памяти в магнетосопротивлении двухкомпонентных электронных систем	72
<i>М. В. Дурнев, Д. С. Смирнов</i> Междолинное смешивание интерфейсных экситонов на латеральных гетеропереходах	75
<i>И. В. Загороднев, Д. В. Понкратова</i> Интерфейсные электронные состояния на стыке атомных цепочек.....	76
<i>Н. Г. Замкова, В. С. Жандун, О. Н. Драганюк</i> Исследование упорядоченных конфигураций в сплавах МХенов, содержащих переходные металлы, в зависимости от состава.....	78

<i>С. Г. Зыбцев, В. Я. Покровский</i> Эффекты синхронизации с ВЧ полем при конверсии тока волны зарядовой плотности на контакте	81
<i>Ю. В. Кислинский, Н. В. Дубицкий, К. И. Константибян, И. Е. Москаль, А. М. Петржик, А. В. Шадрин, Г. А. Овсянников</i> Электронный транспорт в металлическом иридате стронция и джозефсоновских гетероструктурах на его основе.....	84
<i>А. Ю. Кунцевич, Е. В. Таркаева, М. И. Блуменау</i> Свойства метастабильных состояний в 1T-TaS ₂ материале с волнами зарядовой плотности	87
<i>В. Е. Минакова, С. В. Зайцев-Зотов</i> Коллективный характер низкотемпературных фотопроводимости и проводимости, а также пиннинга волны зарядовой плотности в квазиодномерном проводнике o-TaS ₃	89
<i>Т. И. Могилюк, П. Д. Григорьев</i> Аномальная фаза квантовых осцилляций межслоевой проводимости слоистых металлов в магнитном поле	93
<i>М. В. Никитин, В. Я. Покровский, С. Г. Зыбцев</i> Высокочастотные аномалии модуля Юнга в вискерах квазиодномерных проводников с волной зарядовой плотности	94
<i>Г. А. Овсянников, К. И. Константибян, Г. Д. Ульев, А. А. Климов, И. Е. Москаль, Ю. В. Кислинский, В. А. Шмаков, А. В. Шадрин, П. В. Лега</i> Генерация и детектирование спинового тока в 3d/5d гетероструктурах манганит/иридат	97
<i>В. Я. Покровский, С. Г. Зыбцев</i> Волны зарядовой плотности и их взаимодействие в NbS ₃ при разных температурах: результаты синхротронных исследований	100
<i>Н. М. Шубин, Ю. А. Успенский и А. А. Горбацевич</i> Особые точки в спин-зависимом транспорте молекулярных проводников	103

Сверхпроводимость. Сверхтекучесть

<i>А. Ф. Аминов, А. А. Соколик, Ю. Е. Лозовик</i> Эффекты увлечения в сверхпроводящих и сверхтекучих системах	107
<i>К. Ю. Арутюнов, В. В. Завьялов, Х. Т. Смазнова, А. Р. Юсупов, Д. Д. Карамов, А. Н. Лачинов</i> Наведенная сверхпроводимость в электроактивном полимере	110
<i>М. И. Банников, В. П. Мартовицкий, Ю. Г. Селиванов, А. Ю. Кунцевич</i> Сверхпроводимость в ко-допированных железом кристаллах сверхпроводника $\text{Sr}_{0.06}\text{Bi}_2\text{Se}_3$	112
<i>А. Ю. Дегтяренко, А. В. Садаков, А. В. Усольцев, Ц. Гэ</i> Исследование микроструктуры и сверхпроводящих свойств монокристаллов $\text{KCa}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{F}_2$	115
<i>В. В. Дмитриев, М. С. Кутузов, Д. В. Петрова, А. А. Солдатов, А. Н. Юдин</i> Измерение расщепления температуры сверхтекучего перехода в чистом ^3He в нематическом аэрогеле в магнитном поле.....	116
<i>В. В. Дмитриев, М. С. Кутузов, Д. В. Петрова, А. А. Солдатов, А. Н. Юдин</i> Влияние магнитного рассеяния на сверхтекучий переход в чистом ^3He в нематическом аэрогеле в магнитном поле.....	119
<i>В. В. Дмитриев, Д. В. Петрова, А. А. Солдатов, А. Н. Юдин</i> Расщепление сверхтекучего перехода в чистом ^3He в изотропном аэрогеле в сильном магнитном поле.....	121
<i>Е. А. Екимов, В. А. Сидоров, Н. М. Щелкачѳв, С. Г. Ляпин, Р. А. Хмельницкий</i> Сверхпроводимость алмазов, синтезированных в системах Au-B-C, Ag-B-C и Cu-B-C.....	123
<i>В. Д. Жакетов</i> Нейтронно-оптические исследования сложноупорядоченных слоистых систем.....	124
<i>А. А. Zyuzin, А. Yu. Zyuzin</i> Superconductivity from incoherent Cooper pairs in strong coupling and flat- band regimes	126

<i>А. Д. Ильина, С. А. Кузьмичев, И. А. Никитченко,</i> <i>И. В. Морозов, А. И. Шилов, Е. О. Рахманов, Т. Е. Кузьмичева</i> SnS-андреевская спектроскопия сверхпроводящего $\text{NaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$	128
<i>А. Е. Каракозов</i> Обобщенные уравнения БКШ для исследования механизма сверхпроводимости ферропниктидов.....	131
<i>Т. Е. Кузьмичева, С. А. Кузьмичев, К. С. Перваков, В. А. Власенко,</i> <i>А. Д. Ильина, И. А. Никитченко, А. С. Медведев</i> Структура сверхпроводящего параметра порядка пниктидов $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ семейства 1144 по данным туннельной спектроскопии планарных контактов на микротрещине	133
<i>И. С. Любутин, А. Г. Гаврилюк, В. В. Стружкин, Д. Н. Трунов,</i> <i>С. Н. Аксёнов, А. А. Миронович, М. В. Любутина, И. А. Троян</i> Магнитные свойства и сверхпроводимость полигидридов железа, синтезированных при высоких давлениях мегабарного диапазона	135
<i>А. П. Менушенков</i> О природе спаривания носителей заряда в ВТСП на основе BaBiO_3	139
<i>В. Г. Орлов, Г. С. Сергеев</i> Электронная зонная структура, природа химической связи, магнитные и магнитоэлектрические свойства La_2CuO_4 и $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$ — исходных соединений для изготовления высокотемпературных сверхпроводников.....	141
<i>В. А. Степанов, М. В. Голубков, А. В. Садаков, А. С. Усольцев,</i> <i>Д. А. Чареев</i> Спектроскопия андреевского отражения FeSe. Двухзонное описание зависимостей энергетических щелей от температуры	144
<i>Я. В. Туркин, Н. Г. Пугач</i> Динамический эффект близости в гибридной структуре сверхпроводник / ферромагнитный диэлектрик	147
<i>А. V. Tsvyashchenko, A. Velichkov, A. V. Salamatina, M. V. Magnitskaya,</i> <i>N. M. Chtchelkatchev, A. V. Bokov, D. A. Salamatina, A. V. Sidorov,</i> <i>M. G. Kozin, A. V. Nikolaev</i> Short-range orthorhombic fluctuations in the FeSe by the ^{111}Cd -TDPAC method	148

Корреляции. Квантовые фазовые переходы

<i>Г. В. Будкин, Е. Л. Ивченко</i> Учет кулоновских корреляций для расчета сдвиговых фототоков	151
<i>М. Г. Васин</i> Критическая динамика квантового фазового перехода.....	153
<i>L. B. Dubovskii and S. N. Burmistrov</i> Mott insulator in the Ginzburg–Landau approximation for the Hubbard model.....	155
<i>Ю. С. Поносов, Е. В. Комлева, Е. А. Панкрушина, Haohang Xu, Yu Sui, С. В. Стрельцов</i> Эффекты тримеризации в рамановских спектрах LiVO_2	157
<i>Г. Д. Чичеватов, В. В. Стегайлов</i> Свойства точечных дефектов в Fe_3O_4 и FeCr_2O_4 : анализ результатов DFT+U в контексте экспериментальных данных.....	158
<i>V. R. Shaginyan, A. Z. Msezane, G. S. Japaridze</i> On the fragmentation of charge carriers in heavy fermion metals	160

Топологические и тривиальные металлы и полуметаллы

<i>М. А. Anisimov, A. V. Bogach, D. A. Salamatin, V. A. Sidorov, A. V. Bokov, and A. V. Tsvyashchenko</i> Magnetotransport and magnetic H–T phase diagram in heavy fermionic Weyl semimetal YbCoC_2	162
<i>М. А. Anisimov, A. V. Bogach, A. V. Sidorov, A. V. Bokov, A. V. Tsvyashchenko</i> The contribution of spin fluctuations to resistivity in B20 metals MnSi and MnGe	163
<i>Н. В. Валенко, О. А. Дмитриева, С. Г. Тиходеев</i> Поляризационные свойства хиральных метаповерхностей.....	165
<i>П. Д. Григорьев, И. Р. Шейн, А. В. Садаков, О. А. Соболевский, Н. С. Павлов, И. А. Некрасов, Е. Мальцев, В. М. Пудалов</i> Новый механизм отрицательного магнитосопротивления в слоистых антиферромагнитных полуметаллах	167

<i>Д. А. Пиенай-Северин, С. А. Николаев, А. Т. Бурков</i> Вклад фермионов с псевдоспином 1 и 3/2 в орбитальную магнитную восприимчивость топологических полуметаллов	168
<i>А. Ш. Дотдаев, Я. И. Родионов, К. И. Кугель, Б. А. Аронзон</i> Магнитосопротивление вейлевских полуметаллов с кулоновскими примесями.....	171
<i>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, Д. Р. Хохлов</i> Микроволновая фотопроводимость в толстых пленках на основе топологической и тривиальной фаз $Hg_{1-x}Cd_xTe$	174

Методы. Технология

<i>П. В. Зинин, К. М. Булатов</i> Импульсный нагрев для изучения фазовых переходов в твёрдых телах при высоких давлениях	177
<i>В. В. Сошенко, С. В. Большедворский, А. М. Козодаев, Е. А. Примак, И. С. Кожокару, В. Н. Сорокин, А. Н. Смолянинов, А. В. Акимов</i> Магнитометр на основе дисперсионного считывания состояний NV центра в алмазе.....	178
<i>А. Р. Лепешкин</i> Исследования электронно-инерционных эффектов в металлических проводниках в поле центробежных ускорений — к 110-летию опытов русских ученых П. Н. Лебедева, Л. И. Мандельштама и Н. Д. Папалекси	180
<i>S. A. Pozdneev</i> Application of the optical computer system with associative holographic memory to the simulation of the elementary processes in gas and plasma....	183
<i>Ф. А. Пудонин, И. А. Шерстнев, Д. С. Косцов, Д. Д. Носкова, Н. К. Масракова, А. П. Болтаев</i> Эффект Штерна–Герлаха как квантовая технология получения наноструктур с заданной однонаправленной анизотропией физических свойств	184

Разное

Т. А. Аксенова, И. С. Цебрук, Н. В. Классен, В. В. Кедров, А. П. Киселев, А. П. Покидов

Усиление электронных и атомарных корреляций в молекулярно-кластерных композициях разнородных веществ187

О. А. Дмитриева, Н. А. Гиппиус, С. Г. Тиходеев

Самосогласованный расчет эффектов мультистабильности экситон-поляритонов в хиральном микрорезонаторе 190

Л. В. Ельникова

Фрактонные модели в приложениях теории упругости искривленных геометрических структур с аллотропами углерода192

О. Н. Лис, Д. П. Козленко, С. Е. Кичанов, Е. В. Лукин, И. Ю. Зель

Влияние высокого давления на кристаллическую, магнитную структуру и колебательные спектры ван-дер-ваальсовых соединений193

А. А. Топоркова, С. А. Винокуров, Н. В. Классен, И. С. Цебрук

Электрические корреляции между микропузырьками на поверхности водных растворов195

Н. А. Фоминых, В. В. Стегайлов

Влияние точечных дефектов на поляронный транспорт в феррите никеля NiFe_2O_4 198

С. М. Якубеня

Распределение Ферми–Дирака для дефектов с различной энергией кулоновской корреляции199

МАГНЕТИЗМ

Цепочки магнитных ионов в материале катода перспективных Zn-ионных аккумуляторных батарей

А. А. Анисимова¹, Я. М. Плотников¹, Дм. М. Коротин^{1,2}

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

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

Устройства хранения энергии на основе ионов Zn^{2+} обладают многими преимуществами перед используемыми сейчас металл-ионными батареями. Материалы для производства таких источников дешевле (цинк – очень распространённый элемент) и экологичнее (возможно использование электролитов на водной основе, в отличие от Li-ионных источников), безопаснее (материалы не воспламеняются самопроизвольно), а также менее требовательны к условиям производства, чем Li-ионные батареи. Кроме того, показано, что водные Zn-ионные батареи обладают одной из самых выгодных комбинаций удельной энергии и удельной мощности, высокой стабильностью и скоростью заряда/разряда на порядок превышающей существующие Li-ионные источники энергии [1]. Недавно [2] в качестве перспективного материала для катодов Zn-ионных батарей был предложен $NH_4 \cdot V_2O_5$ — слоистый оксид ванадия с интеркалированными в межслойное расстояние ионами аммония.

Данная работа посвящена изучению кристаллической, электронной и магнитной структур указанного соединения с помощью первопринципных расчетов методом DFT+U. В результате моделирования релаксации кристаллической решетки, в межслойном промежутке в структуре V_2O_5 определены энергетически наиболее выгодные позиции для ионов NH_4^+ . Показано, что интеркаляция ионов аммония в пентоксид ванадия приводит к увеличению межслойного расстояния и искажениям локаль-

ного окружения ионов V (увеличению длин связей V-O), что согласуется с имеющимися экспериментальными данными [2].

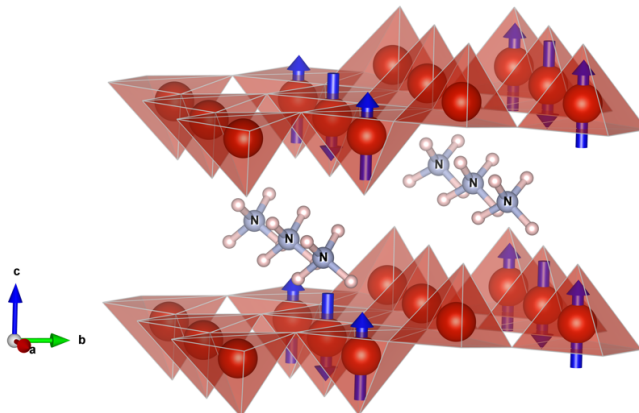


Рис. 1. Кристаллическая структура $\text{NH}_4 \cdot \text{V}_2\text{O}_5$. Пирамиды красного цвета образованы ионами кислорода, ионы вандия находятся в центре пирамид. Синими стрелками показано полученное в результате расчета наимизшее по энергии магнитное упорядочение на ионах V

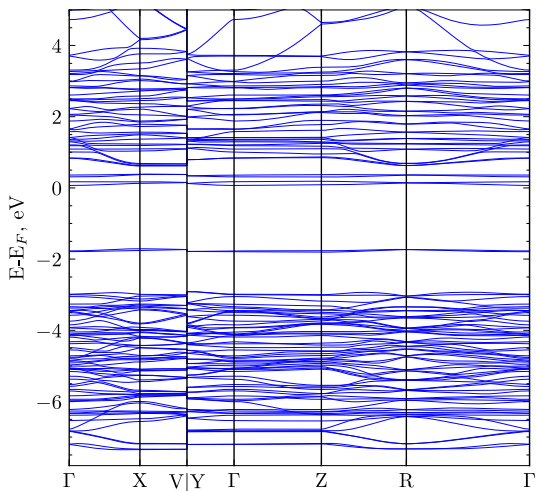


Рис. 2. Зонная структура $\text{NH}_4 \cdot \text{V}_2\text{O}_5$

Расчёты полной энергии для различных вариантов упорядочений магнитных моментов в элементарной ячейке показали, что наиболее выгодным является формирование цепочек магнитных ионов ванадия вдоль направления [100] ячейки с антиферромагнитным упорядочением магнитных моментов внутри цепочки (рис. 1).

Расчёты электронной структуры показали (рис. 2), что в $\text{NH}_4\text{-V}_2\text{O}_5$ половина из ионов ванадия в элементарной ячейке находится в степени окисления V^{4+} и имеет заполненную d -орбиталь x_y симметрии, образующую изолированную узкую энергетическую зону под уровнем Ферми. Это приводит к формированию магнитного момента на ионах ванадия.

Исследования выполнены при поддержке проекта РНФ № 24-22-00349.

Список литературы

- [1] Jia X., Liu C., Neale Z. G., Yang J. and Cao G., Chem. Rev. 120, 7795 (2020).
- [2] Wang Y., Wei S., Qi Z.-H., Chen S., Zhu K., Ding H., Cao Y., Zhou Q., Wang C., Zhang P., Guo X., Yang X., Wu X., and Song L., Proc. Natl. Acad. Sci. 120, e2217208120 (2023).

Переключение доменов, вызванное деформацией во фрустрированном антиферромагнетике CoTi_2O_5

Д. Бер¹, Л. С. Таран^{2*}, Д. Г. Портер³, А. Бомбарди³,
Д. Прабхакаран⁴, Р. Д. Джонсон^{1,3}, С. В. Стрельцов^{2,5}

¹Университетский колледж Лондона, г. Лондон, Великобритания

²Институт физики металлов им. М. Н. Михеева, УрО РАН,
г. Екатеринбург, Россия

³Лаборатория Резерфорда–Эплтона, д. Чилтон, г. Дидкот, Великобритания

⁴Оксфордский университет, г. Оксфорд, Великобритания

⁵Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: leonidtaran97@gmail.com

Разработка магнитных носителей информации является актуальной и высокоприоритетной задачей в области спинтроники. Особое внимание уделяется исследованиям новых способов манипулирования маг-

нитными материалами для более надежного хранения и быстрой обработки данных. В последнее время в этом направлении проявляется большой интерес. Уже имеются некоторые успехи в переключении магнитных доменов с помощью приложенной деформации в ферромагнитных тонких пленках [1], и в антиферромагнитных векторных доменах Нееля, которые стабилизируются с помощью магнитокристаллической анизотропии [2].

Ещё одним способом для достижения переключения доменов, вызываемого деформацией, является прямая модуляция обменного поля. Она характеризует взаимодействие между магнитными ионами и тем самым выбирает энергетически подходящий магнитоструктурный домен. Одной из систем, пригодной для проверки такого метода, является титанат кобальта CoTi_2O_5 .

В данной работе, используя резонансное упругое рентгеновское рассеяние для исследования магнитной структуры и искажения решетки, демонстрируется практически полное переключение магнитных доменов путем приложения одноосного напряжения, сопряженного с моноклинной деформацией. Механизм переключения достигается простой модуляцией обменных взаимодействий Гейзенберга. Представленные расчеты в рамках теории функционала плотности подтверждают механизм магнитоупругой связи и демонстрируют потенциальную функциональность таких чувствительных к одноосной деформации материалов в устройствах спинтроники.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФ №23-12-00159.

Список литературы

- [1] Rousseau O., Weil R., Rohart S., Mougin A., Scientific Reports, 6, 23038 (2016).
- [2] Ni Z., Haglund A. V., Wang H., Xu B., Bernhard C., Mandrus D.G., Qian X., Mele E. J., Kane C. L., Wu L., Nature Nanotechnology, 16, 782 (2021).

Магнитные свойства LiCu_3O_3 — квазидвумерного антиферромагнетика на разбавленной квадратной решетке

С. К. Готовко^{1,2,*}, В. Ю. Иванов³, А. А. Буш⁴, В. И. Козлов⁴,
Е. Г. Николаев¹, Л. Е. Свистов^{1,**}

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

²*Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики,
г. Москва, Россия*

³*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, г. Москва, Россия*

⁴*МИРЭА — Российский технологический университет, г. Москва, Россия*

**E-mail: sofyaготовко@gmail.com*

***E-mail: svistov@kapitza.ras.ru*

LiCu_3O_3 является новым квазидвумерным магнетиком ($S = 1/2$) с высокой степенью замещения магнитных ионов немагнитными. Кристаллическая структура LiCu_3O_3 содержит «тройки» магнитных плоскостей ионов Cu^{2+} ($S = 1/2$), находящихся в узлах квадратной решетки, в то же время ионы Li^+ занимают те же кристаллографические позиции, что и Cu^{2+} , с разными степенями замещения для внутренней и внешних плоскостей — 20 % и 40 % [1]. Сами тройки квадратных плоскостей разделены плоскостями немагнитных ионов Cu^+ , что определяет квазидвумерность LiCu_3O_3 (рис. 1). Степень замещения во внутренних плоскостях (А) меньше порога протекания в квадратной решётке, поэтому магнитные ионы в таких плоскостях образуют бесконечный кластер, в то время как во внешних плоскостях (В) степень замещения критически близка к порогу протекания. Такие необычные образцы стабильны при нормальных условиях и имеют воспроизводимые свойства.

В монокристаллах LiCu_3O_3 были проведены ЯМР исследования на ядрах ^7Li и измерения намагниченности, в результате которых были обнаружены частичное магнитное упорядочение при температуре $T_{c1} = 123$ К и изменение магнитного состояния при $T_{c2} \approx 30$ К. Высокотемпературный переход мы связываем с возникновением магнитного порядка в плоскостях с меньшим разбавлением, а низкотемпературный переход — с упорядочением в плоскостях с сильным замещением. Широкие спектры ЯМР ниже T_{c1} отражают тот факт, что в кристалле устанавливается непрерыв-

ное распределение направлений или величин магнитных моментов, характерное для спиральных, спин-модулированных структур или структур с замороженным беспорядком.

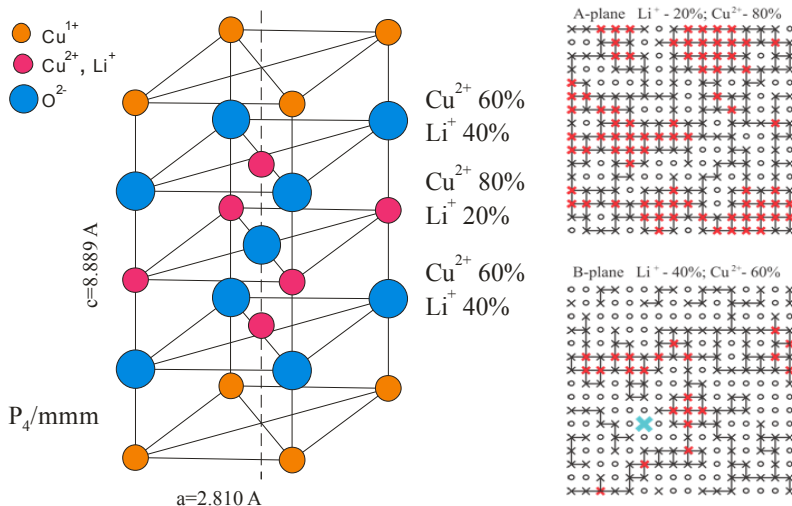


Рис. 1. Левая панель: Кристаллографическая структура LiCu_3O_3 . Позиции различных ионов показаны разными цветами.

Правая панель: Фрагменты смоделированных квадратных плоскостей А и В со случайным расположением магнитных ионов Cu^{2+} (крестики) и немагнитных Li^+ (круги) в узлах правильной квадратной решётки. Связи между ближайшими магнитными ионами показаны линиями, магнитные ионы с полным набором связей с соседними ионами обозначены красным цветом; магнитный ион, не имеющий связей с ближайшими соседями, обозначен синим цветом.

При измерениях намагниченности был обнаружен спин-флоп переход, который указывает на наличие слабой одноосной анизотропии магнитной структуры. Относительно малое значение магнитной восприимчивости отражает жёсткость спиновой системы ($\mu_0 H_{\text{sat}} \approx 200 \text{ Т}$).

Результаты опубликованы в Phys. Rev. B [2]. Работа была поддержана грантом РФФ 22-12-00259 (обработка данных ЯМР и вычисления), и Министерством высшего образования РФ FSFZ-2023-0005 (рост кристаллов LiCu_3O_3).

Список литературы

- [1] Hibble S. J., Kohler J., Simon A., and Paider S. LiCu₂O₂ and LiCu₃O₃: New mixed valent copper oxides // *J. Solid State Chem.* **88**, 534 (1990).
- [2] Bush A. A., Gotovko S. K., Ivanov V. Yu., Kozlov V. I., Nikolaev E. G., and Svistov L. E. Magnetic properties of LiCu₃O₃: A quasi-two-dimensional anti-ferromagnet on a depleted square lattice // *Phys. Rev. B* **109**, 115151 (2024).

Фазовые переходы в четырехвершинной модели Поттса на слоистой треугольной решетке

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

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

В области физики конденсированного состояния последнее время особое внимание уделяется исследованию фазовых переходов (ФП), магнитных структур и критических явлений в спиновых системах [1–4].

В данной работе нами изучается влияние магнитного поля на магнитные структуры основного состояния, магнитные и термодинамические свойства четырехвершинной модели Поттса на слоистой треугольной решетке для различных значений межслойного обменного взаимодействия.

Гамильтониан данной модели имеет вид:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \cos \theta_{i,j} - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle} \cos \theta_{i,k} - h \sum_{\langle i \rangle} S_i \quad (1)$$
$$\cos \theta_{i,j} = \begin{cases} 1, & \theta_i = \theta_j \\ -\frac{1}{3}, & \theta_i \neq \theta_j \end{cases}$$

где $\theta_{i,j}$ — угол между спинами \vec{S}_i и \vec{S}_j , J_1 — обменное взаимодействие между спинами внутри слоя, J_2 — обменное взаимодействие между спинами находящимися в соседних слоях, h — величина магнитного поля (приводится в единицах $|J_1|$). В данной работе $J_1 = -1$, J_2 меняется в диапазоне $-1 \leq J_2 \leq 1$, а величина поля $0.0 \leq h \leq 10.0$.

Исследование в данной работе проведено с помощью высокоэффективного параллельного репличного обменного алгоритма метода Монте-Карло (МК) [5].

Расчёты проводились с использованием периодических граничных условий и линейными размерами $L \times L \times L$, $L = 12 \div 36$, где L измеряется в размерах элементарной ячейки. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался участок длиной $\tau_0 = 4 \cdot 10^4$ шагов МК на спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль Марковской цепи длиной до $\tau = 20\tau_0$ МК шагов на спин.

Получены температурные зависимости основных термодинамических параметров. Определены типы ФП для разных обменных взаимодействий. Получена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины внешнего магнитного поля и межслойного обменного взаимодействия для рассматриваемой модели. Получены магнитные структуры основного состояния в интервале поля $0 \leq h \leq 10.0$.

Список литературы

- [1] Сосин С. С., Прозорова С. С., Смирнов А. И., *УФН*, 92 (2005).
- [2] Муртазаев А. К., *УФН*, 169,773 (1999).
- [3] Коршунов С. Е., *УФН*, 176, 233 (2006).
- [4] Ramazanov M.K., Murtazaev A.K., Magomedov M.A. et al., *Phys. Metals Metallogr.* 124, 429–436 (2023).
- [5] Hukushima K., Nemoto K., *J. Phys. Soc. Jpn.* 65 1604-1608. (1996).

Мультипольные магнитные структуры в «немагнитном» гексагональном железе: возможное решение старой загадки

В. Е. Дмитриенко, В. А. Чижиков

*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова
НИЦ «Курчатовский институт»*

Обычное железо α -Fe при нормальных условиях является ферромагнетиком с дипольным магнитным моментом чуть больше двух магнетонов Бора на атом и с объёмно-центрированной кубической решёткой, слегка

искажённой магнитоотрицательностью. При высоких давлениях (> 13 ГПа) происходит хорошо известный структурный переход в гексагональную плотноупакованную фазу ϵ -Fe, которая считается немагнитной на основании мёссбауэровских данных (см. недавнюю работу [1], доложенную на СКЭС-2023, и ссылки в ней на ранние работы). Однако многочисленные теоретические исследования (см. [2] и ссылки там) уверенно предсказывают для ϵ -Fe несколько антиферромагнитных фаз (наиболее энергетически выгодная называется afmII), которые явно противоречат экспериментальным данным. Эта проблема важна ещё и потому, что возможна связь между магнетизмом и сверхпроводимостью в ϵ -Fe [3].

В настоящей работе предложено возможное решение этой старой загадки. Мёссбауэровские данные на самом деле не исключают магнетизма ϵ -Fe, так как из отсутствия зеемановского расщепления мёссбауэровских уровней энергии следует только, что на мёссбауэровских атомах в ϵ -Fe нет *дипольных* магнитных моментов. Во всех предсказанных ранее антиферромагнитных фазах на атомах есть заметные дипольные магнитные моменты, поэтому эти фазы действительно противоречат экспериментальным данным. Мы предполагаем, что магнетизм ϵ -Fe характеризуется *мультипольными* магнитными моментами (например, квадрупольными, тороидными, октупольными и пр.), при этом в ϵ -Fe нарушается симметрия обращения времени, но *дипольные* моменты обращаются точно в ноль из-за высокой симметрии структуры. Таким образом магнитная структура ϵ -Fe может быть во многом похожа на скрытое магнитное упорядочение в URu_2Si_2 [4] и в кристаллах рения [5].

В соответствии с экспериментальными данными мы предполагаем, что пространственная симметрия ϵ -Fe остаётся такой же, как в немагнитном состоянии (гексагональная пространственная группа $P6_3/mmc$, два атома в элементарной ячейке). Мы изучили подходящие варианты симметрии мультипольных магнитных структур ϵ -Fe с той же элементарной ячейкой и провели первопринципные расчёты их электронных и неколлинеарных спиновых плотностей $\mathbf{M}(\mathbf{r}) = (M_x, M_y, M_z)$ с помощью пакета Quantum ESPRESSO для различных типов псевдопотенциалов.

На рис. 1 приведены результаты расчётов для четырёх структур с различными магнитными симметриями, причём для структуры (a) магнитная симметрия совпадает с кристаллической $P6_3/mmc$, и нарушается только симметрия обращения времени. В структурах (a) и (b) атомы железа

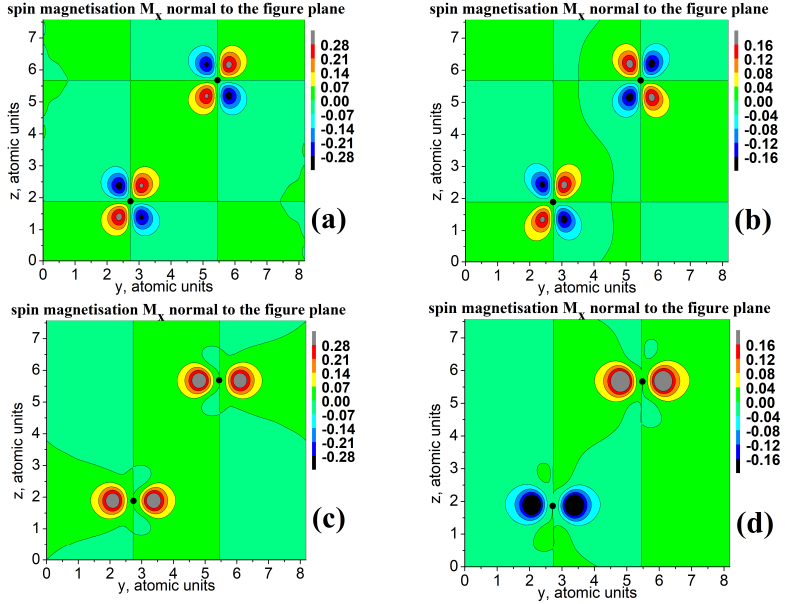


Рис. 1. Распределение компоненты M_x спиновой намагниченности $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ для четырёх из возможных магнитных структур кристалла гексагонального ϵ -Fe в зеркальной плоскости yz , проходящей через оба атома элементарной ячейки. Эти атомы не могут быть совмещены простым переносом, что приводит к существованию чисто магнитных брэгговских рефлексов. Компонента M_x направлена перпендикулярно плоскости рисунка, и её амплитуда показана цветом, а компоненты M_y и M_z равны нулю в этой плоскости. При обращении времени намагниченность меняет знак, и получающаяся из (a) магнитная структура не может быть совмещена с исходной никакой операцией пространственной симметрии (похожая ситуация имеет место в URu_2Si_2 [4]). В местах расположения ядер мёссбауэровских атомов (чёрные точки) $\mathbf{M} = 0$, что приводит к наблюдаемому отсутствию зеемановского расщепления

представляют собой магнитные антитороидные вихри с нулевым магнитным моментом, похожие на те, что были предложены для скрытого магнитного упорядочения в URu_2Si_2 [4], но осевая симметрия вихрей не тетрагональная, а тригональная. В структурах (c) и (d) вихри имеют другую конфигурацию, у них отсутствует горизонтальная зеркальная плоскость. Вычисленная полная абсолютная намагниченность $\int |\mathbf{M}| dV$ ока-

зывается от одного до двух магнетонов Бора на атом в зависимости от выбранного псевдопотенциала. Все четыре структуры более выгодны энергетически, чем предлагавшиеся ранее антиферромагнитные. Детали структуры этих вихрей можно исследовать, используя магнитную рентгеновскую и нейтронную дифракцию для двух типов чисто магнитных брэгговских рефлексов, амплитуды которых были вычислены для всех рассматриваемых структур. Эти магнитные рефлексы возбуждаются из-за того, что магнитное мультипольное упорядочение имеет разную ориентацию для двух атомов в ячейке, см. рис. 1.

Список литературы

- [1] Гаврилюк А. Г., Стружкин В. В., Аксенов С. Н., Миронович А. А., Троян И. А., Иванова А. Г., Любутин И. С. Электронные и магнитные свойства фазы железа ϵ -Fe при высоких давлениях до 241 ГПа в области температур 4–300 К // Письма в ЖЭТФ **117**, 132 (2023).
- [2] Lebert B. W. et al. Epsilon iron as a spin-smectic state // PNAS **116**, 20280 (2019).
- [3] Belozerov A. S., Katanin A. A., Irkhin V. Yu., and Anisimov V. I. Magnetic fluctuations and superconducting pairing in ϵ -iron // Phys. Rev. B **101**, 155126 (2020).
- [4] Dmitrienko V. E. and Chizhikov V. A. Hidden order in URu₂Si₂: Symmetry induced antitoroidal vortices // Phys. Rev. B **98**, 165118 (2018).
- [5] Дмитриенко В. Е., Чижиков В. А. Сб. тез. «СКЭС-2023», 36. — М.: ФИАН, 2023.

Spin-state transitions in Co₂FeBO₅ ludwigite under high pressure: an *ab-initio* investigation

V. S. Zhandun, N. V. Kazak

*Kirensky Institute of Physics, Federal Research Center KSC SB RAS,
Krasnoyarsk, Russia*

We have performed *ab initio* study of a possible effect of a hydrostatic pressure on the electronic and magnetic states of Fe and Co ions in Co₂FeBO₅

ludwigite. The external pressure was gradually increased by an increment of 10 GPa up to 50 GPa. By analyzing a pressure dependence of the magnetic moments, we found that in the pressure range of $0 < P < 10$ GPa the magnitudes of the magnetic moments both of Co and Fe atoms are almost pressure independent (Fig. 1,a-d), while within the interval of 10-40 GPa the magnetic moments of all metal sites show a strong dependence on pressure.

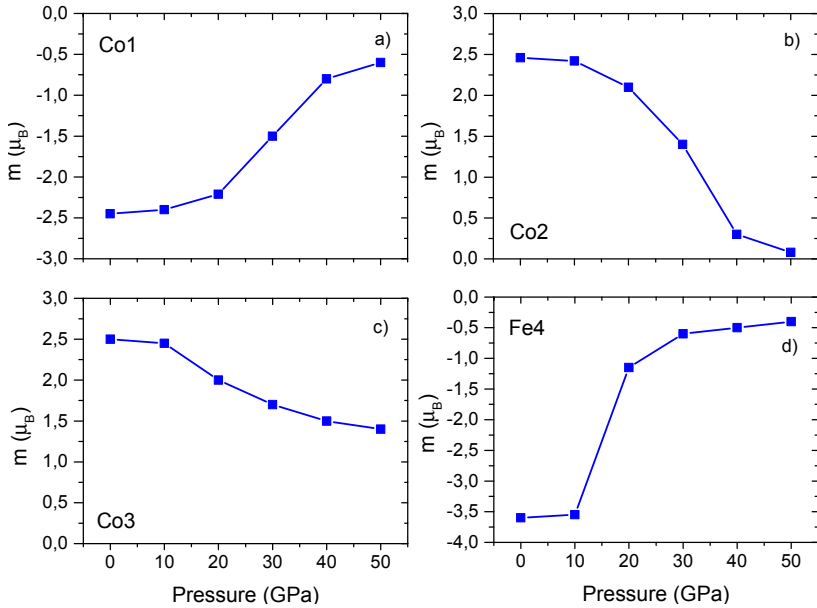


Fig. 1. Calculated pressure dependencies of magnetic moments at Co1 (a), Co2 (b), Co3 (c), and Fe4 (d) sites

So, the Co1 magnetic moment reduces down to a value of $m_s^{Co1}(40 \text{ GPa}) = 0.7\mu_B$ and then more slowly in the P range 40–50 GPa (Fig. 1,a). The high pressure has a pronounced effect on the Co2 magnetic moment leading to the drastic decrease in the value at 40 GPa, of about one order magnitude, and became equal $m_s^{Co2}(40 \text{ GPa}) = 0.3\mu_B$ (Fig. 1,b). The behavior of the Co3 moment is rather intriguing; a monotonic decrease with

pressure up to 20 GPa followed by a slower decrease. In fact, at the highest pressure for which the calculation was performed, the Co3 magnetic moment shows a rather large value $m_S^{Co3}(40 \text{ GPa}) = 1.5\mu_B$, assuming no spin-transition at this metal site (Fig. 1,c). Finally, we have found a drastic effect of the high pressure on the magnetic moment of the Fe4 atom, which shows a two-step change. In the pressure range of 10–20 GPa, the iron magnetic moment sharply drops, reaching the magnitude of $m_S^{Fe4}(20 \text{ GPa}) = 1.1\mu_B$, and then monotonically decrease up to 40 GPa with a $m_S^{Fe4}(40 \text{ GPa}) = 0.5\mu_B$ (Fig. 1d).

The Co and Fe occupations of $3d$ -shells as a function of pressure were analyzed. It can be seen that the decrease in the magnetic moment at all metal sites is mainly associated with the redistribution of d -electrons between spin-up and spin-down states. The pressure has a much smaller effect on the electronic distribution of Co1 and Co3 atom. Moreover, it was found that high pressure has a larger effect on the local environment of Co2 and Fe4 sites, leading to a sharp increase in their local distortions. At last, we have studied the pressure evolution of bandgap. The collapse of the energy bandgap and metal-insulator transition at critical pressure was found (Fig. 2).

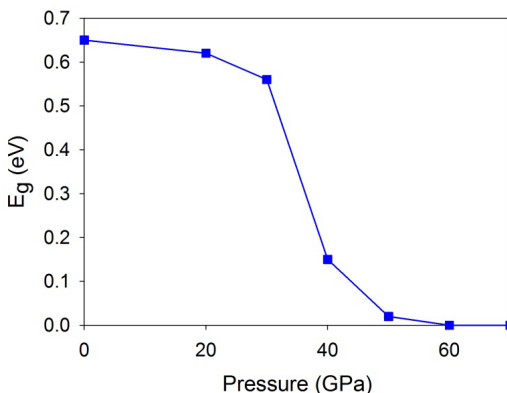


Fig. 2. Pressure evolution of bandgap

Acknowledgement. The study was supported by the Russian Science Foundation grant No. 24-12-20012, <https://rscf.ru/project/24-12-20012>, Krasnoyarsk Regional Fund of Science.

Мотт-Хаббардовские возбуждения в оптических спектрах AFM изолятора LaTiO_3

Н. Н. Ковалева

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

E-mail: kovalevann@lebedev.ru

Классификация оксидов переходных металлов с сильными электронными корреляциями, зависящими от величины кулоновского отталкивания на одном узле U , определяется соотношением энергий U и Δ , последняя является характерной энергией разрешенного p - d перехода с переносом заряда (СТ). Если $U < \Delta$, низко-энергетичное возбуждение, возникающее выше запрещенной зоны, является возбуждением d - d типа, и соединение классифицируется как Мотт-Хаббардовский (МН) изолятор, в противном случае, низко-энергетичное возбуждение является возбуждением p - d типа между ионами лиганда и переходного металла, а система классифицируется как СТ изолятор [1].

До настоящего времени, фундаментальные вопросы, связанные с физикой МН возбуждений, в особенности, МН экситонов (МНЕ), в широком классе соединений МН изоляторов, остаются недостаточно изученными. Согласно результатам теоретических исследований [2], форма полосы МНЕ должна обнаруживать критическое поведение, связанное с установлением антиферромагнитного (AFM) порядка. В отличие от поведения МНЕ в условиях ферромагнитного (FM) порядка, полоса МНЕ в центре зоны Бриллюэна может быть существенно уширена и смещена в сторону меньших энергий в AFM соединениях. В этом случае, аномальное уширение полосы МНЕ при понижении температуры ниже температуры AFM перехода должно приводить к увеличению оптического спектрального веса (SW), что, в свою очередь, говорит об увеличении кинетической энергии экситона в процессе его частичной делокализации. Упомянутое выше свойство МНЕ необходимо учитывать при объяснении таких экзотических свойств допированных МН изоляторов, как колоссальное магнетосопротивление (CMR — “colossal magnetoresistance”) и высокотемпературная сверхпроводимость (HTSC).

Магнитные свойства МН изоляторов в переходных металлах определяются суперобменным (SE) взаимодействием, включающим спиновые и орбитальные степени свободы, которые, в свою очередь связаны с виртуальными $d-d$ возбуждениями электронов между соседними ионами переходного металла, осуществляемыми через ионы мостикового лиганда [3]. Энергии $d-d$ возбуждений отличаются для переноса с параллельным (high-spin HS) или антипараллельным (low-spin LS) спином и связаны с мультиплетной структурой возбужденного иона переходного металла [4], которая, в свою очередь, зависит от параметров локального Кулоновского отталкивания U и константы хундовского обмена J_H . Ранее, на примере классического CMR соединения LaMnO_3 , свойства которого определяются e_g электронами, было продемонстрировано, что HS и LS межзельные возбуждения могут быть идентифицированы в оптических спектрах, что также позволило оценить эффективные параметры U и J_H [5,6].

Соединения редкоземельных (R) титанатов $RTiO_3$ определяются свойствами t_{2g} электронов в основном состоянии. Свойства HS и LS возбуждений были ранее изучены нами в FM $YTiO_3$ [7]. В свете рассматриваемой фундаментальной проблемы, представляет интерес изучение МН возбуждений в AFM соединении LaTiO_3 , которые не были ранее изучены. В настоящей работе, с применением методики спектроскопической эллипсометрии (0.5–5.6 эВ) были исследованы диэлектрические функции монокристалла LaTiO_3 , имеющего температуру Нееля $T_N = 146$ К, в широком интервале температур $10 \text{ К} \leq T \leq 300 \text{ К}$. Обнаружено, что диэлектрические функции кристалла LaTiO_3 , измеренные на ac плоскости (в обозначениях орторомбической $Pbnm$ симметрии), являются практически изотропными и слабо зависят от температуры. При низких энергиях, в спектрах комплексной диэлектрической функции была обнаружена интенсивная полоса с максимумом на ~ 1.3 эВ. Её спектральное положение заметно отличается от положения интенсивной низкоэнергетичной полосы в FM соединениях $YTiO_3$ [7] и SmTiO_3 [8], демонстрирующей максимумы на ~ 1.9 – 2.1 эВ и ~ 1.8 эВ, соответственно. В дополнение, оптический SW полосы 1.3 эВ в LaTiO_3 имеет количественно отличающееся значение. Положение максимума полосы 1.3 эВ в LaTiO_3 находится в хорошем соответствии с расчетным теоретическим значением 1.33 эВ для интервалентного оптического перехода, включающего электронную дырку, локализованную на ионе переходного металла, который может

быть ассоциирован с МНЕ в CMR манганитах [9]. Кроме того, соотношение между спектральным положением максимума полосы 1.3 эВ (v_{\max}) и ее полушириной на полувысоте (FWHM) ΔW в LaTiO_3 удовлетворяет уравнению $v_{\max} = \frac{\Delta W^2}{16kT \ln 2}$ [10], тем самым подтверждая, что природа этой полосы связана с фотоиндуцированной прыжковой проводимостью локализованных носителей заряда и может быть идентифицирована как МНЕ. В таком случае, низкоэнергетичная полоса, проявляющаяся на заметно более высоких энергиях в YTiO_3 и SmTiO_3 , по-видимому, связана с экситонным возбуждением, включающим дырку, локализованную на ионе кислорода, то есть с СТ экситоном (СТЕ), максимум которого теоретически предсказан на энергии 2.1–2.3 эВ [9].

Исследование разностных спектров (a, c) комплексных диэлектрических функций в LaTiO_3 при температурах выше и ниже температуры Нееля $T_N = 146$ К позволило идентифицировать переходы $d^1 d^1 - d^2 d^0$ [4] в LS состоянии 3T_2 и 1E при ~ 3.7 eV и в состоянии 1A_1 при ~ 5.15 eV. В рамках эффективной модели SE взаимодействия [3] были оценены параметры локального кулоновского отталкивания $U \sim 4.2$ eV, а также константы хундовского обмена $J_H \sim 0.5$ eV. Температурные измерения позволили обнаружить, что интенсивная полоса с максимумом ~ 1.3 эВ демонстрирует критическое поведение и аномальное уширение ниже T_N , которое характерно для МНЕ [11]. Обнаруженные свойства низкоэнергетичной полосы 1.3 эВ в LaTiO_3 находятся в хорошем согласии с теоретически предсказанным поведением для МНЕ в условиях установления AFM порядка [2].

Список литературы

- [1] Zaanen J., Sawatsky G. A., and Allen J. W., *Phys. Rev. Lett.* **55**, 418 (1985).
- [2] Doniah S., Roulet B. J., Fisher M. E., *Phys. Rev. Lett.* **27**, 262 (1971).
- [3] Oleś A. et al., *Phys. Rev. B* **72**, 214431 (2005).
- [4] Sugano S., Tanabe Y., Kamimura H., *Multiplets of Transition-Metal Ions in Crystals*, Academic Press, 1970.
- [5] Kovaleva N. N. et al., *Phys. Rev. Lett.* **93**, 147204 (2004).
- [6] Kovaleva N. N. et al., *Phys. Rev. B* **81**, 235130 (2010).
- [7] Kovaleva N. N. et al., *Phys. Rev. B* **76**, 155125 (2007).
- [8] Gössling A. et al., *Phys. Rev. B* **78**, 075122 (2008).
- [9] Kovaleva N. N. et al., *JETP* **94**, 178 (2002).

[10] Hush N. S., *Prog. Inorg. Chem.* **8**, 391 (1967).

[11] Kovaleva N. N., *J. Alloys Compd.* **976**, 173192 (2024).

Влияние допирования и термобарического отжига на микроструктуру мультиферроика $\text{Vi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$

И. Е. Костылева¹, Д. А. Саламатин^{1,2}, Л. Ф. Куликова¹, А. В. Боков¹,
И. П. Зибров¹, П. В. Энкович¹, 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*

Практическое использование мультиферроика ViFeO_3 ограничено из-за наличия пространственной спин-модулированной циклоиды, препятствующей проявлению линейного магнитоэлектрического эффекта и макроскопического магнитного момента. Одним из способов подавления магнитной циклоиды является частичное замещение ионов Vi^{3+} на ионы редкоземельных металлов, в частности ионы Tb^{3+} . Еще одним способом является внешнее воздействие в процессе синтеза, например, с помощью высокого давления, оказывающее влияние на микроструктуру и размеры кристаллитов синтезируемых поликристаллических образцов.

Образцы $\text{Vi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0.05, 0.1, 0.3$), предварительно полученные либо в ромбоэдрически искаженную структуру перовскита (пространственная группа $R3c$), аналогичную родительскому соединению ViFeO_3 , либо в орторомбическую структуру GdFeO_3 типа (пространственная группа $Pnma$), затем подвергались термобарическому отжигу. В результате впервые удалось повысить предел растворимости Tb в исходной фазе $R3c$ до 10% без перехода в орторомбическую структуру из-за вносимых допированием искажений кристаллической решетки [1].

По результатам рентгеноструктурного анализа образцов было обнаружено, что обработка высоким давлением приводит к минимизации или полному исчезновению паразитных фаз, следы которых наблюдались на образцах после стандартного синтеза. Для образцов $\text{Vi}_{0.95}\text{Tb}_{0.05}\text{FeO}_3$

и $\text{Vi}_{0.9}\text{Tb}_{0.1}\text{FeO}_3$, со структурой $R3c$, по методу Вильямсона-Холла для дифракционных пиков (012) и (024) были проведены оценки размеров кристаллитов и степени неоднородной деформации и микронапряжений в образцах. Было обнаружено, что увеличение количества ионов Tb с 5 до 10 % приводит к заметному уменьшению линейных размеров кристаллитов в образцах, а также к существенному уменьшению микронапряжений в решетке, благодаря более упорядоченному размещению примеси. Средние линейные размеры кристаллитов в образце с 10 % Tb сравнимы с периодом спин-модулированной циклоиды, что, по-видимому, является дополнительным фактором, затрудняющим ее формирование. При оценке влияния термобарического отжига обнаружено, что отжиг образцов с минимальным содержанием Tb (5 %) уменьшает размер кристаллитов, а в образцах с 10 % Tb — незначительно увеличивает. При этом во всех составах барический отжиг существенно уменьшает микронапряжения в кристаллической решетке.

Исследование микроструктуры и элементный анализ образцов, проведенные с помощью электронного сканирующего микроскопа, подтвердили их соответствие заданному стехиометрическому составу и наличие отчетливых граней на поверхности зерен. Размеры зерен существенно превышают размеры кристаллитов, определенные из рентгеновских данных. Наблюдается уменьшение размеров зерна при формировании орторомбической кристаллической структуры в составе с 30 % Tb.

Анализ рамановских спектров образцов показал соответствие наблюдаемых мод пространственным группам симметрии родительского ViFeO_3 , при этом в силу различной ориентации кристаллитов в поликристалле наблюдаются не все возможные моды. Положения пиков в спектрах незначительно отличаются от наблюдаемых в ViFeO_3 , что связано как с допированием ионами Tb, так и со способом отжига образцов.

Данная работа была частично поддержана грантом РФФ № 22-72-00014.

Список литературы

- [1] Salamatin D. A., Kichanov S. E., Kostyleva I. E. et al., *Appl. Phys. Lett.* 122, 211905 (2023).

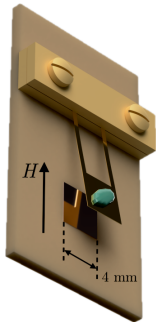
Влияние немагнитного разбавления на магнитную фазовую диаграмму антиферромагнетика на треугольной решётке $\text{Rb}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}(\text{MoO}_4)_2$

И. А. Крастилевский^{1,2}, В.Н. Глазков^{1,2}

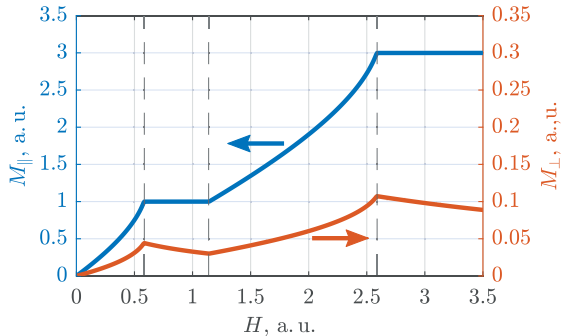
¹ИФП им. П. Л. Капицы РАН, г. Москва, Россия

²НИУ ВШЭ, г. Москва, Россия

Соединение $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ является примером антиферромагнетика на треугольной решётке. Структура его магнитных фаз хорошо известна [1, 2], в магнитном поле, близком к $1/3$ поля насыщения наблюдается фаза «плато намагниченности» с $M = M_{sat}/3$. В этой фазе реализуется коллинеарный порядок типа «UUD», стабилизируемый тепловыми и квантовыми флуктуациями. Вносимый примесями беспорядок, наоборот, стабилизирует неколлинеарные состояния [3]. Поэтому можно ожидать, что при некоторых концентрациях примесей фаза «UUD'» будет подавлена при низких температурах, но будет восстанавливаться при нагреве [3, 4].



(a)



(b)

Рис. 1. (a) Схематическое изображение ёмкостного магнитометра поперечной намагниченности. (b) Кривые продольной и поперечной намагниченности АФМ на треугольной решётке, полученные с помощью численной симуляции ($\varphi = 5^\circ$, $J = 1$, $D = 0.3$, $\alpha = 0.07$)

Для исследования магнитной фазовой диаграммы соединения $\text{Rb}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}(\text{MoO}_4)_2$ при $T = 0.4 \dots 5$ К и $B = 0 \dots 10$ Тл использовались измерения поперечной намагниченности (M_{\perp}), использовались образцы из работы [4]. Образец, на который в магнитном поле действовал момент сил ($\vec{\tau} = \vec{M}_{\perp} \times \vec{H}$), прикреплялся к упругому лепестку (рис. 1,а), отклонение которого от положения равновесия детектировалось посредством измерения электрической ёмкости.

Для моделирования величины M_{\perp} рассмотрена трёхподрешёточная модель на треугольной решётке с энергией вида

$$E = \frac{J}{2} (\vec{S}_1 \vec{S}_2 + \vec{S}_2 \vec{S}_3 + \vec{S}_3 \vec{S}_1) - \vec{M} \vec{H} + DS_z^2 - \alpha \left((\vec{S}_1 \vec{S}_2)^2 + (\vec{S}_2 \vec{S}_3)^2 + (\vec{S}_3 \vec{S}_1)^2 \right),$$

где последнее слагаемое учитывает эффект флуктуаций [3]. Моделирование (рис. 1,б) показало, что M_{\perp} возникает при небольшом отклонении направления магнитного поля от лёгкой плоскости (φ), и что границам фазы «плато намагниченности» соответствуют характерные изломы кривой $M_{\perp}(H)$.

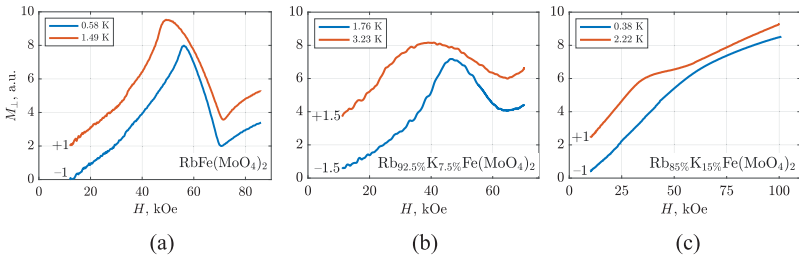


Рис. 2. Кривые отклика магнитометра поперечной намагниченности (сигнал пропорционален M_{\perp}) для образцов с $x = 0, 7.5 \%, 15 \%$. Кривые сдвинуты для наглядности как указано на рисунке

Обнаружены характерные изменения отклика магнитометра при переходе в «UUD» фазу (рис. 2). В чистом ($x = 0$) соединении чёткие изломы кривой отклика наблюдаются вплоть до самой низкой температуры 400 мК. Положения изломов хорошо согласуются с известными границами магнитных фаз [1, 2]. В образцах с примесью наблюдаются анало-

гичные особенности, но фазовые переходы оказываются несколько размыты (рис. 2, b, c). В образце с $x = 7.5\%$ область существования фазы «плато намагниченности» сжимается, что согласуется с результатами работы [4]. В образце с $x = 15\%$ кривая отклика демонстрирует два излома при температурах 2...3 К, указывая на сохранение «UUD» фазы. Однако ниже примерно 1.5 К на кривой отклика остаётся единственный излом, что соответствует исчезновению фазы «плато намагниченности». Таким образом удаётся проследить изменение фазовой диаграммы при введении примеси и подтвердить предсказание теории [3].

Работа была поддержана грантом РФФ 22-12-00259 (эксперимент) и грантом Научного фонда НИУ ВШЭ 24-00-011 (обработка данных).

Список литературы

- [1] White J. S. et al. *Phys. Rev. B* 88 (2013), 060409.
- [2] Smirnov A. I. et al. *Phys. Rev. B* 75 (2007), 134412.
- [3] Maryasin V. and Zhitomirsky M. E. *Phys. Rev. Lett.* 111 (2013), 247201.
- [4] Smirnov A. I. et al. *Phys. Rev. Lett.* 119 (2017), 047204.

Конкуренция орбитальных, зарядовых, спиновых и решеточных степеней свободы в ян-теллеровских магнетиках $RNiO_3$

А. С. Москвин^{1,2,*}

¹Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

²Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: alexander.moskvin@urfu.ru

К ян-теллеровским (ЯТ) магнетикам относятся соединения на основе ян-теллеровских 3d- и 4d-ионов с конфигурациями типа $t_{2g}^{n_1} e_g^{n_2}$ в высокосимметричном октаэдрическом, кубическом или тетраэдрическом окружении и с основным орбитальным E -дублетом [1, 2, 3]. Это соединения на основе тетра-комплексов с конфигурацией d^1 (Ti^{3+} ,

V^{4+} , Cr^{5+}), низкоспиновой (LS) конфигурацией d^3 (V^{2+} , Cr^{3+} , Mn^{4+}), высокоспиновой (HS) конфигурацией d^6 (Fe^{2+} , Co^{3+}), окта-комплексы с HS-конфигурацией d^4 (Cr^{2+} , Mn^{3+} , Fe^{4+} , Ru^{4+}), LS-конфигурацией d^7 (Co^{2+} , Ni^{3+} , Pd^{3+}), а также окта-комплексы с конфигурацией d^9 (Cu^{2+} , Ni^{1+} , Pd^{1+} , Ag^{2+}) [2,3]. Все ЯТ- конфигурации d -ионов включают один e_g -электрон или одну e_g -дырку сверх устойчивых, полностью или наполовину заполненных, оболочек аналогично. конфигурации многочисленного семейства ионов с одним ns -электроном сверх заполненных оболочек, например $6s$ -электроном в Hg^+ , Tl^{2+} , Pb^{3+} , Bi^{4+} , неустойчивых относительно реакции диспропорционирования [4]. В отличие от ионов с ns -электронами для ЯТ-ионов мы имеем дело с орбитальным вырождением для e_g -электронов/дырок, а значит, возможностью конкуренцией между эффектом Яна-Теллера, приводящим к орбитальному упорядочению [1], и эффектом анти-ЯТ-диспропорционирования, приводящим к формированию системы электронных и дырочных центров S -типа с орбитально невырожденным основным состоянием [2,3], эквивалентной системе эффективных композитных спин-синглетных или спин-триплетных бозонов в немагнитной, или магнитной решетке. В класс ЯТ-магнетиков попадает большое число перспективных материалов с конкуренцией орбитальных, спиновых и зарядовых степеней свободы, находящихся в центре внимания современной физики конденсированного состояния, таких как манганиты $RMnO_3$, ферраты $(Ca,Sr)FeO_3$, рутенаты RuO_2 , $(Ca,Sr)RuO_3$, $(Ca,Sr)_2RuO_4$, широкий ряд ферропниктидов ($FePn$) и феррохалькогенидов ($FeCh$), 3D-никелаты $RNiO_3$, 3D-купрат $KCuF_3$, 2D-купраты (La_2CuO_4, \dots) и никелаты $RNiO_2$, соединения на основе серебра (AgO , AgF_2), рутено-купраты $RuSr_2GdCu_2O_8\dots$ [2]. Эти материалы обладают богатым спектром уникальных свойств от различных типов орбитального [1], спинового, зарядового, а также спин-зарядового упорядочения, необычного металлического поведения ("strange, bad metal"), до переходов металл-изолятор и «экзотической» спин-триплетной сверхпроводимости [2, 3].

В данной работе для описания электронной структуры и фазовых диаграмм ЯТ-магнетика типа $RNiO_3$ предложена обобщенная модель эффективных зарядовых триплетов, которая предполагает рассмотрение некоторой высокосимметричной «прародительской» конфигурации с иде-

альными октаэдрами NiO_6 , низкоэнергетическое состояние которой формируется зарядовым триплетом $[\text{NiO}_6]^{10-,9-,8-}$ (номинально $\text{Ni}^{2+,3+,4+}$) с различными спиновыми и орбитальными основными состояниями. Три зарядовых состояния кластера NiO_6 мы связываем с тремя проекциями псевдоспина $\Sigma = 1$ и используем известные соотношения спиновой алгебры для описания зарядовой степени свободы. Прежде всего отметим, что формально локальный псевдоспин $\Sigma = 1$ предполагает наличие восьми (три «дипольных» и пять «квадрупольных») независимых операторов и соответствующих локальных параметров зарядового порядка (в неприводимых компонентах): $\hat{\Sigma}_0 = \hat{\Sigma}_z$; $\hat{\Sigma}_\pm = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\Sigma}_x \pm i\hat{\Sigma}_y)$; $\hat{\Sigma}_z^2$; $\hat{\Sigma}_\pm^2$; $\hat{T}_\pm = \frac{1}{2}\{\hat{\Sigma}_z, \hat{\Sigma}_\pm\}$. Операторы $\hat{P}_0 = (1 - \hat{\Sigma}_z^2)$; $\hat{P}_\pm = \frac{1}{2}\hat{\Sigma}_z(1 \pm \hat{\Sigma}_z)$ фактически являются операторами проектирования на зарядовые состояния с проекцией псевдоспина $M = 0, \pm 1$ соответственно, а средние $\langle \hat{P}_0 \rangle$, $\langle \hat{P}_\pm \rangle$ фактически представляют собой локальные плотности соответствующих зарядовых состояний. Операторы $\hat{\Sigma}_\pm$ и \hat{T}_\pm изменяют проекцию псевдоспина на ± 1 . Оператор $\hat{\Sigma}_\pm^2$ изменяет проекцию псевдоспина на ± 2 , так что его можно рассматривать как оператор рождения/уничтожения композитного бозона. Соответствующие локальные средние $\langle \hat{\Sigma}_\pm \rangle$, $\langle \hat{T}_\pm \rangle$, $\langle \hat{\Sigma}_\pm^2 \rangle$ будут описывать различные варианты «недиагонального» зарядового порядка, в частности, когерентное металлическое и сверхпроводящее состояния.

С учетом спиновых и орбитальных состояний для зарядовых компонент мы должны расширить локальное гильбертово пространство до «псевдоспин-орбитально-спинового октета» $|1M; \Gamma\mu; S_m\rangle$ ($|10; E_g\mu; \frac{1}{2}v\rangle; |1-1; A_{1g}0; 1m\rangle; |1+1; A_{1g}0; 00\rangle$), где $\mu = 0; 2, v = \pm \frac{1}{2}, m = 0; \pm 1$ ($|E_g 0\rangle \propto d_{z^2}, |E_g 2\rangle \propto d_{x^2-y^2}$) и рассматривать ЯТ-магнетик в общем случае как систему таких «октетов». Такой подход позволит в наиболее общем виде учесть эффекты конкуренции различных степеней свободы. В простейшем «атомном» пределе мы пренебрегаем эффектами одно- и двухчастичного переноса заряда, так что эффективный гамильтониан ЯТ-магнетика примет вид $\hat{H}_{at} = \hat{H}_{ch} + \hat{H}_{el-lat} + H_{lat} + \hat{H}_{spin}^{eff}$, где $\hat{H}_{ch} = \Delta \sum_i \hat{\Sigma}_{iz}^2 + \sum_{i>j} V_{ij} \hat{\Sigma}_{iz} \hat{\Sigma}_{jz} - \mu \sum_i \hat{\Sigma}_{iz}$ – эффективный гамильтониан зарядовых взаимодействий (локальные и

нелокальные корреляции), μ – химический потенциал, определяемый из условия постоянства величины $\sum_i \langle \hat{\Sigma}_{iz} \rangle$. Величина и знак параметра $\Delta = \frac{1}{2}U$, где U – эффективный параметр локальных корреляций, имеют принципиальное значение для ЯТ-магнетика. Большие положительные значения U делают диспропорционирование энергетически невыгодным и стабилизируют ЯТ-центр, приводя к локальному/кооперативному ЯТ упорядочению с орбитальным порядком (ОО) и, как правило, к состоянию магнитного изолятора. Большие отрицательные значения U (negative- U model) делают анти-ЯТ-диспропорционирование энергетически выгодным, приводя к формированию системы электронных и дырочных центров с широким набором возможных фазовых состояний. Эффективный гамильтониан линейного электрон-решеточного взаимодействия включает два принципиально важных вклада для зарядовых состояний с проекцией псевдоспина $M = 0$, то есть для ЯТ-центра, и $M = \pm 1$, то есть для электронного/дырочного центров соответственно $H_{el-lat} = V_E \sum_i \hat{P}_0 (\hat{v}_i^E \cdot Q_i^E) \hat{P}_0 + a \sum_i (\hat{\Sigma}_{iz}^2 + \lambda \hat{\Sigma}_{iz}) Q_i^{A1g}$, где первое слагаемое – вклад ЯТ-взаимодействия с локальной модой смещений Q^E ($Q^{E0} \propto d_{z^2}, Q^{E2} \propto d_{x^2-y^2}$), V_E – константа ЯТ-взаимодействия, а матрицы $\hat{v}^{E0}, \hat{v}^{E2}$ на базе состояний $|E_g 0\rangle$ и $|E_g 2\rangle$ совпадают с матрицами Паули $\hat{\sigma}_z$ и $\hat{\sigma}_x$ соответственно [1]. Второе слагаемое — взаимодействие с локальной полносимметричной (breathing) модой смещений для зарядовых состояний с проекцией псевдоспина $M = \pm 1$, a и λ — константы электрон-решеточного взаимодействия. Эффективный спин-гамильтониан RNiO_3 можно представить как $\hat{H}_{spin}^{eff} = \hat{P}_{-1} \hat{H}_{spin} \hat{P}_{-1}$, где \hat{P}_{-1} — соответствующий оператор проектирования, а спин-гамильтониан

$$\hat{H}_{spin} = \sum_{i>j} J_{ij} (\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j) + \sum_{i>j} j_{ij} (\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j)^2 + \sum_{i>j} \mathbf{d}_{ij} [\hat{\mathbf{S}}_i \times \hat{\mathbf{S}}_j] + \hat{V}_{an}$$

включает билинейный и биквадратичный изотропный обмен, взаимодействие Дзюлошинского–Мория и симметричную спиновую анизотропию.

Работа выполнена при поддержке проекта FEUZ-2023-0017 Министерства Образования и Науки Российской Федерации.

Список литературы

- [1] Кугель К. И., Хомский Д. И., *УФН*, 1982. V. 136. P. 621–664.
- [2] Moskvina A. S., *J. Phys.: Condens. Matter.*, 2013. V. 25. P. 085601.
- [3] Moskvina A. S., *Magnetochemistry*, 2023. V. 9. P. 224–248.
- [4] Katayama-Yoshida H. et al., *Appl. Phys. Express*, 2008. V. 1. 081703.

Электронные корреляции и собственный магнетизм межузельных электронных состояний в электриде Li_8Au

Д. Ю. Новосёлов^{1,2}, Д. М. Коротин^{1,2}, А. О. Шорилов^{1,2}, А. Р. Оганов²

¹*Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН,
г. Екатеринбург, Россия*

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

Недавно открытый новый класс материалов, называемых электридами, представляет собой системы, в которых часть электронов полностью отделена от исходных атомов и локализована в кристаллических пустотах [1, 2, 3, 4, 5]. Мы исследуем корреляционную природу и возможные магнитные свойства электронной подсистемы недавно предсказанного электрида Li_8Au [6]. Описывая междузельные электронные состояния с помощью максимально-локализованных функций Ванье (MLWF)[7] (см. рис. 1), мы обнаружили, что эти состояния частично заполнены и имеют заселённость $1,5e^-$, а также крайне слабо гибридизуются с состояниями р-Au, образуя почти полностью изолированную электронную подсистему.

Используя метод Constrained Random-Phase Approximation (CRPA) [8, 9], мы рассчитали значение усреднённого параметра Хаббарда U для квазиатомных междузельных электронных состояний и получили величину равную 2 эВ, сопоставимую с шириной электридной зоны, что указывает на возможное присутствие электронных корреляций [10, 11, 12]. Далее, используя подход теории динамического среднего поля (DMFT) [13], мы установили, что электридные состояния в Li_8Au проявляют устойчивую тенденцию к спиновой поляризации и ведут себя как магнит-

ные центры, обладая собственным магнитным моментом в 0,5 магнетона Бора на каждый квазиатом. Таким образом, электридная подсистема Li_8Au представляет собой уникальный пример коррелированной электронной фазы с внутренним магнетизмом, слабо связанной с остальной электронной системой материала. В целом, наблюдаемые многочастичные эффекты в Li_8Au указывают на важность их учёта при исследовании новых материалов с избыточными электронами, заключёнными в кристаллических полостях.

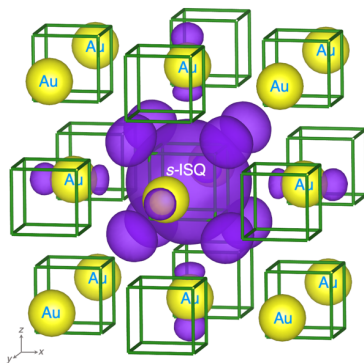


Рис. 1. Кристаллическая структура Li_8Au с изоповерхностью квадрата межзельной MLWFs (в фиолетовом цвете). Жёлтые сферы соответствуют атомам Au, а атомы Li расположены в вершинах кубов, отмеченных зелёными линиями

Авторы работы благодарят за поддержку Российский Научный Фонд (грант РНФ № 19-72-30043).

Список литературы

- [1] Dye J. L., *Accounts of Chemical Research*, 42(10) (2009) 1564–1572.
- [2] Edwards P. P., *Science*, 333 (2011) 49–50.
- [3] Liu C. et al., *Journal of Materials Chemistry C*, 8(31) (2020) 10551–10567.
- [4] Novoselov D. Y. et al., *Physical Chemistry Chemical Physics*, 25 (2023) 30960–30965.
- [5] Novoselov D. Y. et al., *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 13 (2022) 7155–7160.
- [6] Zhang X. et al., *Physical Review B*, 107 (2023) L100501.

- [7] Mostofi A. A. et al., *Comput. Phys. Commun.*, 185 (2014) 2309–2310.
[8] Springer M. and Aryasetiawan F., *Physical Review B*, 57 (1998) 4364–4368.
[9] Kotani T., *Journal of Physics: Condensed Matter*, 12 (2000) 2413–2422.
[10] Novoselov D. Y. et al., *Journal of Physics: Condensed Matter*, 32 (2020) 445501.
[11] Novoselov D. Y. et al., *Physical Review B*, 103 (2021) 235126.
[12] Novoselov D. Y. et al., *The Journal of Physical Chemistry C* 125 (2021) 15724–15729.
[13] Held K. et al., *Phys. Status Solidi B* 243 (2006) 2599–2631.

Магнитное состояние слоистых халькогенидов $(V,Co)_7X_8$ ($X = Se, Te$)

В. В. Оглобличев^{1*}, А. Ф. Садыков¹, Ю. В. Пискунов¹, А. Г. Смольников¹,
М. Е. Кашникова¹, Н. А. Уткин¹, Д. Ф. Акрамов^{1,2}

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

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

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

Халькогениды переходных металлов со слоистой структурой типа NiAs, такие как соединения M_7X_8 , где M — это атомы переходных металлов, а X — двухвалентные анионы VI группы таблицы Менделеева S, Se, Te, относятся к классам катион-дефицитных слоистых соединений и системам с сильными электронными корреляциями. Для этих соединений характерно наличие вакансий в металлических слоях, а также образование разных сверхструктур в результате упорядочения вакансий и M атомов в слоях. Хорошо известным представителем этого класса соединений является железосодержащий минерал — пирротин Fe_7S_8 [1].

В данной работе было выполнено исследование структурных и магнитных свойств соединений Co_7Te_8 , Co_7Se_8 , V_7Se_8 посредством рентгенографии, измерения объемной магнитной восприимчивости и использования ядерного магнитного резонанса на ядрах ^{59}Co и ^{51}V . Рентгенографи-

ческая аттестация полученных образцов проводилась на дифрактометре Bruker D8 ADVANCE с $\text{CuK}\alpha$ излучением. Температурные зависимости магнитной восприимчивости образцов измерялись на установке PPMS DynaCool (Quantum Design, USA) в температурном интервале 2–300 К в магнитных полях до 90 кЭ. ЯМР измерения были выполнены на импульсном спектрометре ЯМР в диапазоне температур $10 \leq T \leq 400$ К во внешнем магнитном поле $H_0 = 92.8$ кЭ.

В результате выполнен сравнительный анализ данных, полученных для соединений Co_7Te_8 , Co_7Se_8 , V_7Se_8 . Анализ спектров ЯМР на ядрах ^{51}V и ^{59}Co позволил оценить и определить значения компонент тензоров магнитного сдвига и градиента электрического поля в месте расположения этих ядер, а также выявил существенную локальную неоднородность, как зарядовую, так и магнитную, указанных соединений. Из температурных зависимостей сдвига и восприимчивости в Co_7Te_8 сделана оценка константы сверхтонкого взаимодействия в ионах кобальта. Выяснено, что в теллуридном соединении отсутствует упорядоченность вакансий и атомов кобальта в катионных слоях, а структура Co_7Te_8 является более плоской и характеризуется существенно меньшим значением отношения параметров решетки c_0/a_0 , чем в Co_7Se_8 [2]. Это различие, по видимому, является следствием большей поляризуемости ионов теллура и более высокой степени ковалентности связей Co-Te по сравнению со связями Co-Se . В результате того, что увеличение межатомных расстояний при переходе от Co_7Se_8 к Co_7Te_8 происходит преимущественно в плоскости, это не привело к большей локализации 3d электронов и появлению магнитных моментов на атомах кобальта, как можно было ожидать. Соединение Co_7Te_8 оказалось даже ближе к классическим парамагнетикам Паули, чем Co_7Se_8 . Показано, что причиной немонотонного изменения с температурой магнитной восприимчивости и скорости спинрешеточной релаксации в соединении Co_7Se_8 могут являться сильные электрон-электронные корреляции. Из температурных зависимостей магнитной восприимчивости и сдвига линии ЯМР на ядрах ^{51}V установлено, что соединение V_7Se_8 , как и халькогениды Co_7Se_8 и Co_7Te_8 , является парамагнетиком Паули.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-12-00220).

Список литературы

- [1] Wang H., Salveson I., *Phase Transition* **78**, 547 (2005).
[2] Пискунов Ю. В., Оглобличев В. В., Садыков А. Ф., Акрамов Д. Ф., Смольников А. Г., Герашенко А. П., Селезнева Н. В., Баранов Н. В., *Письма в ЖЭТФ* **117**, 57 (2023).

Магнитный порядок в монокристе урана по данным ЯМР

В. В. Оглобличев*, Ю. В. Пискунов

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

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

Магнитные материалы на базе актинидов представляют особый интерес для фундаментальной науки в связи с широким многообразием экзотических свойств и явлений, наблюдаемых в данных объектах. Механизмы взаимосвязи между магнитными и электронными свойствами подобных систем до сих пор остаются предметом горячих дискуссий в литературе. Эта проблема особо актуальна для систем на основе урана, где 5f-электронная оболочка может демонстрировать локализованный либо коллективизированный характер. В данной работе методами ядерного магнитного резонанса (ЯМР) на ядрах азота (^{14}N) и магнитной восприимчивости исследован магнитный порядок и спиновая динамика 5f-электронов монокристалла монокристе урана (UN). ЯМР измерения были выполнены на импульсном спектрометре в диапазоне температур $10 \leq T \leq 760$ К во внешнем магнитном поле $B_0 = 9,28$ Тл.

В парамагнитной области показано, что все узлы азота эквивалентны в кристаллическом и магнитном отношении, и их зарядовое окружение имеет кубическую симметрию. Сдвиг линии ЯМР на ядре ^{14}N , также как и полная магнитная восприимчивость $\chi(T)$, следует закону Кюри-Вейсса вплоть до температуры 760 К. В результате анализа данных К(T) и $\chi(T)$ показано, что основным вкладом в сдвиг линии ЯМР азота и пол-

ную магнитную восприимчивость является спиновый магнетизм 5f-электронов урана.

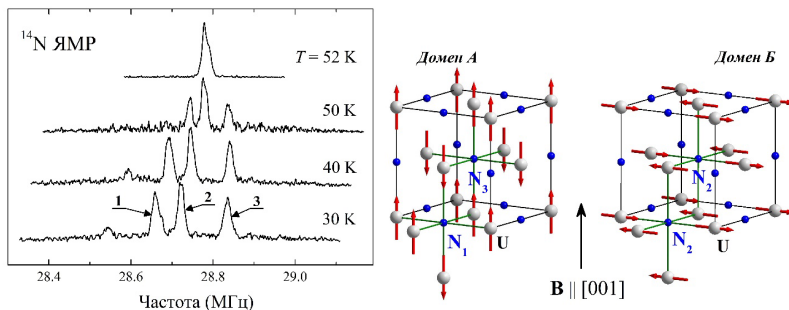


Рис. 1. Слева — спектры ЯМР на ядре ^{14}N . Справа — магнитная структура и варианты доменов

В магнитоупорядоченной фазе спектр ЯМР на ядре ^{14}N состоит из трех хорошо разрешенных линий 1, 2, 3 при $\mathbf{B} \parallel [001]$ (рис. 1). Каждая из линий соответствует магнитно-неэквивалентным ионам азота в структуре (позиции N_1 , N_2 , N_3). Положение и количество линий в спектре ЯМР зависят от ориентации монокристалла относительно внешнего магнитного поля \mathbf{B} . Полученные результаты объяснены в модели антиферромагнитного упорядочения типа I , соответствующего $1k$ -структуре и при наличии магнитных доменов (*Домен А* и *Домен В*). Из анализа интенсивности линий ЯМР установлено, что в магнитном поле 9,28 Тл доменов, в которых магнитные моменты ионов урана ориентированы вдоль магнитного поля (*домен А*), в 1,6 раза больше, чем доменов, в которых магнитные моменты ионов урана ориентированы перпендикулярно магнитному полю (*Домен В*).

Скорость спин-решеточной релаксации T_1^{-1} ядер ^{14}N не описывается моделями ни полностью локализованных, ни делокализованных состояний электронов 5f-оболочки урана. Показано, то в парамагнитной области зависимость энергии спиновых флуктуация $\Gamma_{\text{ЯМР}}(T)$ близка к зависимости $\Gamma(T) \propto T^{0.5}$, характерной для концентрированных систем Кондо выше температуры формирования когерентного состояния.

Скорость спин-решеточной релаксации $T_1^{-1}(T)$ ядер ^{14}N в монокристалле UN при температурах ниже $T_N/2$ следует закону Корринги $T_1^{-1}(T) \propto T$. Это является однозначным свидетельством формирования ферми-жидкостного состояния в UN при низких температурах. Природа этого ферми-жидкого состояния требует дальнейшего изучения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-72-10022).

Список литературы

- [1] Оглобличев В. В., Потапов А. М., Верховский С. В., Мирмельштейн А. В., *Письма в ЖЭТФ* **108**, 650 (2018).
- [2] Ogloblichev V. V., Verkhovskii S. V., Mirmelstein A. V., Piskunov Y. V., Germov A. Y., Potapov A. M., Gubkin A. F., Andreev A. V., *Physical Review B* **104**, 155148 (2021).

Влияние высокого давления на кристаллическую структуру наноструктурированных ферритов CoFe_2O_4 и $\text{Zn}_{0.34}\text{Fe}_{2.53}\text{[O]}_{0.13}\text{O}_4$

А. В. Руткаускас^{1*}, Н. М. Белозерова^{1,2}, О. Н. Лис^{1,3},
Е. В. Лукин¹, А. Л. Желудкевич⁴

¹Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия

²Московский физико-технический, Центр фотоники и двумерных материалов, г. Долгопрудный, Россия

³Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань, Россия

⁴Государственное научно-производственное объединение «Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению», г. Минск, Беларусь

*E-mail: ranton@nfjnr.ru

Объемные и наноструктурированные ферриты с кристаллической структурой типа шпинели (AFe_2O_4) активно изучаются на протяжении многих десятилетий ввиду их привлекательности как с фундаментальной, так и с практической точек зрения. Такие соединения обладают ши-

роким спектром физических явлений: высокое удельное электрическое сопротивление, низкие электрические потери, высокая химическая стабильность, магнитные фазовые переходы различного типа, эффекты геометрической фрустрации и многое другое. Это делает возможным широкого технологического применения ферритов в качестве материалов для трансформаторов, солнечных элементов, биомедицине, магнитных сенсорах, катализаторах, системах доставки лекарств, электронных и магнитных компонентах.

В зависимости от химического состава и размеров наночастиц ферриты со структурой шпинели обладают разным распределением катионов в тетраэдрической (А) и октаэдрической (В) координации кислорода. В частности, может быть реализован случай, когда ионы Fe^{3+} находятся в позициях А, а также имеется смесь ионов Fe^{3+} и Fe^{2+} , расположенных в позициях В. При легировании переходными металлами или щелочными элементами в позициях А или В или создании вакансий в структуре кубической шпинели, магнитные взаимодействия между ионами железа изменяются. Это приводит к существенным изменениям физических свойств этих ферритов. Следует отметить, что изменения физических свойств материала можно добиться применением высокого давления. Давление вызывает контролируемую настройку межатомных расстояний и валентных углов, что приводит к изменениям физических свойств оксидов феррита.

В настоящей работе представлены исследования наноструктурированных ферритов CoFe_2O_4 и $\text{Zn}_{0,34}\text{Fe}_{2,53}[\]_{0,13}\text{O}_4$ (где [] — вакансия) методами рентгеновской дифракции и рамановской спектроскопии в широком диапазоне давлений до ~ 36 ГПа. В оксиде CoFe_2O_4 при давлении выше 25 ГПа обнаружен фазовый переход из кубической фазы с пространственной группой $\text{Fd}\bar{3}\text{m}$ в орторомбическую структуру Bbmm . В феррите $\text{Zn}_{0,34}\text{Fe}_{2,53}[\]_{0,13}\text{O}_4$ также обнаружен подобный переход при давлении выше 18 ГПа. В обоих соединениях фазовый переход сопровождается изменением параметров решетки, объема элементарной ячейки, длин межатомных связей и частот мод колебаний.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 24-42-10003 (Белорусский фонд фундаментальных исследований, проект № T23РНФМ-023).

Необычный магнетизм в редкоземельных соединениях с сильными электронными корреляциями

П. С. Савченков*, П. А. Алексеев

НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия

*E-mail: savch92@gmail.com

Для редкоземельных соединений характерно наличие дальнего магнитного порядка, обусловленного взаимодействием периодически расположенных в кристаллической решетке локальных магнитных моментов редкоземельных ионов, обусловленных f-электронами. В докладе рассматриваются возможности формирования упорядоченного состояния в тех случаях, когда не приходится говорить о локальном моменте f-оболочки в таком традиционном смысле.

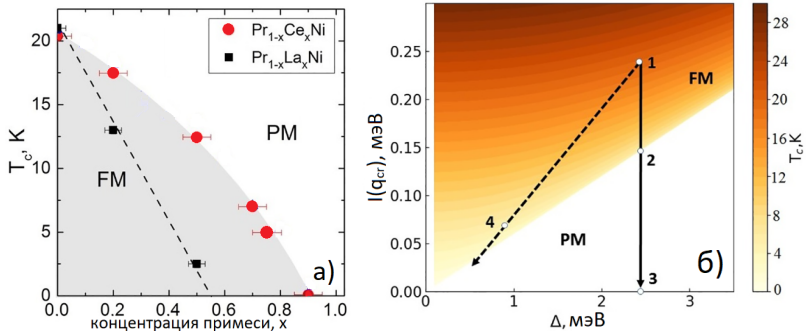


Рис. 1. а) Зависимость температуры магнитного упорядочения (T_c) от концентрации примеси x в системах $\text{Pr}_{1-x}\text{La}_x\text{Ni}$ (черные квадраты) и $\text{Pr}_{1-x}\text{Ce}_x\text{Ni}$ (красные кружки) [1]. Серым цветом обозначена область ферромагнитного состояния системы $\text{Pr}_{1-x}\text{Ce}_x\text{Ni}$, которая значительно больше, чем в случае $\text{Pr}_{1-x}\text{La}_x\text{Ni}$. б) Диаграмма магнитных состояний систем на основе PrNi [1]. Представлена взаимосвязь между T_c , параметром обменного взаимодействия $J(q)$ и величиной расщепления в кристаллическом поле (Δ). Сплошной линией отмечено изменение T_c с увеличением концентрации La в $\text{Pr}_{1-x}\text{La}_x\text{Ni}$, пунктирной — изменение T_c с увеличением концентрации Ce в $\text{Pr}_{1-x}\text{Ce}_x\text{Ni}$. Точки соответствуют соединениям: 1. PrNi , 2. $\text{Pr}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{Ni}$, 3. LaNi , 4. $\text{Pr}_{0.25}\text{Ce}_{0.75}\text{Ni}$

Подобный случай реализуется в системах с синглетным основным состоянием редкоземельного иона. В таких системах при определённом соотношении между дипольным матричным элементом, связывающим синглет с вышележащим состоянием, и величиной межионного взаимодействия на каждом узле кристаллической решётки может сформироваться наведённый магнитный момент и произойти одновременное упорядочение таких моментов. Подобное явление, называемое «наведённым» магнетизмом, рассмотрено в работе на примере интерметаллида PrNi. Приводятся некоторые результаты экспериментальных исследований наведённого магнетизма в PrNi и систем на его основе. Прежде всего, анализируется информация, которая может быть извлечена из спектров магнитного неупругого рассеяния нейтронов, обсуждаются развитые теоретические и модельные представления.

Особое внимание уделено объяснению влияния дефектов различной природы в редкоземельной подрешетке (немагнитная примесь La–Pr_{1-x}La_xNi и промежуточно-валентная (ПВ) Ce–Pr_{1-x}Ce_xNi) на условия возникновения дальнего магнитного порядка (см. рис. 1).

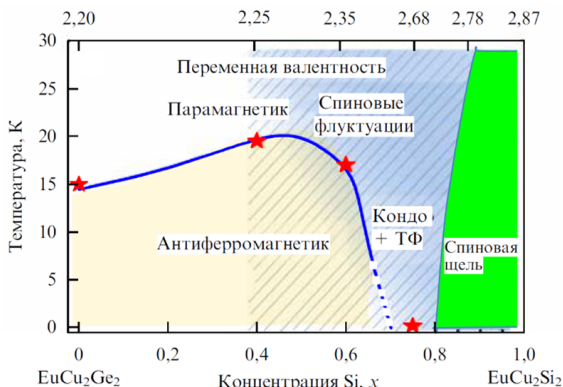


Рис.2. Магнитная фазовая диаграмма $\text{EuCu}_2(\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x})_2$. Звезды соответствуют значения T_N , полученным из экспериментов по дифракции нейтронов, сплошная линия, соответствует фазовой границе между АФМ и парамагнитным состоянием. Область синего цвета соответствует спин-флуктуационному режиму, область зеленого цвета — режиму спиновой щели. Штриховкой обозначена область с экспериментально обнаруженными спиновыми флуктуациями — наблюдается квазиупругий сигнал в нейтронном спектре. На верхней шкале отмечены значения валентности Eu

Еще одним типом «необычного» магнетизма, рассмотренным в докладе, является наблюдаемое в ряде интерметаллических соединений Eu, на первый взгляд, аномальное сосуществование магнитного порядка и быстрых спиновых флуктуаций, обусловленных промежуточно-валентным состоянием редкоземельного иона (см. рис. 2). Представлены результаты экспериментов по изучению влияния высоких гидростатические давлений (до 15 ГПа) на дальний магнитный порядок в EuCu_2Si_2 и приводятся свидетельства однородности промежуточновалентного состояния Eu в $\text{EuCu}_2(\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x})_2$ [1, 2]. Опираясь на комплексный анализ результатов совокупности нейтронных экспериментов [1, 2] и расчёты в рамках теории наведённого магнетизма, для $\text{EuCu}_2(\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x})_2$ впервые предлагается реалистичное описание механизмов формирования упорядоченного антиферромагнитного состояния на фоне однородной промежуточной валентности.

Список литературы

- [1] Savchenkov P. S., Alekseev P. A. (2023). Uncommon Magnetism in Rare-Earth Intermetallic Compounds with Strong Electronic Correlations // *Crystals*, 13(8), 1238.
- [2] Savchenkov P. S., Alekseev P. A., Podlesnyak A., Kolesnikov A. I., & Nemkovski K. S. (2018). Intermediate-valence state of the Sm and Eu in SmB_6 and EuCu_2Si_2 : neutron spectroscopy data and analysis // *Journal of Physics: Condensed Matter*, 30(5), 055801.

Магнитные свойства соединений $\text{Bi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0.05, 0.1, 0.3$)

Д. А. Саламатин¹, А. В. Семенов^{1,2}, И. Е. Костылева¹, А. В. Цвященко¹

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

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

В мультиферроике BiFeO_3 антиферромагнитное и ферроэлектрическое упорядочения сосуществуют при комнатной температуре. Благодаря нецентросимметричной кристаллической структуре данного со-

единения 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. Как показали измерения рентгеновской и нейтронных дифракций, комбинационного рассеяния света, сканирующей электронной микроскопии с энергодисперсионным анализом полученные образцы соединений являются однофазным (родительская структура ViFeO_3 для $x = 0.05, 0.1$ и орторомбическая структура для $x = 0.3$) со стехиометрией соответствующей исходному составу [1].

Нами были проведены измерения намагниченностей и магнитных восприимчивостей синтезированных соединений. Из этих измерений были определены значения намагниченностей насыщей (M_s), остаточных намагниченностей (M_r), коэрцитивных сил (H_c) и обменных анизотропий (H_{EB}). Для соединений $\text{Vi}_{0.95}\text{Tb}_{0.05}\text{FeO}_3$ и $\text{Vi}_{0.9}\text{Tb}_{0.1}\text{FeO}_3$, которые должны обладать свойствами магнитоэлектрических мультиферроиков обнаружен рост M_s , M_r и H_c по отношению к родительскому ViFeO_3 и с увеличением x . Это может свидетельствовать о частичном подавлении магнитной циклоиды и образовании слабого ферромагнетизма. $H_{\text{EB}} = 0$ для всех x .

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

Список литературы

- [1] D. A. Salamatina, S.E. Kichanov, I.E. Kostyleva et al. *Appl. Phys. Lett.* **122**, 211905 (2023).

Кроссовер псевдоспиновый парамагнетик – цепочечная спиновая жидкость в фрустрированном антиферромагнетике Cs_2CoCl_4

А. И. Смирнов¹, Т. А. Солдатов¹

¹*Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, г. Москва, Россия*
E-mail: smirnov@kapitza.ras.ru

В кристаллах Cs_2CoCl_4 магнитные ионы Co^{2+} ($S = 3/2$) расположены в слоистой треугольной структуре и связаны антиферромагнитным обменом. Основное обменное взаимодействие действует вдоль оснований треугольников, обмены вдоль боковых сторон равнобедренных треугольников имеют меньшую энергию. Действие боковых обменов испытывает фрустрацию и поэтому сеть обменных взаимодействий в Cs_2CoCl_4 может быть приближенно представлена в виде спиновых цепочек, расположенных вдоль оснований треугольников. Цепочки слабо связаны между собой, как внутри слоев, так и между слоями [1], как в хорошо известном изоморфном соединении Cs_2CuCl_4 [2], демонстрирующем свойства одномерного антиферромагнетика. Сильная одноионная анизотропия с характерной энергией около 7 К отделяет верхний спиновый дублет иона кобальта от нижнего, что позволяет при низких температурах пользоваться представлением псевдоспинов $S=1/2$. В этом представлении естественным образом возникает сильная анизотропия обмена и перенормировка g -фактора [3]. В результате спиновая система может рассматриваться, как состоящая из слабо взаимодействующих сильно анизотропных цепочек спинов $S = 1/2$ (так называемые XXZ цепочки). Эти цепочки обладают рядом примечательных свойств, обусловленных некомутирующим действием поперечного магнитного поля и анизотропии, приводящим к квантовой запутанности состояний, см., например, [1, 4]. В частности, в нулевом поле основным состоянием является квантово-критическая спиновая жидкость, а в умеренных полях цепочки обладают дальним антиферромагнитным порядком с сильно редуцированной упорядоченной компонентой спина. И, наконец, в области полей, предшествующей насыщению, возникает вновь спин-жидкостная фаза с отсутствием дальнего порядка. Кристаллы Cs_2CoCl_4 представляют собой удоб-

ный модельный объект для изучения квантовых фаз XXZ-цепочек и фазовых переходов между ними.

Мы изучили динамику однородных спиновых колебаний Cs_2CoCl_4 при температурах от 0.1 до 7 К методом электронного спинового резонанса (ЭСР) в диапазоне 25–120 ГГц в магнитном поле \mathbf{H} , ориентированном вдоль кристаллографической оси b . Именно эта ориентация соответствует некомутирующим действиям поля и анизотропии. Мы ожидаем, что при температуре выше температуры Нееля $T_N = 0.22$ К [3], но ниже характерной температуры возникновения внутрицепочечных корреляций, свойства образца будут соответствовать некоррелированному ансамблю XXZ цепочек, с сильными внутрицепочечными корреляциями, обусловленными внутрицепочечным обменом псевдоспинов $J \cong 3$ К. Наши результаты показывают, что при температуре от 4 до 7 К на всех частотах нашего диапазона наблюдается ЭСР с g -фактором 3.3. Это значение g -фактора соответствует резонансу одиночных псевдоспинов, в соответствии с теоретической оценкой [3]. Значения резонансных полей для этого типа резонанса будем обозначать H_1 . При понижении температуры на всех частотах появляется вторая резонансная мода в поле $H_2 > H_1$, и этот резонанс в поле H_2 становится доминирующим при температуре 1 К и ниже вплоть до T_N . Здесь большая часть спектрального веса ЭСР соответствует резонансу в поле H_2 , а весь спектр резонансных частот сдвигается вниз относительно парамагнитного резонанса. Описанная температурная эволюция линии ЭСР на частоте 41 ГГц иллюстрируется на рис. 1, а частотно-полевые зависимости наблюдаемых резонансов — на рис. 2. Частоты резонансов в полях H_2 , наблюдаемых в интервале температур 0.3–1 К, хорошо соответствуют теоретической зависимости для наиболее интенсивного (нижнего) максимума спектральной плотности континуума возбуждений $S = 1/2$ XXZ цепочки, полученной численно методом DMRG [4] (сплошная линия на рис. 2). Эта теоретическая зависимость построена с использованием параметров обмена и анизотропии, определенных экспериментально в работе [3] и значения g -фактора 3.3, полученного в наших экспериментах при $T = 4$ К. Таким образом, теоретическая зависимость на рис. 2 не содержит подгоночных параметров.

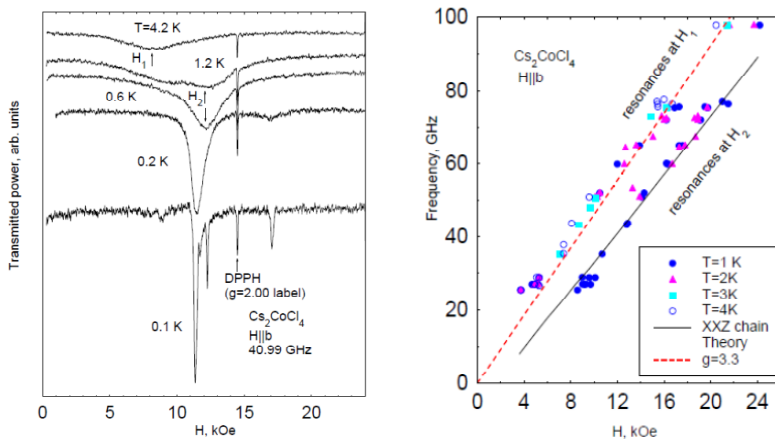


Рис. 1

Отсюда мы можем заключить, что в диапазоне температур 0.3–1 К в спиновой системе Cs_2CoCl_4 реализуются состояния, близкие к основному состоянию XXZ цепочек, а взаимные корреляции соседних цепочек разрушены температурой. Переход от резонанса в поле H_1 к резонансу в поле H_2 происходит путем непрерывного перетекания спектральной плотности от одной фиксированной резонансной частоты к другой, в виде кроссовера, в процессе развития внутрицепочечных корреляций, без критического поведения

При температуре ниже T_N и до самой низкой доступной нам температуры 0.1 К мы наблюдаем еще одну кардинальную смену спектра ЭСР при переходе в антиферромагнитное состояние с дальним порядком, которое устанавливается за счет межцепочечного взаимодействия, о спектре ЭСР этой фазы мы сообщим позже.

Работа поддержана грантом РФФ № 22-12-00259.

Список литературы

- [1] Kenzelmann M. et al., *Phys. Rev. B* **65**, 144432 (2002).
- [2] Coldea R., Tennant D. A., and Tylczynski Z., *Phys. Rev. B* **68**, 134424 (2003).
- [3] Breunig O. et al., *Phys. Rev. Lett.* **111**, 187202 (2013).
- [4] Laurell P., et al., *Phys. Rev. Lett.* **127**, 037201 (2021) and Supplement.

Спиновая динамика ферро-антиферромагнетика на квадратной решетке $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$

Т. А. Солдатов, А. И. Смирнов

Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, г. Москва, Россия
E-mail: tim-sold@yandex.ru

В кристаллах $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$ со слоистой магнитной структурой на квадратной решетке реализуется особый тип фрустрации ферро- и антиферромагнитных обменных связей на сторонах и диагоналях квадратов. Теоретический анализ показывает, что в этих условиях в полях, близких к насыщению, может реализоваться фаза спинового нематика, в которой средний магнитный момент на узле решетки равен нулю, однако существуют корреляции, не нарушающие инвариантность относительно обращения времени [1-3].

Температура Нееля $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$ равна 1.05 К, а спины в основном состоянии упорядочены коллинеарно [4]. Предшествующие эксперименты показывают, что при низких температурах антиферромагнитное упорядочение спинов исчезает в поле $H_{c1} = 4$ Т, однако насыщение магнитного момента происходит в поле $H_{sat} = 6.5$ Т. Причем в поле H_{c1} момент достигает 98 % от полного насыщения. В диапазоне полей от H_{c1} до H_{sat} предполагается формирование спин-нематического состояния [4].

В нашей работе мы изучили спектры магнитного резонанса в $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$ в диапазоне частот 0.5–100 ГГц при температурах от 0.45 К до 2 К, включая область полей от H_{c1} до H_{sat} . Спектр антиферромагнитного резонанса 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. Примечательным в нашем исследовании [5] является обнаружение в специальном эксперименте на низкой частоте 2 ГГц и с продольной поляризацией микроволнового поля спин-флип моды, которая демонстрирует полное смягчение в поле $H_{c1} = 4$ Т, а не в поле насыщения $H_{sat} = 6.5$ Т. Этот результат показывает, что магнитное упорядочение, в том числе и нематического типа, в интервале полей между H_{c1} и H_{sat} отсутствует, а неполное насыщение связано, по-видимому, с небольшим количеством дефектов. Не-

давние эксперименты по ЯМР [6] подтверждают отсутствие нематической фазы в сильных полях, полагая, что слабая остаточная полевая зависимость намагниченности выше поля $H_{c1} = 4$ Т скорее всего связана с наличием слабого взаимодействия Дзялошинского–Мория.

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

Список литературы

- [1] A. F. Andreev, I. A. Grishchuk, Sov. Phys. JETP 60, 267 (1984).
- [2] M. E. Zhitomirsky, H. Tsunetsugu, Europhys. Lett. **92**, 37001 (2010).
- [3] Sh. Jiang et al, Phys. Rev. Lett. **130**, 116701 (2023).
- [4] K. Yu. Povarov et al, Phys. Rev. B **99**, 024413 (2019).
- [5] T. A. Soldatov, A. I. Smirnov, Phys. Rev. B **107**, 174423 (2023).
- [6] K. M. Ranjith et al, arXiv:2401.05269 (2024).

Spin-fluctuation heat capacity at magnetic phase transition in the Co,Fe doped MnSi

S. M. Stishov^{1*}, A. E. Petrova¹, A. M. Belemuk²

¹*P. N. Lebedev Physical Institute, Moscow, Russia*

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

E-mail: stishovsm@lebedev.ru

In the course of recent study [1] an unexpected scaling behavior of heat capacity was seen (Figs. 1, 2), which served as a motivation for the current investigation. As is seen in Fig. 1 doping of MnSi with Co and Fe smears out the sharp phase transition (see the inset 5 in Fig. 1) and makes it difficult to determine the transition area. A subtraction from the heat capacity curves at zero magnetic field the corresponding curves at 9 T as is shown in Fig. 2 helps to see clearly the transition and at the same time reveals the mentioned scaling behavior of heat capacity. Note that this manipulation implies a subtraction of some background contributions, including phonon and electron ones to the heat capacity leaving the spin fluctuation part intact. A preliminary analysis has shown that physical properties of the Fe doped sample (Mn_{0.83}Fe_{0.17})Si generally

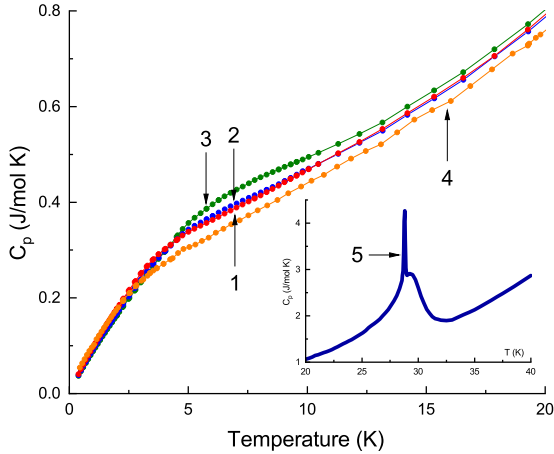


Fig. 1. Heat capacity of $Mn_{1-x}(Co,Fe)_xSi$ in the transition region from helical to paramagnetic structure. T (1–4: $x = 0.057$ (Co), 0.063(Co), 0.09(Co), 0.17 (Fe), 5 — MnSi). After [1–4]

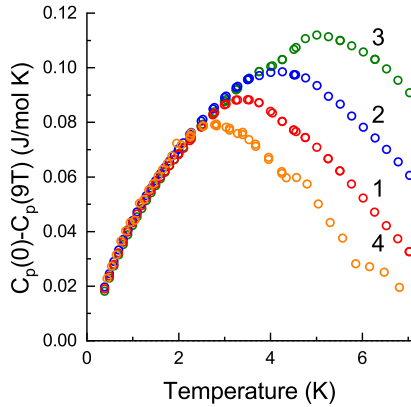


Fig. 2. Difference between heat capacity at zero magnetic field $C_p(0)$ and heat capacity at 9 T ($C_p(9T)$) for (Mn,Co)Si samples and the sample of (Mn,Fe)Si, revealing strange scaling behavior at low temperatures. As seen the Co and Fe doping destroys the first-order phase transition peak, spreads out fluctuation maxima, and shifts maxima to lower temperatures (1–4: $x = 0.057$ (Co), 0.063(Co), 0.09(Co), 0.17 (Fe)). After [1–3]

agree with a corresponding concentration dependence of properties of Co doped samples (see for instance Fig. 3). Having tried to understand the scaling data the classical Monte Carlo (MC) calculations were made to describe the behavior of heat capacity of a spin system $S_{1-x}I_x$, where S — regular spin, I — impurity spin. We use an approach involving localized spins coupled by the exchange and Dzyloshinski – Moriya (DM) spin-spin interactions[5–7]. Upon doping a regular spin is replaced by an effective impurity spin which is supposed to be a classical spin of unit length similar to the regular one. The impurity spins are coupled with neighboring regular spins by some modified exchange and DM coupling constants. If two impurity spins happen to occur in neighboring sites the corresponding coupling constants is forced to be zero (see results of the calculations in Figs. 4, 5). More details on the MC procedure with impurities and the choice of the coupling parameters of the effective model given in [8, 9].

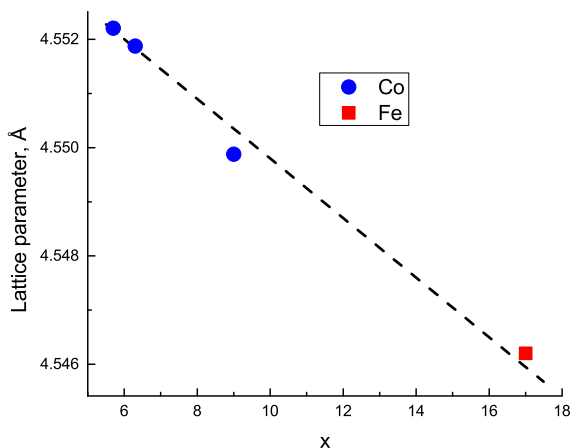


Fig. 3. The lattice parameters of $(Mn_{1-x}Co_x)Si$: $x = 0.057, 0.063, 0.09$ and $(Mn_{0.83}Fe_{0.17})Si$ [1–3]

As is seen in Fig. 2 the mentioned procedure results in a puzzling universal line exposing an independence of the fluctuation contributions to the heat capacity on the impurity contents and its nature at temperatures below the transition region. At the same time the heat capacity lines of the substances with

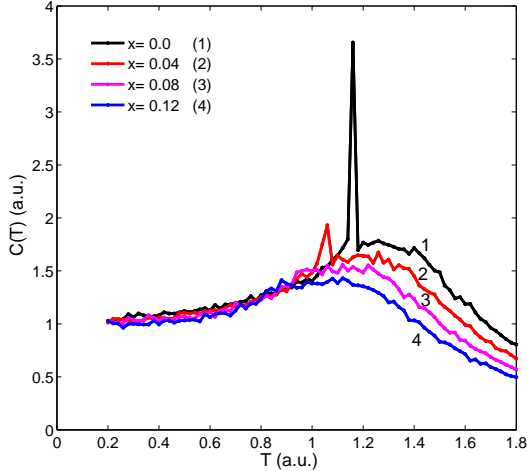


Fig. 4. Monte Carlo calculations of heat capacity of classical spin system with impurities $S_{1-x}I_x$, showing different impurity influence on heat capacity of the system in spin ordered and disordered phase

different impurities concentrations are significantly split at high temperatures in the paramagnetic phase with strong helical fluctuations, and where the heat capacity progressively decreases with an increase of impurity concentration. This is well mimicked by the Monte Carlo simulation, illustrated in Figs. 4 and 5. As is seen in Fig. 4 the heat capacity of the spin systems does not depend much on the impurity concentration at low temperatures region demonstrating the long range helical order (see Fig. 5). Concurrently at high temperatures heat capacity the spin system split in a number of branches with different impurity concentration showing the same trend like it occurs in the real system (Fig. 2). Remarkable that this behavior of the heat capacity happens in the strong helical fluctuation region lacking a long range order. This situation probably arises as a result of relative stiffness of the helical spin structure in respect to the impurity spins. Indeed, thermal excitation in a spin system with a long range order should be collective ones, so impurity spins cannot alter much its energy spectrum. On the other hand the situation drastically changes at the helical fluctuation region when no long range spin order exists. Then thermal excitation certainly became localized and sensible to various kind of perturbations including impurity spins.

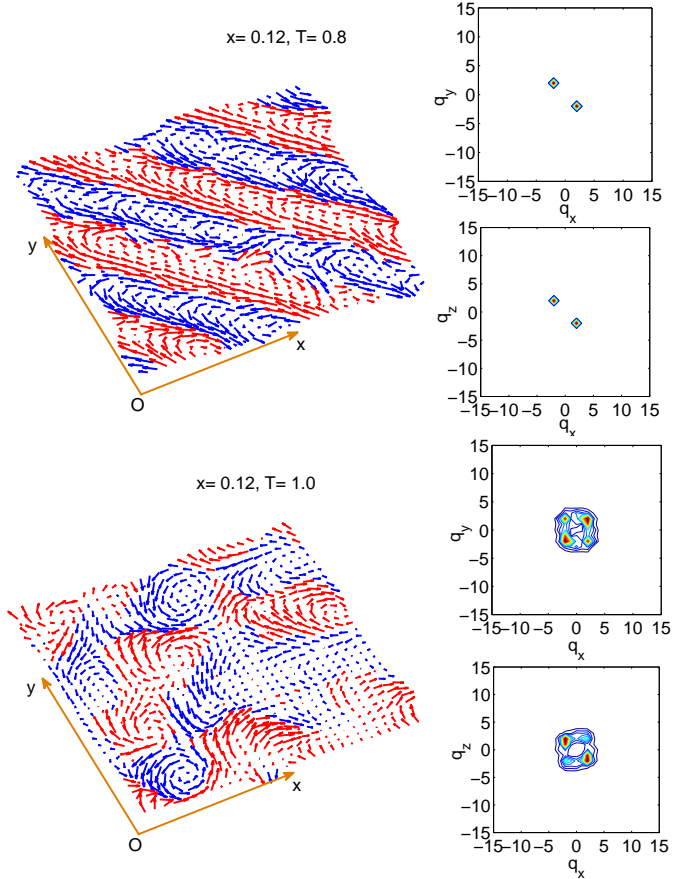


Fig. 5. Spin configuration and profiles of the Bragg intensity for classical spin system $S_{1-x}I_x$ with doping concentration $x = 0.12$ before the transition $T = 0.80$ (upper) and after (bottom) transition $T = 1.0$. Spins with positive (negative) values of S_z are presented in red (blue). The size of the arrows is proportional to $\langle S_i \rangle$

References

- [1] A. E. Petrova, S. Y. Gavrilkin, D. Menzel, S. M. Stishov, Phys. Rev. B 100, 094403 (2019).
- [2] A. E. Petrova, S. Y. Gavrilkin, G. V. Rybalchenko, D. Menzel, I. P. Zibrov, S. M. Stishov, Phys. Rev. B 103, L180401 (2021).

- [3] A. E. Petrova, S. Y. Gavrilkin, A. Yu. Tsvetkov, D. Menzel, J. Greife, S. Khasanov, S. M. Stishov, Phys. Rev. B 106 014406 (2022).
- [4] S.M. Stishov, A.E. Petrova, S. Khasanov, G.Kh. Panova, A.A. Shikov, J.C. Lashley, D. Wu, and T.A. Lograsso, Phys. Rev. B 76, 052405 (2007) (2010).
- [5] S. D. Yi, S. Onoda, N. Nagaosa, Han J. Hoon, Phys. Rev. B 80, 054416 (2009).
- [6] A. Hamann, D. Lamago, Th. Wolf, H. v. Löhneysen, D. Reznik, Phys. Rev. Lett. 107, 037207 (2011).
- [7] S. Buhrandt, L. Fritz, Phys. Rev. B 88, 195137 (2013).
- [8] A. M. Belemuk, S. M. Stishov, Phys. Rev. B 104, 064404 (2021).
- [9] A. M. Belemuk, Solid State Commun. 351, 114787 (2022).

Влияние антиферромагнитных спиновых скосов на волновое число магнитных геликоидов в кубических гелимагнетиках

В. А. Чижиков, В. Е. Дмитриенко

*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова
НИЦ «Курчатовский институт», Россия*

В кубических хиральных ферро- и ферримагнетиках типа MnSi и Cu_2OSeO_3 наблюдают несколько видов магнитных упорядочений, включая скирмионную фазу A с двойной закруткой поля намагниченности [1–4]. Важной характеристикой закрученных магнитных структур является степень закрутки, выражаемая волновым числом магнитных геликоидов $k = \mathcal{D}/\mathcal{J}$, где константа \mathcal{J} соответствует изотропному обменному взаимодействию спинов, а \mathcal{D} — антисимметричному обменному взаимодействию Дзялошинского – Мории (DMI), имеющему спин-орбитальную природу. Параметры \mathcal{J} и \mathcal{D} континуального приближения выражаются нетривиальным образом через константы J_{ij} и DMI-векторы \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 (SOC) [5, 6]. Недавно нами было показано, что возникающие благодаря DMI антиферромагнитные скосы спинов

вносят в константу \mathcal{D} существенную поправку 2-го порядка по SOC, тем самым влияя на закрутку магнитной структуры [7]. Приложив к кристаллу сильное магнитное поле (~ 10 Тл) можно уменьшить спиновые склоны и таким образом изменить волновое число k . Хотя в столь сильных полях закрутка магнитной структуры отсутствует, DMI влияет на дисперсионное соотношение спиновых волн в кристалле, приводя к смещению магнитного спектра на величину k для магнонов, распространяющихся параллельно полю [8]. Таким образом, влияние антиферромагнитных склонов на волновое число магнитных геликоидов может быть подтверждено экспериментально.

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] Chizhikov V. A. and Dmitrienko V. E., J. Phys.: Condens. Matter **36**, 165603 (2024).
- [8] Kataoka M., J. Phys. Soc. Japan **56**, 3635 (1987).

НИЗКОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Фазовая диаграмма магнитоэкситонного конденсата в квантово-холловском диэлектрике

П. С. Бережной^{1,2}, А. С. Кореев^{1,3}, А. В. Горбунов¹, В. В. Соловьев¹,
Л. В. Кулик¹, В. Б. Тимофеев¹

¹ИФТТ РАН им. Ю.А. Осипьяна, Московская обл., г. Черноголовка, Россия

²НИУ Высшая школа экономики, г. Москва, Россия

³МФТИ (НИУ), Московская обл., г. Долгопрудный, Россия

Предположение о возможности бозе-эйнштейновской конденсации в ансамбле циклотронных магнитоэкситонов, состоящих из электрона и дырки на разных уровнях Ландау в зоне проводимости, было высказано относительно недавно [1]. Наиболее перспективными с этой точки зрения являются триплетные циклотронные магнитоэкситоны (ТЦМЭ) в квантово-холловском диэлектрике (электронный фактор заполнения $\nu = 2$) в квантовой яме (КЯ) GaAs/AlGaAs [2, 3]. ТЦМЭ образованы неравновесными электронной вакансией (ферми-дыркой) на полностью заполненном нулевом электронном уровне Ландау и возбужденным электроном с перевернутым спином на незаполненном первом уровне Ландау. Кроме того, что ТЦМЭ — это нижайшие по энергии возбуждения [3, 4], они являются долгоживущими композитными бозонами со спином $S = 1$: время жизни ТЦМЭ достигает миллисекунды [5]. При температурах $T \lesssim 1$ К и концентрациях $n_{\text{ex}} \sim (1 - 10)\%$ от плотности квантов магнитного потока в ансамбле ТЦМЭ формируется новое состояние электронной материи — *магнитофермионный конденсат* [5]. Действительно, в электронном представлении получается, что в двумерной электронной (фермиевской) системе из-за межэлектронных корреляций образуется газ композитных бозонов, переходящий при достижении критической концентрации в конденсированное состояние. Если же использовать экситонное представление, то данное состояние естественно именовать *маг-*

нитоэкситонным конденсатом. Магнитоэкситонный конденсат — качественно новая фаза. Это экспериментальный пример конденсации композитных бозонов в пространстве обобщенных импульсов — величин, зависящих как от пространственных координат, так и от их градиентов [6].

ТЦМЭ являются «темными» квазичастицами, которые не взаимодействуют с электромагнитным полем в дипольном приближении. В эксперименте основным способом обнаружения ТЦМЭ является фотоиндуцированное резонансное отражение (ФРО) света, соответствующего оптическому переходу «0–0» между состояниями нулевых уровней Ландау тяжелой дырки в валентной зоне и электрона в зоне проводимости. В равновесии отражение для перехода «0-0» отсутствует и появляется при фотовозбуждении на более высокие уровни Ландау [7]. Методом ФРО детектируются неравновесные ферми-дырки, входящие в состав ТЦМЭ. Так было обнаружено, в частности, что магнитоэкситонный конденсат способен растекаться из области фотовозбуждения фактически на весь образец (~2-3 мм) [5]. В КЯ 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 [8], а длина пространственной когерентности составляет не менее 10 мкм [9].

При температурах $T \lesssim 1 \text{ К}$ плавное понижение T при фиксированной плотности мощности P_{pump} оптического фотовозбуждения электронов из валентной зоны на незаполненные уровни Ландау зоны проводимости приводит к скачкообразному увеличению подвижности ТЦМЭ и амплитуды ФРО, что связывается с формированием конденсированного состояния в ансамбле ТЦМЭ [5]. Варьирование T и P_{pump} позволило построить в диапазоне температур $0.53 \lesssim T \lesssim 0.85 \text{ К}$ фазовую диаграмму перехода «газ-конденсат» в координатах «температура – плотность мощности» [5]. Столь узкий диапазон доступных температур не позволяет составить реальное представление о фазовой границе перехода в новое конденсированное состояние. В настоящей работе представлены результаты исследования условий формирования магнитоэкситонного конденсата в области существенно более низких температур: построена фазовая диаграмма перехода «газ-конденсат» в диапазоне температур $0.04 \lesssim T \lesssim 0.85 \text{ К}$ (рис. 1).

При $T \lesssim 0.6$ К связь P_{pump} с температурой на границе перехода «газ-конденсат» близка к линейной, а при больших температурах наблюдается сильный сверхлинейный рост. При $T \gtrsim 1.0$ К достичь границы перехода «газ-конденсат» вообще не удастся. Очевидно, что плотность электронных возбуждений в холловском диэлектрике должна быть много меньше концентрации самих электронов: иначе при $n_{\text{ex}} \gtrsim 10\%$ от плотности квантов магнитного потока ферми-дырка становится плохо определенным зарядовым возбуждением. В этом случае нужно говорить о возбужденных электронах, а не о связанных в ТЦМЭ электрон-дырочных парах. Таким образом, целесообразно обсуждать вид фазовой границы только в области $T \lesssim 0.6$ К. Причем физический смысл имеет граница в координатах « $T - n_{\text{ex}}$ ». При стационарном фотовозбуждении $n_{\text{ex}} \sim P_{\text{pump}} \tau$, где τ – время жизни ТЦМЭ. Измеренная в диапазоне $T \lesssim 0.6$ К зависимость $\tau(T)$ демонстрирует линейное спадание с температурой (рис. 1), а произведение $P_{\text{pump}}(T)\tau(T)$ остается постоянным (с точностью до фактора 2). Таким образом, плотность магнитоэкситонного конденсата не меняется с температурой, т. е. он ведет себя как несжимаемая жидкость.

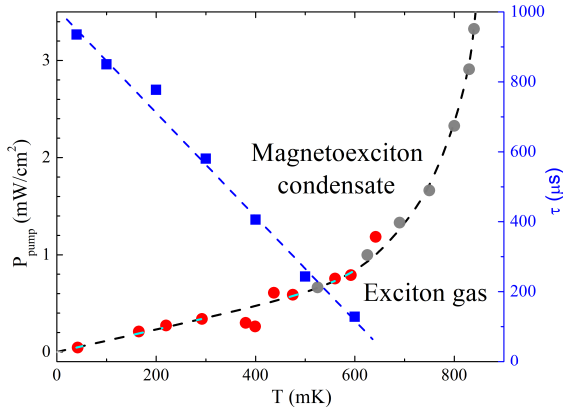


Рис.1. Фазовая диаграмма перехода «газ ТЦМЭ – магнитоэкситонный конденсат» в координатах «температура – плотность мощности фотовозбуждения». Красные кружки – результаты данной работы, серые кружки – результаты работы [5]. Синие квадраты – температурная зависимость времени жизни ТЦМЭ

Список литературы

- [1] Dickmann S., *Phys. Rev. Lett.* **110**, 166801 (2013).
- [2] Eriksson M. A., Pinczuk A., Dennis B. S., Simon S. H., Pfeiffer L. N., West K. W., *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2163 (1999).
- [3] 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).
- [4] Dickmann S., Kukushkin I. V., *Phys. Rev. B* **71**, 241310 (2005).
- [5] Kulik L. V., Zhuravlev A. S., Dickmann S., Gorbunov A. V., Timofeev V. B., Kukushkin I. V., Schmult S., *Nature Commun.* **7**, 13499 (2016).
- [6] Avron J. E., Herbst I. W., Simon B., *Ann. Physics* **114**, 431 (1978).
- [7] Kulik L. V., Gorbunov A. V., Zhuravlev A. S., Timofeev V. B., Dickmann S., Kukushkin I. V., *Scientific Reports* **4**, 10354 (2015).
- [8] 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).
- [9] Горбунов А. В., Ларионов А. В., Кулик Л. В., Тимофеев В. Б., *Письма в ЖЭТФ* **114**, 479 (2021).

Линейное магнетосопротивление при низких температурах в HoTe_2

Д. М. Воропаев^{1,2}, М. М. Тюменцев^{1,3}, И. А. Кон^{1,3}, П. Д. Григорьев⁴,
С. В. Зайцев-Зотов^{1,3}, E. Pachoud⁵, A. Hadj-Azzem, P. Monceau⁵

¹Институт радиоэлектроники им В.А. Котельникова, г. Москва, Россия

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

³Высшая школа экономики (НИУ), г. Москва, Россия

⁴Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау, г. Черноголовка, Россия

⁵Université Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, Institut NEEL, Grenoble, France

Электрон-фононное взаимодействие часто приводит к нарушению симметрии основных состояний в твердых телах – одним из примеров является возникновение волны зарядовой плотности (ВЗП). Основное состояние ВЗП характеризуется пространственной модуляцией электронной

плотности $\rho \propto \cos(Q_{CDW} \mathbf{r} + \phi)$ и периодическим искажением решетки с тем же волновым вектором Q_{CDW} , вызывающим открытие щели в электронном спектре [1]. В некоторых случаях основное состояние, возникающее в результате образования ВЗП, может оказаться полуметаллическим, поскольку на поверхности Ферми могут остаться электронные и дырочные карманы. К таким материалам относится квазидвумерный трителлурид HoTe_3 . Данное соединение имеет ромбическую кристаллическую структуру (пространственная группа Cmcm), и состоит из двойных плоскостей Te , разделенных гофрированными плоскостями RTe ; ось b перпендикулярна плоскостям Te . HoTe_3 демонстрирует переход в состояние с ВЗП с несоизмеримым с решеткой волновым вектором $Q_{CDW1} = (0, 0; \sim 2c^*/7)$ при температуре $T_{P1} = 283$ К, а при температуре $T_{P2} = 110$ К происходит второй ВЗП переход с волновым вектором $Q_{CDW2} = (\sim 2a^*/7, 0, 0)$, перпендикулярным Q_{CDW1} .

Поперечный магнетотранспорт в данном соединении изучался при температурах выше 20 К для направления совпадающего с направлением волнового вектора одной из ВЗП [2]. Было получено, что при понижении температуры магнетосопротивление изменяется с квадратичного до близкого к линейному. Возникает вопрос о дальнейшей эволюции магнетосопротивления при дальнейшем понижении температуры, о характере магнетосопротивления вдоль направления другой ВЗП, а также о сходстве и различии магнетосопротивления вдоль этих двух направлений. В данной работе мы изучили поперечное магнетосопротивление вдоль обоих направлений волновых векторов соединения HoTe_3 при более низких температурах вплоть до 2.8 К при магнитных полях до 7 Т. Было установлено, что при низких температурах магнетосопротивление положительно и имеет линейный вид для одного из направлений, совпадающих с направлением волнового вектора ВЗП (рис. 1, а). В то же время, для перпендикулярного направления магнетосопротивление имеет сублинейный вид, величина которого примерно в 2 раза меньше (рис. 1, б). Обнаруженная нами анизотропия магнетосопротивления указывает на сильно анизотропную перестройку поверхности Ферми из-за возникновения ВЗП и может дать полезную информацию о ней. Ранее линейное магнетосопротивление наблюдалась в таких материалах с ВЗП как квазиодномерный NbSe_3 [3], квазидвумерные дихалькогениды переходных металлов, а также в TbTe_3 и HoTe_3 при более высоких температурах [2] и связывалось с зависимо-

стью времени рассеяния электронов из-за «горячих точек» поверхности Ферми (hot spots) τ_{hs} от магнитного поля, $\tau_{hs} \propto 1/H$ [2]. Обнаруженные отклонения от линейной зависимости в сильном поле только для одного направления указывают либо на сильную анизотропию поверхности Ферми в состоянии с ВЗП и на конкуренцию нескольких механизмов рассеяния электронов, включая «горячие точки», кристаллические дефекты и т. д. Представляет интерес возможность управления кристаллическими дефектами в наших образцах из-за эффекта их «старения» и менять роль разных механизмов рассеяния на одном образце.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 22-42-09018) ANR (грант 21-CE30-0055).

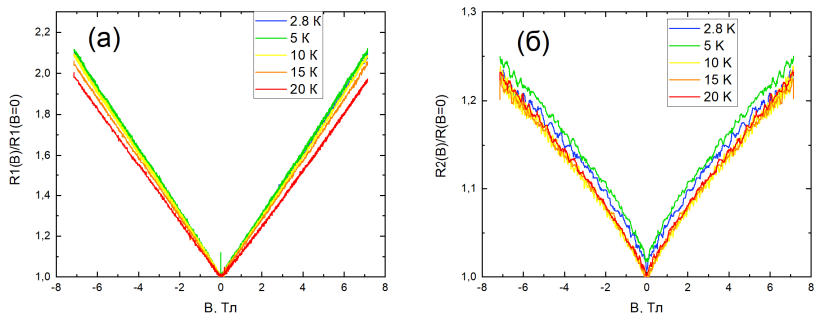


Рис. 1. Магнетосопротивление NbTe_3 в полях до 7 Т при $T = 2.8, 5, 10, 15, 20$ К. Компонента тензора проводимости соответствует (а) Q_{CDW1} ; (б) Q_{CDW2}

Список литературы

- [1] Monceau P. Electronic crystals: an experimental overview // *Advances in Physics*. 2012. Т. 61. № 4. С. 325–581.
- [2] Sinchenko A. A. et al. Linear magnetoresistance in the charge density wave state of quasi-two-dimensional rare-earth tritellurides // *Physical Review B*. 2017. Т. 96. № 24. С. 245129.
- [3] Richard J., Monceau P., Renard M. Nonlinear magnetoresistance and charge-density-wave depinning at liquid-helium temperatures in NbSe_3 // *Physical Review B*. 1987. Т. 35. № 9. С. 4533.

Последовательная логарифмическая релаксация фотопроводимости в вискерах слоистого квазиодномерного полупроводника TiS_3

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

*Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН,
г. Москва, Россия
E-mail: gorl@cplire.ru

Оптические свойства слоистого квазиодномерного полупроводника n -типа TiS_3 с запрещенной зоной ~ 1 эВ интенсивно исследуются в связи с возможным применением этого соединения в оптоэлектронике. Недавно на основе вискеро́в TiS_3 изготовлены первые фотодетекторы с чувствительностью ~ 3000 А/Вт и быстродействием ~ 1 мс [1]. Обе характеристики детектора определяются процессом релаксации фотопроводимости, механизм которой пока не установлен.

В данной работе приводятся результаты измерений релаксации фотопроводимости, $\delta\sigma$, монокристаллических вискеро́в TiS_3 . Исследованы переходные процессы при облучении кристаллов прямоугольными импульсами излучения светодиодов в видимом и ближнем ИК диапазоне, в области температур от комнатной до азотной, при разных интенсивностях облучения.

На рис. 1 приведены зависимости $\delta\sigma(t)$ после выключения светодиода в логарифмическом масштабе по оси t при температурах $78 \text{ K} < T < 180 \text{ K}$. Максимальной величины $\delta\sigma$ достигает в области 100 К, в согласии с [2]. Видно, что при всех температурах кривые релаксации описываются логарифмическим законом в диапазоне вре́мен от 10^{-3} до 10^2 с.

Отклонение $\delta\sigma(t)$ от экспоненциальной зависимости означает, что спад $\delta\sigma$ нельзя описать одним временем релаксации, то есть, барьером определённой высоты. Логарифмическая релаксация в TiS_3 характеризуется временами, распределёнными в диапазоне от десятков микросекунд в начале процесса до десятков минут в конце. Для подобных систем предложены модели параллельной и последовательной релаксации. Параллельную

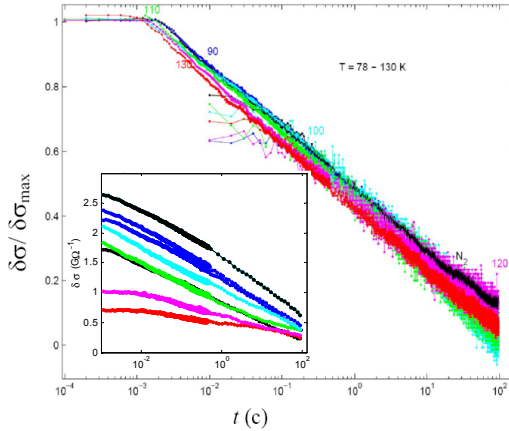


Рис.1. Релаксация фотопроводимости $\delta\sigma(t)$, нормированной на ее максимальное значение при облучении, в логарифмическом масштабе по времени при $78\text{ K} < T < 130\text{ K}$, $\lambda = 650\text{ нм}$. На вставке: $\delta\sigma(t)$ при $78\text{ K} < T < 180\text{ K}$

релаксацию можно представить как суперпозицию независимых переходов через барьеры разной высоты. Последовательная релаксация представляет собой последовательность переходов через барьеры, причём каждый следующий переход может произойти только после предыдущего. По мере релаксации энергия системы уменьшается, и высота барьера возрастает, так что каждый следующий переход характеризуется бóльшим временем [3]. Высоту барьера для релаксации фотопроводимости определяет величина $\delta\sigma$. В TiS_3 спад фотопроводимости после выключения светодиода происходит тем быстрее, чем выше была мощность излучения светодиода (рис. 2), что соответствует последовательной релаксации. Зависимости $\delta\sigma(t)$, измеренные при разных интенсивностях излучения, при $t < 1\text{ с}$ можно совместить сдвигом по времени, что тоже указывает на последовательную релаксацию. В области $t > 1\text{ с}$ кривые расходятся, скорее всего, вследствие пространственной неоднородности образцов.

Таким образом, логарифмическая релаксация фотопроводимости в TiS_3 имеет, преимущественно, последовательный характер, то есть, по мере реализации быстрых процессов открывается возможность более медленных, характеризуемых более высокими барьерами для рекомбинации электронов и дырок.

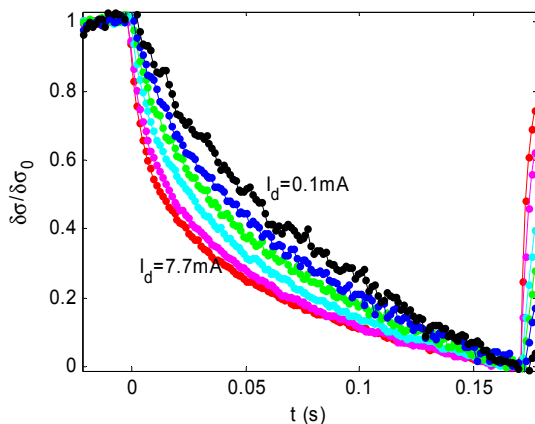


Рис. 2. Релаксация фотопроводимости $\delta\sigma(t)$, нормированной на ее максимальное значение, $\delta\sigma_0$, после выключения светодиода при разных интенсивностях облучения, определяемых током через светодиод, $I_d = 0.1, 0.25, 0.5, 1, 3, 7.7$ мА. $\lambda = 650$ нм

Результаты можно объяснить следующим образом. В TiS_3 , полупроводнике n -типа, время рекомбинации определяется временем жизни фотовозбужденных дырок, которое экспоненциально растёт с понижением их концентрации. Это может происходить, например, из-за захвата дырок на ловушки, энергия освобождения которых падает по мере их заполнения вследствие кулоновского взаимодействия.

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

Список литературы

- [1] Island J. O., Molina-Mendoza A. J., Barawi M., Biele R., Flores E., Clamagrand 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., Zybtssev S. G., Pokrovskii V. Ya. and Titov A. N., *Appl. Phys. Lett.*, **120**, 153102 (2022).
- [3] Palmer R. G., Stein D. L., Abrahams E., and Anderson P. W., *Phys. Rev. Lett.* **53**, 958 (1984).

Происхождение гистерезиса в теллуритах редкоземельных элементов

П. Д. Григорьев, А. А. Морочо Амбойя

Московский институт стали и сплавов (МИСиС), Москва

Полителлуриды редкоземельных элементов $R\text{Te}_n$ особенно привлекательны для изучения конкурирующих типов электронного упорядочения при комнатной температуре. Несмотря на замечательную простоту кристаллических плоскостей, общих для серии $R\text{Te}_n$ и несущих почти двумерные проводящие электроны, фазовая диаграмма и физические свойства этих материалы очень богаты. Температура перехода волны зарядовой плотности (ВЗП) и свойства семейства $R\text{Te}_n$ могут быть хорошо настроены путем выбора различных элементов R серии лантаноидов [1]. Недавно обнаруженный температурный гистерезис сопротивления в $R\text{Te}_4$ [2, 3] не только является рекордным по ширине среди кристаллических тел, но и механизм, лежащий в основе этого гистерезиса, все еще остается загадкой из-за экзотических метастабильных состояний, которые могут сосуществовать в пределах петли гистерезиса. Мы интерпретируем этот гистерезис в $R\text{Te}_4$ как сложное взаимодействие между двумя электронными нестабильностями: антикросинга электронных зон вблизи уровня Ферми и ВЗП [4], которые имеют близкий энергетический выигрыш.—Чтобы увидеть влияние моно- и двухслойных Te-p орбиталей на электронную восприимчивость $\chi(Q_{CDW})$ и гистерезис в $R\text{Te}_4$, мы используем модель, где общая восприимчивость Линдхарда является суммой попарных произведений вкладов от всех трех проводящих слоев 1, 2, 3, обозначающих соответственно первый слой в двухслойном Te, монослой Te и второй слой в двухслойном Te (с обозначениями, как в ссылке [5]):

$$\chi_{total} = \chi_{1-1} + \chi_{2-2} + \chi_{3-3} + 2(\chi_{1-3} + \chi_{1-2} + \chi_{2-3}). \quad (1)$$

Из симметрии между Te слоями внутри бислоя в нашей модели мы предполагаем $\chi_{1-1} \approx \chi_{3-3}$ и $\chi_{2-1} \approx \chi_{2-3}$, что дает:

$$\chi_{total} \approx 2\chi_{1-1} + \chi_{2-2} + 4\chi_{1-2} + 2\chi_{1-3} \quad (2)$$

Результаты численного расчета показаны на рис. 1. Ширина гистерезиса оценивается по температурной зависимости восприимчивости

$\chi(T)$, показанной на рис. 1, справа. Значение восприимчивости $\chi_{total} = 7.6$, которого красная кривая достигает только при $T_c \approx 200$ К, уже достигнуто синей кривой при $T_c^* \approx 310$ К. Таким образом, ожидаемый температурный гистерезис $\Delta T = T_c^* - T_c \approx 110$ К согласуется с большим тепловым гистерезисом, обнаруженным экспериментально при измерениях электрического сопротивления EuTe_4 [2,3]. Согласно нашим расчетам, основной вклад в гистерезис вносит группа $\{4\chi_{1-2}\}$, которая образуется из комбинации моно- и двухслойных Те-р орбиталей и дает самую большую величину χ_{total} (см. рис. 1, слева).

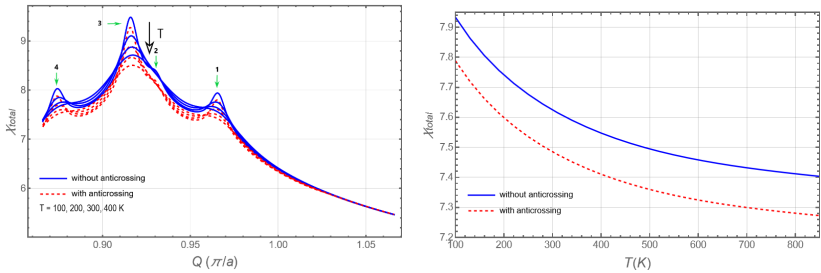


Рис. 1. Слева: общая восприимчивость как функция волнового вектора без (сплошная синяя линия) антикроссинга и с антикроссингом (пунктирная красная линия). Справа: температурная зависимость максимальной суммарной восприимчивости без и с антикроссингом. Пики: 1, 2, 3, 4 соответствуют комбинациям $2\chi_{1-1}$, χ_{2-2} , $4\chi_{1-2}$, $2\chi_{1-3}$, соответственно

Список литературы

- [1] Brouet V., Yang W. L., Zhou X. J., Hussain Z., Moore R. G., He R., Lu D. H., Shen Z. X., Laverock J., Dugdale S. B., Ru N., Fisher I. R. Angle-resolved photoemission study of the evolution of band structure and charge density wave properties in RTe_3 (R = Y, La, Ce, Sm, Gd, Tb, and Dy) // Phys. Rev. B 77 (2008) 235104. DOI: 10.1103/PhysRevB.77.235104.
- [2] Wu D., Liu Q. M., Chen S. L., Zhong G. Y., Su J., Shi L. Y., Tong L., Xu G., Gao P., Wang N. L. Layered semiconductor EuTe_4 with charge density wave order in square tellurium sheets // Phys. Rev. Mater. 3 (2019) 024002. DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.3.024002.

- [3] Lv B. Q., Zong A., Wu D., Rozhkov A. V., Fine B. V., Chen S.-D., Hashimoto M., Lu D.-H., Li M., Huang Y.-B., Ruff J. P. C., Walko D. A., Chen Z. H., Hwang I., Su Y., Shen X., Wang X., Han F., Po H. C., Wang Y., Jarillo-Herrero P., Wang X., Zhou H., Sun C.-J., Wen H., Shen Z.-X., Wang N. L., Gedik N. Unconventional hysteretic transition in a charge density wave // *Phys. Rev. Lett.* 128 (2022) 036401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.128.036401.
- [4] Grigoriev P. D., Sinchenko A. A., Vorobyev P. A., Hadj-Azzem A., Lejay P., Bosak A., Monceau P. Interplay between band crossing and charge density wave instabilities // *Phys. Rev. B* 100 (2019) 081109. DOI: 10.1103/PhysRevB.100.081109.
- [5] Pathak A., Gupta M. K., Mittal R., Bansal D. Orbital- and atom-dependent linear dispersion across the Fermi level induces charge density wave instability in EuTe_4 // *Phys. Rev. B* 105 (2022) 035120. DOI: 10.1103/PhysRevB.105.035120.

Эффекты памяти в магнетосопротивлении двухкомпонентных электронных систем

К. С. Денисов, К. А. Барышников, П. С. Алексеев

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

Развита теория магнетотранспорта в двухкомпонентной двумерной электронной системе с редкими макроскопическими дефектами («дисками»). Такая система может быть сформирована, например, приложением к однокомпонентной электронной ферми-системе сильного магнитного поля в плоскости слоя, что приводит к сильному зеемановскому расщеплению состояний двумерных электронов и формированию двух компонент с разными параметрами.

В магнетотранспорте такой системы определяющую роль играют классические эффекты памяти при рассеянии электронов на дефектах

и медленные переходы электронов между компонентами жидкости за счет межэлектронного рассеяния. Нами показано, что режим течения зависит в такой системе от соотношения между шириной образца и характерной внутренней длиной, определяемой темпом переходов электронов между компонентами и эффектами памяти при рассеянии электронов на дисках [1].

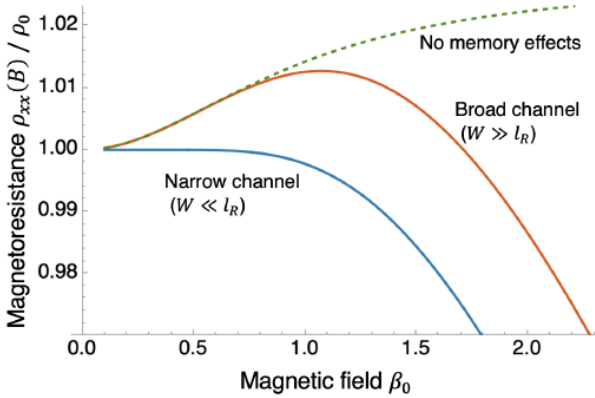


Рис. 1. Магнетосопротивление широкого и узкого образцов (по сравнению с внутренней длиной l_R , определяемой темпом рекомбинации и эффектами памяти) с двумерной двухкомпонентной электронной системой, сформированной за счёт зеемановского расщепления электронной зоны. Расчет выполнен для реальных параметров спектра электронов в графене. Магнитное поле измеряется в единицах β_0 — среднее значение произведения циклотронной частоты и времени релаксации импульса в нулевом магнитном поле в двух зеемановских подзонах.

В образцах шире внутренней длины формируется течение единой двухкомпонентной жидкости в объеме образца, которое описывается объёмными формулами Друде с учетом эффектов памяти. Вблизи краёв образца происходят интенсивные переходы электронов из одной компоненты в другую. Магнетосопротивление оказывается знакопеременным: положительным в малых магнитных полях и отрицательным в больших полях. Положительный участок магнетосопротивления отвечает приме-

нимости классических формул Друде для единого объёмного тензора проводимости двухкомпонентной системы в центральной части образца (за исключением прикраевых слоёв). Отрицательный участок магнетосопротивления отвечает существованию единого течения двухкомпонентной системы и возрастанию в ней с ростом магнитного поля доли электронов, не сталкивающихся с локализованными дефектами (механизм, аналогичный механизму Баскина – Энтина – Магарилла [2, 3] для однокомпонентной системы).

В узких образцах, с ширинами меньше характерной длины, переходы с изменением типа электронов не успевают сформировать единую жидкость. В результате течения каждой из компонент являются независимыми и описываются собственными проводимостями с учетом эффектов памяти, аналогичных описанным в [2, 3]. При этом магнетосопротивление является строго отрицательным.

В работе [4] экспериментально изучалось магнетосопротивление очень чистых квантовых ям GaAs с искусственно сделанными отверстиями радиуса около 1 мкм, в частности, при наличии большой компоненты магнитного поля в плоскости квантовой ямы (и компоненты магнитного поля перпендикулярно слою ямы, непосредственно определяющему динамику электронов). Выполненный на основе полученных формул (см. работу [1]) анализ экспериментальных данных работы [4] показывает, что наблюдавшийся в ней режим транспорта в малых магнитных полях может отвечать (частично либо полностью) режиму, описанному в нашей теории.

Работа поддержана Российским научным фондом (проект № 18-72-10111-П).

Список литературы

- [1] Денисов К. С., Барышников К. А., Алексеев П. С., *Письма в ЖЭТФ* **118**, 110 (2023).
- [2] Baskin E. M., Magarill L. N., Entin M. V., *ЖЭТФ* **75**, 723 (1978).
- [3] Bobylev A. V., Maaо F. A., et al., *Phys. Rev. Lett.* **75**, 197 (1995).
- [4] Horn-Cosfeld B., Schluck J., Lammert J., Cerchez M., Heinzl T., Pierz K., Schumacher H. W., Mailly D., *Phys. Rev. B* **104**, 045306 (2021).

Междолинное смешивание интерфейсных экситонов на латеральных гетеропереходах

М. В. Дурнев^{*}, Д. С. Смирнов

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург

^{}E-mail: durnev@mail.ioffe.ru*

Ван-дер-ваальсовы гетероструктуры на основе монослоёв дихалькогенидов переходных металлов являются в последнее время предметом активных научных исследований [1]. Различные двумерные кристаллы образуют вертикальные гетеропереходы второго рода, так что электроны и дырки находятся в соседних слоях, но удерживаются за счёт кулоновского взаимодействия, формируя, таким образом, пространственно непрямой (дипольный) экситон. Наряду с внутрислоевыми экситонами такие межслоевые экситоны определяют оптический отклик гетероструктур.

В значительно меньшей степени изучены электронные и экситонные состояния в латеральных гетероструктурах, где атомы различных материалов сменяют друг друга в плоскости слоя. Такие латеральные гетероструктуры на основе монослоёв дихалькогенидов переходных металлов выращиваются методами эпитаксии, при этом соответствующие одномерные гетероинтерфейсы могут быть атомарно резкими [2]. Как и в случае вертикальной гетероструктуры, на латеральном гетеропереходе электрон и дырка пространственно разделены и могут формировать непрямой экситон, обладающий статическим дипольным моментом в плоскости слоя [3].

В работе показано, что низкая симметрия латерального интерфейса типа «armchair» между монослоями дихалькогенидов переходных металлов приводит к смешиванию электронных состояний в разных долинах. Построена микроскопическая теория такого смешивания и получено аналитическое выражение для константы долинного смешивания в рамках модели сильной связи. Показано, что долинное смешивание приводит к зеемановскому расщеплению электронных и экситонных состояний магнитным полем, лежащим в плоскости слоя, а также линейной поляризации фотолуминесценции интерфейсных экситонов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 21-72-10035).

Список литературы

- [1] Novoselov K. S., Mishchenko A., Carvalho A., and Castro Neto A. H., 2D materials and van der Waals heterostructures // *Science* **353** (2016).
- [2] Sahoo P. K., Memaran S., Xin Y., Balicas L., and Gutiérrez H. R., One-pot growth of two-dimensional lateral heterostructures via sequential edge-epitaxy // *Nature* **553** (2018).
- [3] Rosati R., Paradisanos I., Huang L., Gan Z., George A., Watanabe K., Taniguchi T., L. Lombez, P. Renucci, A. Turchanin, B. Urbaszek, and E. Malic, Interface engineering of charge-transfer excitons in 2D lateral heterostructures, *Nature Communications* **14**, 2438 (2023).

Интерфейсные электронные состояния на стыке атомных цепочек

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

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

²*НИУ ВШЭ, г. Москва, Россия*

**E-mail: igor.zagorodnev@gmail.com*

Рассматриваются электронные состояния на стыке двух атомных цепочек в приближении ближайших соседей модели сильной связи в одно- и двух-зонном приближении, а также в рамках эффективного гамильтониана в модели эффективной массы Кона – Латтинжера. Несмотря на свою простоту рассматриваемые системы могут быть реализованы экспериментально, например, в атомных цепочках [1] или нанофотонике [2].

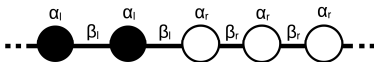


Рис. 1. Схематическое изображение рассматриваемого стыка цепочек

Сначала рассмотрим систему в однозонном приближении, когда в каждой цепочке учитывается только одно состояние на одном узле, см. рис. 1. В случае стыка полубесконечных цепочек электронный спектр

можно найти аналитически. При этом в определенной области значений интегралов перекрытий возникают интерфейсные состояния, волновые функции которых локализованы на таком «гетеропереходе» и показаны на нижних трех графиках рис. 2.

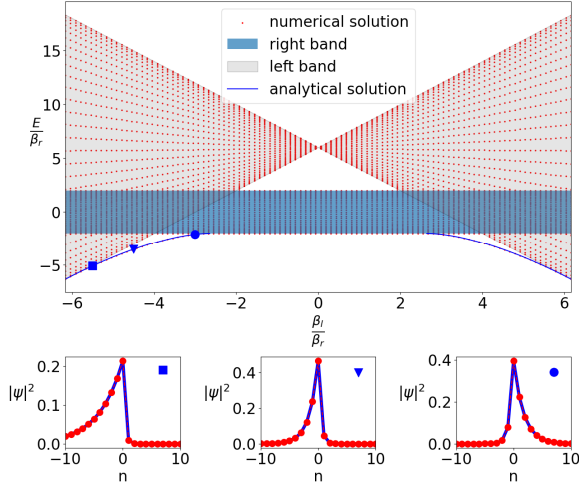


Рис. 2. Энергетический спектр цепочек, локализованное состояние и его волновые функции в однозонном приближении. Для численных расчетов полное число атомов $N = 200$, $\frac{\alpha_r}{\beta_r} = 0$, $\frac{\alpha_l}{\beta_r} = 6$, n – номер атома в цепочке

На верхнем графике рис. 2 построена энергия как функция интеграла перекрытия в левой цепочке. Делокализованные состояния в правой цепочке не зависят от данного параметра и поэтому соответствующая им (разрешенная) зона правой цепочки представлена на данном рисунке темной полосой постоянной ширины. Разрешенная зона левой цепочки линейно зависит от величины интеграла перекрытия и представлена на графике «бабочкой». Сплошной (синей) кривой представлены интерфейсные состояния. На нижних графиках на рис. 2 изображен квадрат модуля волновой функции интерфейсного состояния при различных значениях интеграла перекрытия в левой цепочке.

В рассматриваемых системах в однозонном приближении энергия таких состояний всегда лежит ниже нижней энергетической зоны или

выше верхней. Если зоны в разных цепочка перекрываются не сильно, то такие состояния могут быть описаны в рамках феноменологических граничных условий для эффективного гамильтониана [3]. Мы также рассмотрели двухзонное приближении и показали, что при наличии инверсии зон помимо интерфейсных состояний типа Волкова – Понкрата могут возникать резонансные состояния.

Список литературы

- [1] Huda M. N., Kezilebieke S., Ojanen T., Drost R., Liljeroth P. // *Npj Quantum Materials*. 2020. V. 5. P. 17.
- [2] Moritake Y., Ono M., Notomi M. // *Nanophotonics*. 2022. V. 11. P. 2183.
- [3] Волков В. А., Еналдиев В. В., Загороднев И. В. Электронные поверхностные состояния в полупроводниках и полуметаллах. — Физматкнига. 2018.

Исследование упорядоченных конфигураций в сплавах МХенов, содержащих переходные металлы, в зависимости от состава

Н. Г. Замкова, В. С. Жандун, О. Н. Драганюк

*Институт физики СО РАН — обособленное подразделение
ФИЦ “КНЦ СО РАН”, г. Красноярск, Россия*

Двумерные (2D) материалы обладают интригующими свойствами, которые отличаются от их объемных аналогов. Недавнее открытие МХенов [1,2] создало еще один большой класс перспективных 2D-материалов. МХены представляют собой 2D-слоистые карбиды и/или нитриды переходных металлов, полученные в основном путем селективного травления слоев А-элемента (в основном групп от IIIA до IVA) из их исходных тройных карбидов и нитридов, называемых МАХ-фазами. Будучи проводящими, МХены широко изучаются для использования в качестве электродов в батареях и суперконденсаторы, для защиты от электромагнитных помех [3], в качестве электрокатализаторов для реакции выделения водорода [4], и в качестве топологических изоляторов [5].

Большое разнообразие химического состава МХенов обеспечивает большую универсальность с точки зрения дизайна свойств новых материалов. При легировании переходным металлом распределение легирующих элементов определяет его свойства и, в конечном итоге, эффективность МХенов в предполагаемом применении.

Одним из перспективных направлений является использование магнитных свойств и спиновых степеней свободы МХенов с переходным металлом для различных приложений. Первым шагом на пути к созданию новых магнитных сплавов МХенов является оценка относительной стабильности их различных структурных конфигураций. Несмотря на активное развитие направления, на сегодняшний день синтезировано мало МХенов с переходными или двойными переходными металлами, поскольку невозможно экспериментально перебрать и исследовать все возможные конфигурационные составы. В свою очередь расчеты из первых принципов могут использоваться для прогнозирования стабильности структур сплавов, которые еще не изучены и могут быть впоследствии синтезированы. В данной работе мы исследовали взаимосвязь структура-стабильность, чтобы дать представление о фазовой стабильности сплавов МХене различных составов и их оптимальных упорядоченных конфигурациях. В рамках теории функционала плотности и метода кластерного разложения [6-8] мы оценили относительную стабильность и магнитные и электронные свойства различных упорядоченных конфигураций для сплавов МХене, содержащих переходной (двойной переходной) металл: $(Cr_{1-x}Mn_x)_3C_2$, $(Ta_{1-x}Cr_x)_3C_2$, $(Ta_{1-x}Mn_x)_3C_2$, $(V_{1-x}Cr_x)_3C_2$ с $0 \leq x \leq 1$. Результатом явилась диаграмма энергия-состав для каждого варианта легирования (рис. 1) для определения наиболее перспективных кандидатов. Для каждого варианта легирования мы рассмотрели влияние состава на степень и тип упорядочения, а также на магнитные и электронные свойства. На основе этих исследований мы обсуждаем возможности формирования упорядоченных сплавов МХене, которые еще предстоит синтезировать экспериментально. На рис. 1 приведены зависимости энергии образования (E_f) МХенов первого ($(V_{1-x}Cr_x)_2C$) и второго ($(Cr_{1-x}Mn_x)_3C_2$) порядков от концентрации x . Каждая точка представляет структуру, чья относительная стабильность соответствует энергии образования E_f МХен первого порядка $(V_{1-x}Cr_x)_2C$ реализован экспериментально для концентраций хрома $x \approx 0.5$. Как видно из рис. 1, a расчет относительной стабильности методом

кластерного разложения соответствует экспериментальным данным. Для МХена второго порядка $(\text{Cr}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{C}_2$ наш расчет также предсказывает существование ряда стабильных упорядоченных конфигураций в широком интервале концентраций марганца (рис. 1, б).

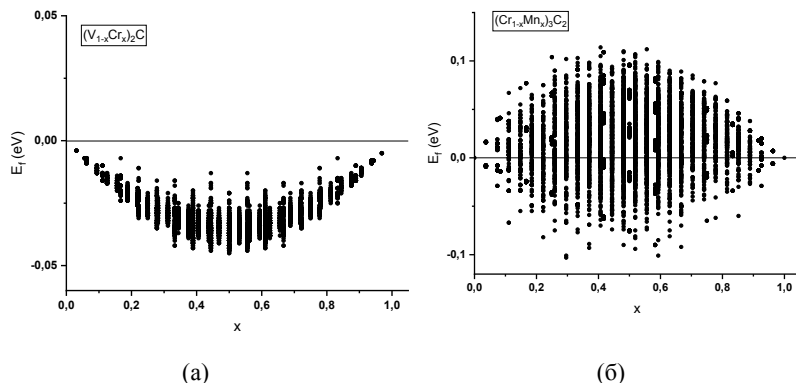


Рис. 1. Зависимость энергии формирования сплавов МХенов от концентрации металлов для а) $(\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x)_2\text{C}$ б) $(\text{Cr}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{C}_2$

Благодарности. Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 23-22-10020, <https://rscf.ru/project/23-22-10020>, Красноярского краевого фонда науки.

Список литературы

- [1] Naguib M., Mochalin V. N., Barsoum M. W., Gogotsi, Y. 25th Anniversary Article: MXenes: A New Family of Two-Dimensional Materials // *Adv. Mater.* 2014, 26, 992–1005.
- [2] Naguib M., Mashtalir O., Carle J., Presser V., Lu J., Hultman L., Gogotsi Y., Barsoum M. W. Two-Dimensional Transition Metal Carbides // *ACS Nano* 2012, 6, 1322–1331.
- [3] Koo C. M., Gogotsi Y. Electromagnetic Interference Shielding with 2D Transition Metal Carbides (MXenes) // *Science* 2016, 353, 1137–1140.
- [4] Seh Z. W., Fredrickson K. D., Anasori B., Kibsgaard J., Strickler A. L., Lukatskaya M. R., Gogotsi Y., Jaramillo T. F., Vojvodic A. Two-Dimensional Molybdenum Carbide (MXene) as an Efficient Electrocatalyst for Hydrogen Evolution // *ACS Energy Lett.* 2016, 1, 589–594.

- [5] Weng H., Ranjbar A., Liang Y., Song Z., Khazaei M., Yunoki S., Arai M., Kawazoe Y., Fang Z., Dai X. Large-Gap Two-Dimensional Topological Insulator in Oxygen Functionalized MXene // *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* 2015, 92, 075436.
- [6] Sanchez J. M., de Fontaine D. The fcc Ising Model in the Cluster Variation Approximation // *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* 1978, 17, 2926–2936.
- [7] Walle A., Ceder G. Automating First-Principles Phase Diagram Calculations // *J. Phase Equilib.* 2002, 23, 348–359.
- [8] Connolly J. W. D., Williams A. R. Density-Functional Theory Applied to Phase Transformations in Transition-Metal Alloys // *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* 1983, 27, 5169.

Эффекты синхронизации с ВЧ полем при конверсии тока волны зарядовой плотности на контакте

С. Г. Зыбцев, В. Я. Покровский

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

Скольжение волны зарядовой плотности (ВЗП) в квазиодномерных проводниках происходит в периодическом потенциале пиннинга (ППП) и сопровождается генерацией узкополосного шума. ППП может также проявляться в эффекте синхронизации ВЗП с внешним электромагнитным излучением — появлении ступенек Шапиро (СШ) на ВАХ.

На контакте движущейся ВЗП с нормальным металлом или ВЗП-ВЗП должен происходить процесс проскальзывания фазы (ПФ) — конверсия тока ВЗП в одночастичный ток или наоборот. При этом происходит периодический разрыв ВЗП (локальное подавление амплитуды), сопровождаемый деформацией ВЗП в некоторой окрестности области ПФ. ПФ также может давать вклад в генерацию узкополосного шума. Как ПФ, так и движение ВЗП в ППП характеризуются т.н. фундаментальной частотой скольжения ВЗП, f_g , равной скорости ВЗП, делённой на период ППП.

ПФ проявляется в появлении дополнительного напряжения на контакте, V_{ps} . Вклад в V_{ps} может вносить как сдвиг химического потенциала квазичастиц при деформации ВЗП, так и изменение сопротивления в об-

ласти, в которой происходит деформация ВЗП, которое может многократно превосходить вклад сдвига химпотенциала, то есть V_{ps} в собственном смысле [1, 2].

Возможность синхронизации ПФ с внешним ВЧ полем рассматривалась теоретически [3], однако экспериментальных исследований «контактных СШ» до сих пор не проводилось. В докладе мы представим результаты исследований воздействия ВЧ поля на конверсию тока на микроконтактах NbS_3-NbS_3 и NbS_3-In .

Моноклинный политип NbS_3 примечателен тем, что в нём ВЗП существует при комнатной температуре. Скольжение этой ВЗП характеризуется высокой когерентностью, наблюдаются СШ с высокой степенью синхронизации [4]. Все исследования были проведены при комнатной температуре, что намного упростило эксперименты, особенно — подачу ВЧ поля.

Были исследованы контакты NbS_3-NbS_3 на «крестах» — 4-х зондовых структурах, образованных парой скрещенных вискеро́в. Сначала исследовались СШ при пропускании тока I вдоль каждого вискера. Затем 4-х зондовым методом измерялись зависимости дифференциального сопротивления контакта R_{cont} от I . На них также наблюдалась система СШ, но они были перевёрнутыми – выглядели как провалы, обрамлённые зигзагообразными крыльями. После исследования этих структур мы модифицировали эксперимент, заменив один из вискеро́в на индиевую проволоку, то есть нормальный металл. На полученных структурах NbS_3-In наблюдались аналогичные результаты. Ниже мы приводим характеристики одной из таких структур. На рис. 1 представлены токовые зависимости сопротивления вискера и микроконтакта к нему, в том числе, при воздействии ВЧ напряжения. Без воздействия ВЧ поля в области порогового тока наблюдается рост R_{cont} . Результат можно связать с ростом поперечного сопротивления при разрушении поперечной когерентности ВЗП [5, 6]. С ростом I при приближении к СШ наблюдается спад R_{cont} , который можно объяснить восстановлением поперечной когерентности ВЗП при синхронизации. Зигзагообразный же характер особенностей, очевидно, связан растяжением-сжатием ВЗП вблизи контакта: если частота ПФ диктуется частотой f ВЧ поля, а f_f — чуть меньше, ВЗП будет растягиваться при движении в сторону контакта. Если f_f чуть выше f , ВЗП будет сжиматься. Значит, с ростом I , при приближении к СШ в об-

ласти ПФ будет наблюдаться сначала растяжение, затем сжатие ВЗП. Таким образом, СШ в виде зигзага указывают на синхронизацию ПФ с ВЧ полем.

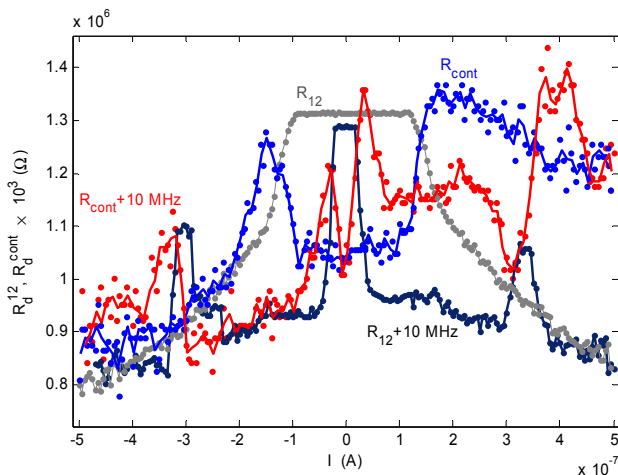


Рис. 1. Зависимости от тока дифференциального сопротивления вискера NbS_3 без облучения (« R_{12} ») и при воздействии ВЧ поля с частотой $f = 10 \text{ МГц}$ (« $R_{12}+10 \text{ МГц}$ »), а также контакта $\text{NbS}_3\text{-In}$ без облучения (« R_{cont} ») и при воздействии ВЧ поля (« $R_{cont}+10 \text{ МГц}$ »). R_{cont} умножено на 1000

Отметим асимметрию зависимостей $R_{cont}(I)$ (рис. 1), означающую неэквивалентность процессов ПФ при движении ВЗП в сторону контакта и от него. Меньшее значение R_{cont} наблюдается при отрицательном напряжении на In. Если ВЗП имеет отрицательный заряд (что разумно), она движется в сторону контакта и сжимается, упёршись в ПФ. При этом в области сжатия должна возрастать концентрация свободных электронов, что и может объяснить снижение R_{cont} .

Также были измерены ВАХ структур $\text{NbS}_3\text{-NbS}_3$ в двухконтактной конфигурации при пропускании тока через оба вискера и контакт между ними. Неожиданно, при воздействии ВЧ поля наблюдались только СШ, соответствующие условию $f_f = f$ для вискера *меньшего* сечения. В области нелинейных токов для обоих вискеров, образующих контакт, протекающие токи через него возможно только через процесс ПФ на обоих виске-

рах, но фундаментальные частоты f_f для них будут разные (при одном токе f_f для тонкого будет выше). Данный результат может означать, что возникновение на контакте ПФ с частотой f_f для более тонкого образца, препятствует синхронизации ВЗП в более толстом.

Работа выполнена в рамках проекта № 22-12-00319 РНФ.

Список литературы

- [1] Зайцев-Зотов С. В., *Письма ЖЭТФ* 46, 453 (1987).
- [2] Itkis M. E., Nad' F. Ya., Monceau P. and Renard M., *J. Phys.: Cond. Matt.* **5**, 431 (1993).
- [3] Jelić D., Vjeli A., and Batistić I., *Phys. Rev. B* **38**, 4045 (1988).
- [4] Zybtev S. G. et al., *Phys. Rev. B.* **101**, 115425 (2020).
- [5] Артеменко С. Н., *ЖЭТФ* **111**, 1494 (1997).
- [6] Sinchenko A. A., Monceau P. and Crozes T., *Phys. Rev. Lett.* **108**, 046402 (2012).

Электронный транспорт в металлическом придате стронция и джозефсоновских гетероструктурах на его основе

Ю. В. Кислинский^{1*}, Н. В. Дубицкий, К. И. Константиян¹,
И. Е. Москаль¹, А. М. Петржик¹, А. В. Шадрин^{1,2}, Г. А. Овсянников¹

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

²МФТИ, г. Долгопрудный, Московская область, Россия

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

Оксиды металлов с 5d орбиталями привлекают интерес из-за наличия сильного спин-орбитального и электрон-электронного взаимодействий в них. Известны соединения $\text{Sr}_{n+1}\text{Ir}_n\text{O}_{3n}$, которые при определенном химическом составе становятся металлами, например, SrIrO_3 ($n = \infty$). Зонные структуры SrIrO_3 (SIO3) рассчитывались с учетом корреляции электронов [1], или спин-орбитального взаимодействия в Ir [2]. Для тонких пленок SIO3 экспериментально показано, что их проводимость зависит от кристаллических параметров подложек, на которые они напылялись [3].

В нашей работе приводятся результаты электрических измерений для тонких пленок SrIrO_3 , (SiO_3) , а также для гетероструктур $\text{Nb/Au/SrIrO}_3/\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$: высокотемпературный сверхпроводник (SiO_3) — металлический сверхпроводник, в которых обнаружен эффект Джозефсона. Обсуждаются модели транспорта носителей тока в пленках SiO_3 и в гетероструктурах.

Тонкие пленки SiO_3 с толщинами около 90 nm напылялись эксимерным лазером или катодным распылением на подложки: титаната стронция (001) SrTiO_3 (STO), танталата алюминия и стронция (001) $\text{LaAlO}_3+\text{Sr}_2\text{AlTaO}_6$ (LSAT), галлата неодима (110) NdGaO_3 (NGO), алюмината лантана (001) LaAlO_3 (LAO). Кристаллическую решетку пленки SiO_3 можно рассматривать как кубическую с параметрами $a = b = c = 0.398$ nm. Параметры кристаллической решетки подложки определяют величину деформации пленки. Подложки STO, LSAT, NGO и LAO имели a -параметры решетки: 0.390, 0.388, 0.386 и 0.378 nm, соответственно. Наибольшее сжимающее напряжение на тонкие пленки SiO_3 оказывали подложки LaAlO_3 , а наименьшее — SrTiO_3 .

Тонкие пленки SiO_3 , напыленные на подложки LAO, имели наибольшие удельные сопротивления ρ , а на подложки STO — наибольшую удельную проводимость $\sigma = 1/\rho$. Зависимости ρ и σ от температуры для пленок SiO_3 показаны на рисунках 1a и 1b.

Для зависимостей $\rho(T)$ пленок на подложках STO и LSAT характерны кривые с минимумом и ростом сопротивления с понижением температуры, как показано на рисунке 1a. В модели трехмерной слабой локализации носителей заряда [4] температурная зависимость записывается как: $\rho(T) \approx \rho_0 - (e^2/\pi^2\hbar) \cdot c_{3D} \cdot T^{3/4}$, где e — элементарный заряд, ρ_0 — экспериментальная константа. Аппроксимации температурных зависимостей сопротивления выражением: $\rho(T) \sim \rho_0 - cT^{3/4}$, где ρ_0 и c — свободные параметры, показаны на рисунке 1a. Температурные зависимости сопротивления с минимумом наблюдались и ранее [5].

Для пленок на подложках NGO и LAO характерен рост проводимости с ростом температуры, как показано на рис. 1b. Для тонких пленок алюминия наблюдались зависимости вида $\sigma(T) \sim (e^2/\pi^2\hbar) \cdot (k/hD)^{1/2} \cdot T^{1/2}$, где D — коэффициент диффузии [6]. В этой работе применялась модель трехмерного неупорядоченного металла с минимумом плотности состояний на уровне Ферми. Выражение $\sigma = \sigma_0 + cT^{1/2}$, где σ_0 и c — свободные параметры, использовалось для аппроксимации данных $\sigma(T)$ на рисунке 1b.

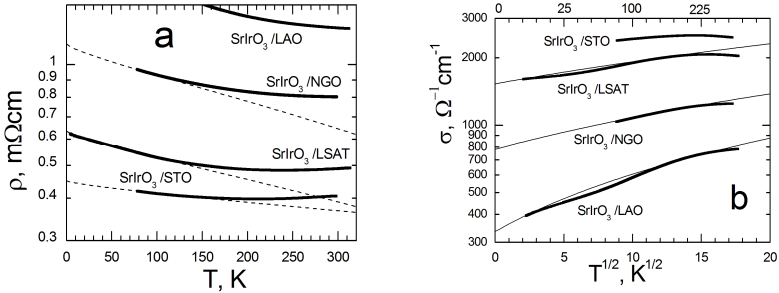


Рис. 1. Экспериментальные температурные зависимости проводимости тонких пленок SIO3 на различных подложках — точки; а) аппроксимации удельных сопротивлений, в модели трехмерной слабой локализации — пунктирные линии; б) аппроксимации удельных проводимостей в модели неупорядоченного металла — сплошные линии

Гетероструктуры Nb/Au/ SrIrO₃/YBa₂Cu₃O₇ с прослойками SIO3 толщиной $t = 15 \text{ nm}$ и площадями переходов A от 100 до 2500 μm^2 изготовлены по технологии, аналогичной последовательности операций для структур Nb/Au/YBa₂Cu₃O₇ [7]. На вольтамперных характеристиках гетероструктур с прослойками наблюдался сверхпроводящий ток плотностью $J_C \sim 10 \text{ A/cm}^2$. Величина критического тока I_C гетероструктур осциллировала с магнитным полем с периодами порядка 10 G, что указывает на джозефсоновскую природу этого тока. Нормальные сопротивления единицы площади у гетероструктур малы $R_N A \approx (3 \div 5) \cdot 10^{-8} \Omega \text{ cm}^2$, по сравнению с сопротивлениями структур без прослойки, у которых $R_N A \sim (0.5-1.5) \cdot 10^{-5} \Omega \text{ cm}^2$. Характерные напряжения гетероструктур с SIO3 прослойкой были около $I_C R_N \sim 0.5 \mu\text{V}$, что меньше, чем у структур без прослойки $I_C R_N \sim 70 \mu\text{V}$, из работы [7].

При напылении SIO3 на YBa₂Cu₃O₇, параметры решетки которого: $a \approx b \approx 0.39 \text{ nm}$ — мало рассогласование решеток. Тогда, из рисунка 1а, сопротивление SIO3 в прослойке — около $\rho \sim 0.5 \div 1 \text{ m}\Omega \text{ cm}$. Оценка омического сопротивления прослойки толщиной 15 nm дает $R_N A = \rho t \leq 2 \cdot 10^{-9} \Omega \text{ cm}^2$, величину на порядок меньшую, чем в эксперименте.

Для транспорта в гетероструктурах Nb/Au/SrIrO₃/YBa₂Cu₃O₇ предложена модель сверхпроводник (S) — нормальный металл (N) — переход Шоттки — сверхпроводник (S). Сверхпроводник p-типа YBa₂Cu₃O₇

образует омический контакт с нормальным металлом р-типа SiO_3 . На границе металл р-типа с низкой концентрацией носителей SiO_3 — металл n-типа Au/Nb образуется барьер Шоттки с обедненной областью в SiO_3 . На барьере Шоттки возникает большая часть сопротивления $R_{\text{N}}A$. При этом малые величины $I_{\text{C}}R_{\text{N}}$ в гетероструктурах с прослойкой SiO_3 объясняются моделью $S - N - S$.

В итоге нами получен один из наиболее низкоомных контактов к высокотемпературному сверхпроводнику $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ с сопротивлением единицы площади порядка $5 \cdot 10^{-8} \Omega \text{ cm}^2$.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 23-49-10006.

Список литературы

- [1] Moon S. J., Jin H., Kim K. W. et al., *Physical Rev. Lett.* **101**, 226402 (2008).
- [2] Ahsan Zeb M., Hae - Young Kee, *Physical Rev. B* **86**, 085149 (2012).
- [3] Zhang L., Liang Q., Xiong Y. et al., *Physical Rev. B* **91**, 035110 (2015).
- [4] Lee P. A., Ramakrishnan T. V., *Reviews on Modern Phys.* **57**, 287 (1985).
- [5] Kislinskii Yu. V., Ovsyannikov G. A. et al., *Physics of the Solid State* **57**, 2519 (2015).
- [6] Gershenson M. E., Gubankov V. N., Falei M. I., *Sov. Phys. JETP* **63**, 1287 (1986).
- [7] Komissinskiy P., Ovsyannikov G. A. et al. *Physical Rev. B* **78**, 024501 (2008).

Свойства метастабильных состояний в 1T-TaS_2 материале с волнами зарядовой плотности

А. Ю. Кунцевич, Е. В. Таркаева, М. И. Блуменау

ФИАН, г. Москва, Россия

1T-TaS_2 — модельный слоистый квазидвумерный материал, в котором реализуются фазы волн зарядовой плотности (ВЗП) — соразмерная, почти соразмерная, несоразмерная, с фазовыми переходами первого рода между ними. Самой низкотемпературной является фаза соразмерной ВЗП с 13 атомами Ta на ячейку [1]. Недавно было установлено, что пу-

тем создания неравновесных условий: засветки [2], электрического импульса, сверхбыстрого охлаждения [3] можно перевести низкотемпературное состояние в персистентные метастабильные состояния, характеризующиеся перемежающимися областями соразмерной ВЗП, разделенными доменными стенками [4].

Было произведено отшелушивание монокристаллов $1T\text{-TaS}_2$ на подложку и комплексное исследование метастабильных состояний транспортными и опто-транспортными методами.

В частности, использование оригинальной методики оптический памп/резистивный проб [5], позволило существенно продвинуться в понимании релаксации скрытого состояния, существовавшем ранее [6]. Так, помимо обычной достаточно медленной релаксации, носящей экспоненциальный характер по времени, что свидетельствует об активационном характере, наблюдалась логарифмическая релаксация, различимая на малых временах (наносекунды — миллисекунды). Наблюдение данной релаксации показывает стекольный и коррелированный характер скрытого состояния.

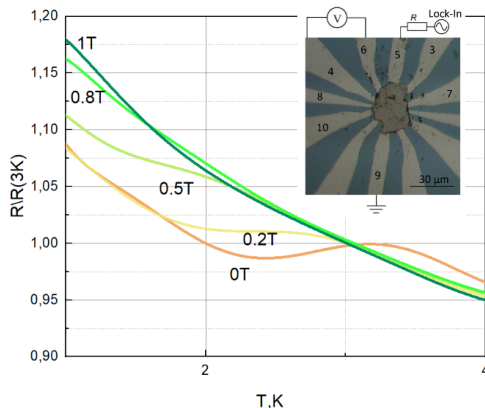


Рис. 1 Вид образца (вставка) и примеры температурных зависимостей в переключенном состоянии

Другим фундаментальным наблюдением являются признаки сверхпроводимости, наблюдавшиеся нами в переключенном состоянии в со-

единении $\text{Ta}(\text{S}_{0.9}\text{Se}_{0.1})_2$. Температура сверхпроводящего перехода составляла порядка 3К, а характерные магнитные поля несколько Т. То обстоятельство, что не при любом переключении наблюдается сверхпроводимость, а также, что падение сопротивления не полное, указывает на то, что для достижения сверхпроводящего состояния нужна повышенная плотность доменных стенок (рис. 1). По всей видимости, наличие небольшого селена также необходимо, поскольку оно повышает плотность состояний на уровне Ферми [7].

Работа поддержана грантом РФФ 23-12-00340.

Список литературы

- [1] Wilson J. A., Di Salvo F.J. & Mahajan S., *Advances in Physics* **24**, 117–201 (1975).
- [2] Stojchevska L. et al., *Science*, **344**, 177–180 (2014).
- [3] Yoshida M., Zhang Y., Ye J. et al., *Scientific reports*, **4**, 7302, (2014).
- [4] Gerasimenko Y., Karpov P., Vaskivskiy I. et al, *npj Quantum Materials*, **4**, 32 (2019).
- [5] Blumenau M. I., Kuntsevich A. Yu., *Journal of the Optical Society of America B* **41**(4), 1060-1068 (2024)
- [6] Vaskivskiy I., Gospodaric J., Brazovskii S. et al., *Science Advances*, **1**(6), e1500168 (2015).
- [7] Xu P., Piatek J., Lin P.-H. et al., *Physical Review B* **81**, 172503 (2010).

Коллективный характер низкотемпературных фотопроводимости и проводимости, а также пиннинга волны зарядовой плотности в квазидномерном проводнике $\sigma\text{-TaS}_3$

В. Е. Минакова, С. В. Зайцев-Зотов

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

Данная работа подводит итог цикла работ, связанных с изучением природы низкотемпературных проводимости и фотопроводимости пайерлсовского проводника $\sigma\text{-TaS}_3$ [1–5]. Возможность решения основной про-

блемы — разделения вкладов одночастичных носителей тока и коллективных возбуждений волны зарядовой плотности (ВЗП) в низкотемпературную омическую проводимость — появилась с обнаружением инструментов изменения соотношения между квазичастичной и солитонной составляющими проводимости. Первый инструмент — освещение — вызывает рост концентрации неравновесных квазичастиц, возбуждая их над пайерлсовской щелью, что приводит, в частности, к увеличению омической проводимости, то есть к появлению фотопроводимости [1]. Вторым инструментом — одноосное растяжение — вызывает появление дополнительных солитонов, поскольку растяжение увеличивает степень отклонения волнового вектора ВЗП [6] от четырехкратной соизмеримости, к которой он приближается с понижением температуры T [7, 8].

Использование освещения позволило показать, что различие характера проводимости σ -TaS₃ при высоких ($100 \lesssim T \lesssim 220$ К) и низких ($T \lesssim 80$ К) температурах обусловлено различной природой основных носителей тока [2]. В области высоких температур проводимость обусловлена одночастичными носителями (квазичастицами), а в низкотемпературной области преобладает вклад коллективных возбуждений (солитонов), имеющих более низкую энергию активации.

Неравновесные квазичастицы, возбужденные светом, дают значительный вклад в проводимость, при этом зависимость фотопроводимости от T имеет характерный максимум при $T \approx 60$ К, разделяющий области линейной и квадратичной рекомбинации этих неравновесных носителей [2]. При растяжении на этой зависимости появляется второй максимум при $T \approx 30$ К, имеющий неодночастичное происхождение [4]. Анализ полученных результатов показал, что фотопроводимость, как и проводимость, можно разделить на высокотемпературную при $60 \lesssim T \lesssim 77$ К и низкотемпературную при $T \lesssim 45$ К. Первая осуществляется неравновесными квазичастицами, для нее работают законы столкновительной рекомбинации [2]. Вторая имеет коллективную природу и свои законы. Значит, вполне уместно называть высокотемпературный максимум фотопроводимости квазичастичным, а низкотемпературный — солитонным. О возможности существования неодночастичной фотопроводимости в K_{0.3}MoO₃ сообщалось в работе [9], хотя интерпретация результатов с помощью такой модели оказалась ошибочной. Предположение базировалось на том, что фотовозбуждение неравновесных электронов

и дырок также может изменять концентрацию солитонов и тем самым давать коллективный вклад в фотопроводимость, которую можно рассматривать как «коллективную фотопроводимость». По нашему мнению, в TaS₃ такая коллективная фотопроводимость при отсутствии растяжения слишком мала и практически не заметна на фоне одночастичной фотопроводимости и при высоких температурах $60 \lesssim T \lesssim 77$ К, и даже при $T \lesssim 45$ К, где превалируют солитоны. Растяжение значительно увеличивает их концентрацию за счет появления дополнительных (по отношению к нерастянутому состоянию) солитонов из-за роста степени несоизмеримости ВЗП при растяжении [6], при этом вклад коллективной фотопроводимости заметно растет и становится сравнимым с одночастичным вкладом, что и приводит к появлению дополнительного, схожего по величине солитонного максимума фотопроводимости при $T \approx 30$ К. Вывод о двухкомпонентной природе фотопроводимости был сделан благодаря экспериментально обнаруженному факту резкой смены размерности пиннинга ВЗП D при изменении T .

Известно [10], что размерность пиннинга зависит от размеров образца: в объемных образцах должен наблюдаться 3D-пиннинг, если поперечные размеры образца меньше поперечной длины фазовой корреляции ВЗП — 1D-пиннинг. Между пороговым полем начала скольжения ВЗП, E_T , и омической проводимостью, G , существует корреляция: $E_T \propto G^\alpha$ [1]. Величина α отражает размерность пиннинга: $\alpha = 1/3$ соответствует 1D-пиннингу, $\alpha = 3$ — 3D-пиннингу ВЗП [10]. Ранее зависимость $E_T(G)$ была получена нами для сравнительно тонких образцов *o*-TaS₃ [3]. Для двух образцов показатель степени $\alpha = 1/3$ указывал на случай 1D-пиннинга и не менялся при всех T , (синие и зеленые значки на рис. 1). Обнаруженная аналогия между влиянием растяжения и освещения на проводимость *o*-TaS₃ [4] позволила получить зависимость $\alpha(T)$ для объемного образца (в условиях растяжения и без него) в более широком диапазоне температур. Эта зависимость демонстрирует явно выраженный 1D-3D-переход (красные кресты на рис. 1), что коррелирует с тенденцией к 1D-3D-переходу для ряда сравнительно тонких, но все же, по видимому, 3D-образцов, изученных при отсутствии растяжения, см. рис. 1. Отсюда следует вывод, что размерность пиннинга ВЗП в *o*-TaS₃ кардинально меняется с изменением T , а именно:

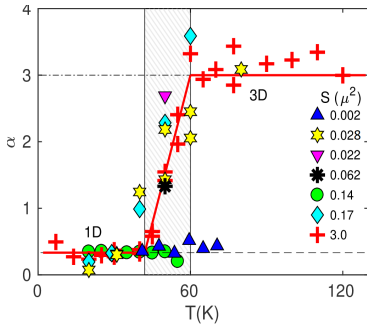


Рис. 1. Температурная зависимость показателя степени α для образцов с разной площадью поперечного сечения S

1) При $T \gtrsim 60$ К в объемных образцах наблюдается 3D-пиннинг. В экранировании ВЗП участвуют доминирующие в этой температурной области квазичастицы.

2) При уменьшении температуры в интервале $40 \lesssim T \lesssim 60$ К в таких образцах наблюдается переход от 3D к 1D-пиннингу ВЗП.

3) При $T \lesssim 40$ К наблюдается 1D-пиннинг для всех образцов.

По аналогии с [1] приходим к заключению: эффект уменьшения размерности пиннинга ВЗП с понижением температуры связан с изменением

условий экранировки электрических полей, возникающих при деформации ВЗП, из-за смены типа основных экранирующих носителей тока с одночастичных на коллективные носители.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 22-42-09018).

Список литературы

- [1] Zatsev-Zotov S. V., Minakova V. E., *Pis'ma v ZhETP.*, **79**, 550 (2004).
- [2] Zatsev-Zotov S. V., Minakova V. E., *Phys. Rev. Lett.*, **97**, 266404 (2006).
- [3] Zaitsev-Zotov S. V., Minakova V. E., *J. Phys. IV.*, **131**, 95 (2005).
- [4] Минакова В. Е., Талденков А. Н., Зайцев-Зотов С. В., *Письма в ЖЭТФ.*, **110**, 178 (2019).
- [5] Минакова В. Е., Зайцев-Зотов С. В., *Журнал радиоэлектроники*, №. 12, (2023).
- [6] Zybtshev S. G., Pokrovskii V. Ya., *Physica B* **460**, 34 (2015).
- [7] Wang Z.-Z., Salva H., Monceau P., Renard M., Roucau C., Ayroles R., Levy F., Guemas L., Meerschaut A., *J. Physique Lett.* **44**, 311 (1983).
- [8] Inagaki K., Tsubota M., Higashiyama K. *et al.*, *J. Phys. Sos. Jpn.*, **77**, 093708 (2008).
- [9] Ogawa N., Miyano K., Brazovskii S.A., *Phys. Rev. B* **71**, 075118 (2005).
- [10] Zaitsev-Zotov S. V., *Physics – Uspekhi*, **47**, 533 (2004).

Аномальная фаза квантовых осцилляций межслоевой проводимости слоистых металлов в магнитном поле

Т. И. Могилюк^{1,*}, П. Д. Григорьев²

¹НИИЦ Курчатовский институт, Россия

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

*E-mail: Staras@mail.ru

Целью нашего исследования было объяснение разного значения магнитного поля, при котором наблюдаются узлы биений квантовых осцилляций намагнитченности и межслоевой проводимости в веществе (BEDT-TTF)₄[Ni(dto)₂]. В экспериментальной работе [1] показывается, что стандартная теория Лифшица–Косевича [2] не объясняет простым образом (см. рис. 1) сдвиг фаз биений вышеупомянутых типов осцилляций в $\pi/2$ друг относительно друга.

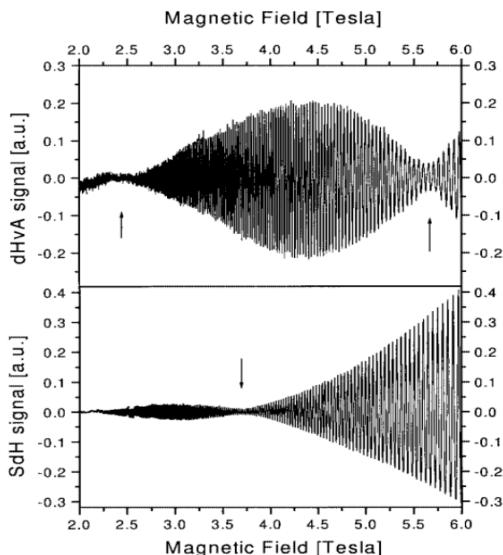


Рис. 1. Осцилляции де Гааза ван Альфена (сверху) и шубниковские (снизу) при температуре $T=30$ мК с наблюдаемыми узлами биений (указаны стрелками) в органическом металле (BEDT-TTF)₄[Ni(dto)₂]

Для анализа мы используем выведенные в рамках самосогласованного борновского приближения выражения из работы [3], где спектр электронов для простоты брался как в модели сильной связи, примеси точечными случайно распределёнными по объёму металла, а кулоновским взаимодействием электронов пренебрегалось. Выражение для межслоевой проводимости в работе [3] было получено по формуле Кубо. Используя это выражение, мы показываем, что когда ширина электронных уровней в нулевом магнитном поле превышает туннельный интеграл межслоевого перескока, приблизительно выполняется соотношение на положение узлов биений как на рис. 1 из работы [1], и чем выше их отношение такой ширины уровней к туннельному интегралу, тем ближе теоретическое предсказание к экспериментальному результату. Также выражение для межслоевой проводимости удовлетворительно объясняет положение узлов биений для межслоевой проводимости, изображённое на рис. 3 в работе [4]. В этом случае теория хорошо описывает экспериментальный результат, когда ширина электронных уровней в нулевом магнитном поле много меньше туннельного интеграла межслоевого перескока.

Список литературы

- [1] Schiller M., Schmidt W., Balthes E. et al., *Europhys. Lett.*, **51** (1), 82 (2000).
- [2] Shoenberg D., in *Magnetic Oscillations in Metals* (1984).
- [3] Mogilyuk T. I., Grigoriev P. D., *Phys. Rev. B* **98**, 045118 (2018).
- [4] Grigorev P.D., Kartsovnik M.V. et al., *Phys. Rev B* **65**, 060403 (2002).

Высокочастотные аномалии модуля Юнга в висceraх квазиодномерных проводников с волной зарядовой плотности

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

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

Исследования упругих свойств квазиодномерных проводников теряют актуальности уже несколько десятилетий. Экспериментально наблюдались различные упругие аномалии, связанные как с однородной, так и с неоднородной деформацией ВЗП. К таким аномалиям относятся снижение упругих модулей кристалла при депиннинге ВЗП [1], дефор-

мация кристалла под действием деформации ВЗП, вызванной электрическим полем [2, 3] или температурным [4] воздействием. При этом наблюдаемые аномалии модулей упругости вискеро́в, связанные, в широком смысле, с формированием и перестройкой в них волн зарядовой плотности (ВЗП), до сих пор не нашли единого объяснения. Наиболее общим качественным описанием кристалла с ВЗП является модель двух связанных между собой пружин, представляющая ВЗП как упругий кристалл внутри кристаллической решетки.

В настоящей работе мы приводим результаты исследований высокочастотных аномалий упругих модулей в подвешенных нитевидных кристаллах квазиодномерных проводников ромбического TaS_3 и NbSe_3 в зависимости от температуры.

Измерения механических колебаний вискеро́в TaS_3 проводились с применением методики гетеродинамирования [5], позволяющей детектировать резонансные моды колебаний. Были исследованы вискеро́ы длиной 770 и 500 мкм и сечением $\sim 1.5 \text{ мкм}^2$. Из набора частотных зависимостей напряжения смещения при разных температурах было определено, что в интервале частот от 10 кГц до 1 МГц частота резонансных мод слабо зависит от температуры, менее 1 % на 100 К. Однако, для резонансной моды (по-видимому, гармоники изгибной моды) на частоте 60 кГц в области $T = 120 \text{ К}$ было обнаружено локальное уменьшение частоты на 6 % (рис. 1).

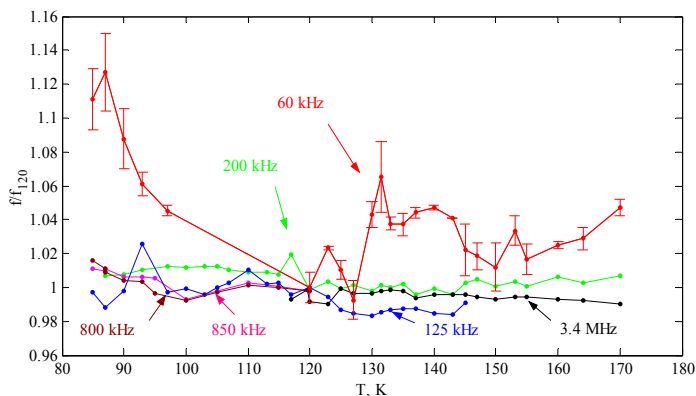


Рис. 1. Зависимость частот нескольких резонансов от температуры для образца длиной 770 мкм. Частоты резонансов нормированы на значение частоты при 120 К. Амплитуда напряжения подаваемого на образец $U_{p-p} = 1.5 \text{ В}$, амплитуда модуляции 3 кГц

На другом образце при той же температуре было обнаружено локальное снижение частоты изгибной моды на 2.5 % на частоте 40 кГц. Данные аномалии повторяют особенность на температурной зависимости действительной части диэлектрической проницаемости TaS₃ для той же частоты [6]. Также было обнаружено, что с ростом температуры на частотах от 1 МГц и выше значительно (на ~2 % на 100 К для звуковой моды и на ~11 % на 100 К — для крутильной) снижается частота резонансов, что превышает ожидаемую величину снижения частоты в результате теплового расширения образца. Для звуковой моды колебаний снижение частоты соответствует полученной ранее зависимости модуля Юнга от температуры в TaS₃ [7], для крутильных — температурной зависимости модуля сдвига [8].

Также нами была разработана комплексная методика исследования влияния механических вибраций на вискеры квазиодномерных проводников [9]. Метод позволяет регулировать натяжение вискера и возбуждать в нём высокочастотные механические вибрации (до ~60 МГц) с помощью пьезоактуаторов. Мы использовали данный метод для исследования огромной аномалии модуля Юнга в соединении NbSe₃ в диапазоне десятков МГц [10]. Значительным преимуществом перед методикой [10], в которой возбуждение и детектирование изгибных колебаний было основано на электростатических эффектах, является возможность использовать различные резонансные моды и изучить частотную зависимость данной аномалии.

Были измерены частотные характеристики образца NbSe₃ длиной 475 мкм и сечением ~ 1 мкм² в диапазоне от 500 кГц до 60 МГц в интервале температур от 20 К до 160 К. В районе температуры 45 К было обнаружено увеличение частоты резонанса 6.1 МГц на 0.7%. Оценки показали, что этот резонанс относится к возбуждению стоячей продольной звуковой волны в образце. Величина аномалии модуля Юнга составила 1.4 %, что на порядок ниже, чем в [10], на частоте изгибной моды 70 МГц при длине образца 2 мкм, и температуре 46 К. На частотах, соответствующих другим модам, значимых аномалий обнаружено не было. Таким образом, предварительно подтверждено предположение [10] об упругом взаимодействии колебаний ВЗП на плазменной частоте и колебаний решетки.

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

Список литературы

- [1] Brill J. W. “Elastic properties of low-dimensional materials,” in Handbook of Elastic Properties of Solids, Liquids, and Gases, edited by M. Levy, H. E. Bass, and R. R. Stern, Academic Press, San Diego **2**, 143 (2001).
- [2] Hoen S., Burk B., Zettl A. and Inui M., *Phys. Rev. B* **46**, 1874 (1992).
- [3] Pokrovskii V. Ya., Zybtev S. G., and Gorlova I. G., *Phys. Rev. Lett.* **98**, 206404 (2007).
- [4] Golovnya A. V., Pokrovskii V. Ya., Shadrin P. M., *Phys. Rev. Lett.* **88**, 246401 (2002).
- [5] Pokrovskii V. Ya., Nikitin M. V. and Zybtev S. G., *Physica B* **460**, 39 (2015).
- [6] Staresinic D. et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 445231 (2008).
- [7] Mozurkewich G., Jacobsen R. L., *Synthetic Metals* **60**, 137 (1993).
- [8] Xiang X.-D. and Brill J. W., *Phys. Rev. B.* **36**, 2969 (1987).
- [9] Nikitin M. V. et al., *Appl. Phys. Lett.* **118**, 223105 (2021).
- [10] Sengupta Sh. et al., *PRL* **110**, 166403 (2013).

Генерация и детектирование спинового тока в 3d/5d гетероструктурах манганит/иридат

Г. А. Овсянников^{1*}, К. И. Константиныч¹, Г. Д. Ульев^{1,2},
А. А. Климов^{1,3}, И. Е. Москаль¹, Ю. В. Кислинский¹, В. А. Шамаков¹,
А. В. Шадрин^{1,4}, П. В. Лега¹

¹*Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова
Российской академии наук, г. Москва, Россия*

²*Национальный исследовательский университет (Высшая школа экономики),
Физический факультет, г. Москва, Россия*

³*Российский технологический университет — МИРЭА, г. Москва, Россия*

⁴*Московский физико-технический институт (национальный
исследовательский университет), г. Долгопрудный, Россия*

^{*}*E-mail gena@hitech.cplire.ru*

Контакт между 5d и 3d оксидами переходных металлов обеспечивает уникальную границу, в которой происходит возбуждение спинового тока при СВЧ воздействии. Прецессия намагниченности ферромагнетика, вызванная воздействием СВЧ магнитного поля в условиях ферромаг-

нитного резонанса, приводит к протеканию через границу ферромагнетик/нормальный (не магнитный) металл чисто спинового тока (без переноса заряда).

В настоящей работе представлены результаты экспериментальных исследований параметров ферромагнитного резонанса, спинового тока и спинового магнитосопротивления границы гетероструктур $\text{SrIrO}_3/\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ и $\text{Pt}/\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$, которые определяют спиновый транспорт в гетероструктурах.

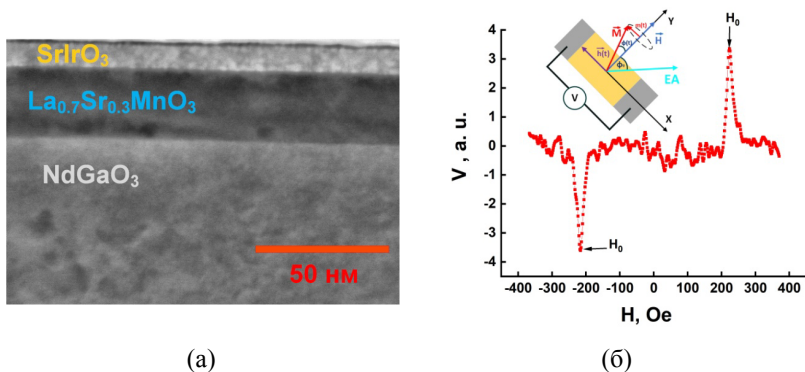


Рис. 1. а) Поперечное сечение $\text{SrIrO}_3/\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ гетероструктуры на подложке NdGaO_3 , полученное на просвечивающем электронном микроскопе. б) Магнитно-полевая зависимость отклика $\text{SrIrO}_3/\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ гетероструктуры $f = 2.3$ ГГц, $T = 300$ К и мощности излучения 30 мВт

Тонкие эпитаксиальные пленки нанометровой толщины из иридата стронция SrIrO_3 и манганита $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ были выращены на монокристаллической подложке $(110)\text{NdGaO}_3$ с помощью магнетронного распыления при температуре подложки $770\text{--}800$ °С в смеси газов аргона (Ar) и кислорода O_2 с общим давлением 0.3 mBar .

В режиме ферромагнитного резонанса (ФМР) и взаимно перпендикулярных направленных СВЧ и постоянного полей поперек границы возникает «чисто» спиновый ток (нет переноса заряда). Величина спинового тока определяется амплитудой прецессии намагниченности ферромагнетика и спиновой проводимостью границы (spin mixing conductance),

в общем случае имеющая действительную ($\text{Re } g^{\uparrow\downarrow}$) и мнимую ($\text{Im } g^{\uparrow\downarrow}$) части.

Спектр ФМР определялся из зависимости от магнитного поля амплитуды проходящего СВЧ излучения в интервале частот $F=1\text{--}20$ GHz. Из обработке экспериментальных спектров ФМР определялась частотные зависимости резонансного поля $H_0(F)$ и ширины линии $\Delta H(F)$ [1]. Величина реальной части спиновой проводимости определяется из увеличения затухания Гильберта α после напыления SrIrO_3 пленки поверх $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$.

Экспериментальные данные показывают, что затухание для $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ пленки $\alpha_{\text{LSMO}}=2.0\pm 0.2 \cdot 10^{-4}$ после напыления SrIrO_3 увеличивается до значений $\alpha_{\text{SIO/SMO}}=6.7\pm 0.8 \cdot 10^{-4}$. Величина реальной части спиновой проводимости определяется разностью этих значений $\text{Re } g^{\uparrow\downarrow}=(6.0\pm 0.6)\cdot 10^{19} \text{ m}^{-2}$ [1].

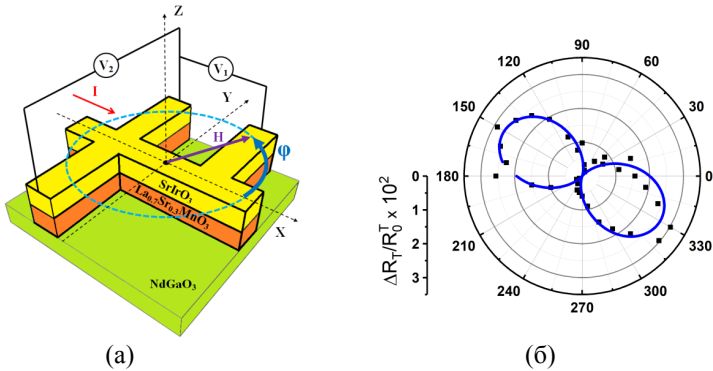


Рис. 2. а) Схематичное изображение гетероструктуры $\text{SrIrO}_3/\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ на подложке (110) NdGaO_3 Ток I задавался в пленку SrIrO_3 вдоль оси X , Регистрировались величины продольного $R_L = V_1/I$ и поперечного $R_T = V_2/I$ сопротивления при пошаговом изменении поля H . б) Зависимости поперечного магнетосопротивления $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ пленки $\Delta R_T/R_0=0.014$, $\varphi_{\text{OT}}=15.4^\circ$

Отношение спинового и зарядового токов определяется безразмерным параметром θ_{SH} — спиновым углом Холла, который можно определить из угловых зависимостей спинового магнетосопротивления в пла-

нарной геометрии. Для гетероструктуры $\text{SrIrO}_3/\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ из измерений поперечного магнитосопротивления спиновый угол Холла оказался существенно выше: $\theta_{SH} \approx 0.35 \pm 0.06$, чем $\theta_{SH} \approx 0.02$ для гетероструктуры $\text{Pt}/\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ [2,3].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-49-10006, <https://rscf.ru/project/23-79-00010>.

Список литературы

- [1] Овсянников Г. А. и др. *Письма в ЖТФ*, **48**, 44 (2022).
- [2] Константиныч К. И. и др. *Физика твердого тела*. **64**, 1429 (2022).
- [3] Ovsyannikov G. A. et al. *Phys. Rev.* **V107**, 144419 (2023).

Волны зарядовой плотности и их взаимодействие в NbS_3 при разных температурах: результаты синхротронных исследований

В. Я. Покровский*, С. Г. Зыбцев

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

**E-mail: vadim.pokrovskiy@mail.ru*

Интерес к квазиодномерному соединению NbS_3 в последние годы сосредоточен на моноклинном политипе (фазе II), в котором наблюдается три волны зарядовой плотности (ВЗП). Известны волновые вектора, \mathbf{q}_0 ВЗП-0 и \mathbf{q}_1 ВЗП-1, существующих при комнатной температуре, а структура ВЗП-2, проявляющейся ниже $T_{P2} = 150$ К, пока не установлена.

В докладе будут представлены недавно полученные результаты рентгеноструктурных исследований NbS_3 -II на дифрактометре ID28 (ESRF, Гренобль, Франция) при температурах от 90 до 500 К. Подтверждены данные о сверхструктурных искажениях решётки, связанных с образованием ВЗП-0 и ВЗП-1, ранее исследованных только методами ПЭМ и СТМ. При этом получены новые данные, в том числе о не наблюдавшихся ранее искажениях. Данные по всем искажениям сведены в таблице.

Низкоразмерные системы

	90–150 К	150–270 К	270–360 К	360–450 К	450–500 К
\mathbf{q}_0	(0.5 0.35 0)		диффузная		
\mathbf{q}_1	(0.5 0.3 0)				
$\mathbf{q}_1'=2\mathbf{q}_0$	(0 0.3 0)		диффузная		
$\mathbf{q}_2=2\mathbf{q}_1$	(0 0.4 0)				
\mathbf{q}_0'				(0.5 0.35 0.5)	
\mathbf{q}_3	диффузная (0,0.5,0)				
\mathbf{q}_4		диффузная (0,0.48,0)			

Охарактеризуем основные полученные результаты.

- Установлена температура $T_{p0} = 450$ К полного исчезновения ВЗП-0 (точнее — ВЗП-0'), определённая ранее только из транспортных измерений.
- Наблюдалась температурные зависимости \mathbf{b}^* -компонент векторов \mathbf{q}_0 и \mathbf{q}_1 (q_0 и q_1); оказалось, что $q_1 + 2q_0 = \text{const} = 1$ (рис. 1). Это указывает на взаимосвязь ВЗП-0 и ВЗП-1. При этом ВЗП-1 не является 2-й гармоникой ВЗП-0.
- Наблюдалось искажение \mathbf{q}_1' с той же \mathbf{b}^* -компонентой $q_1 = 0.3$, которое так можно рассматривать как 2-ю гармонику искажения \mathbf{q}_0 , то есть ВЗП-0.
- Наблюдалось искажение \mathbf{q}_2 , которое можно рассматривать как 2-ю гармонику ВЗП-1 (\mathbf{q}_1).
- Обнаружено, что выше 270 К рефлекс \mathbf{q}_0 становится диффузным. Выше $T_{p1}=360$ К, когда исчезает рефлекс \mathbf{q}_1 , появляется чёткий рефлекс \mathbf{q}_0' с той же \mathbf{b}^* -компонентой. Однако, это новое искажение, поскольку оно имеет компоненту $0.5\mathbf{c}^*$. Оно конкурирует как с \mathbf{q}_0 , так и с сопряженным с ним (см. рис. 1) \mathbf{q}_1 .
- Ниже 270 К искажение \mathbf{q}_1 с компонентами (0.5 0.3 0) сосуществует с искажением $\mathbf{q}_1'=(0 0.3 0)$, являющимся 2-й гармоникой \mathbf{q}_0 .
- Рефлекс \mathbf{q}_0 становится диффузным выше 270 К, одновременно с исчезновением второго порядка \mathbf{q}_1 , что дополнительно свидетельствует о взаимодействии модуляций.

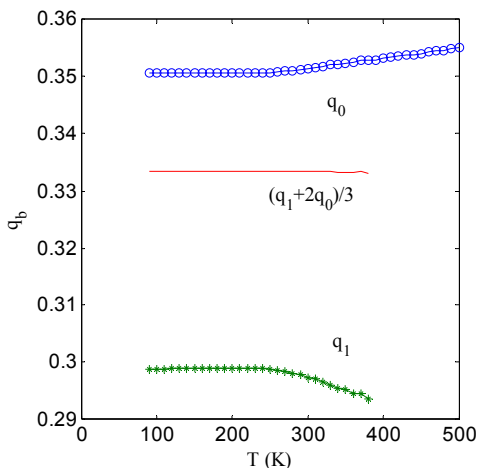


Рис. 1. Температурные зависимости \mathbf{b}^* -компонент искажений \mathbf{q}_0 , \mathbf{q}_1 и величины $(q_1 + 2q_0)/3$

Наиболее неожиданным стало наблюдение диффузных рефлексов, соответствующих *уменьшению* параметра c решётки, которые появляются *выше* $T_{p2}=150$ К (\mathbf{q}_3 и \mathbf{q}_4 в таблице). Наблюдаемые искажения можно рассматривать как флуктуационное появление фазы I, имеющей параметр c примерно в 4 раза меньше. Этот результат позволяет предположить, что исчезновение нелинейной проводимости выше T_{p2} вызвано либо разрушением ВЗП-2, либо размытием порога её депиннинга из-за флуктуаций. Предположение подтверждается и дополняется данными ЯМР [4], согласно которым ниже 150 К происходит вымерзание одной из фононных мод. При этом она остаётся относительно низкочастотной и выше 150 К.

Таким образом, для исчезновения нелинейной проводимости в области T_{p2} первопричиной является не разрушение ВЗП-2, а появление нового искажения *выше* T_{p2} .

Также не имеет аналогов разрушение ВЗП, а именно, ВЗП-0' с $\mathbf{q}=\mathbf{q}_0'$, при *понижении* температуры. В данном случае ниже $T_{p1} = 360$ К возникают конкурирующие с ней ВЗП, а именно, взаимодействующие ВЗП-0 и ВЗП-1.

В целом, результаты дают основания переосмыслить картину волн зарядовой плотности в NbS_3 -II и их взаимного влияния. Полученные структурные данные также позволяют сделать предположения и о транспортных свойствах данного политипа NbS_3 . Например, можно ожидать температурный гистерезис в транспортных свойствах в области температур 250-350 К. Можно также предположить, что наблюдать скольжение ВЗП-0 одновременно с ВЗП-1 вряд ли возможно, поскольку наблюдавшаяся нелинейность ВАХ выше $T_{p0}=450$ К [5] связана со скольжением другой ВЗП, ВЗП-0', разрушающейся ниже T_{p0} .

Работа выполнена в рамках проекта РФФ № 22-12-00319.

Список литературы

- [1] Покровский В. Я., Зыбцев С. Г., М.В. Никитин и др., УФН **183**, 33 (2013).
- [2] M.A. Bloodgood, P. Wei, E. Aytan et al., APL Mat. **6**, 026602 (2018).
- [3] Мартовицкий В. П., Клоков А. Ю., Покровский В. Я., *Письма ЖЭТФ* **118**,191 (2023).
- [4] Семакин А. С., Мухамедшин И. Р., Зыбцев С. Г., Покровский В. Я., *Письма в ЖЭТФ* **119**, 432 (2024).
- [5] Zybtev S. G., Pokrovskii V. Ya., Nasretdinova V. F., Zaitsev-Zotov S. V., Zupanić E., van Midden M., Woei Wu Pai, *J. Alloys and Compounds* **854**, 157098 (2021).

Особые точки в спин-зависимом транспорте молекулярных проводников

Н. М. Шубин, Ю. А. Успенский и А. А. Горбачевич

Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Соответствие между дискретным спектром изолированного квантового проводника и интерференционными особенностями в его транспортных свойствах не представляется тривиальным, особенно при наличии вырожденных (почти вырожденных) состояний. В этом случае резо-

нансы (антирезонансы) взаимодействуют друг с другом и может наблюдаться их слияние. При этом два идеальных резонанса (антирезонанса) сливаются в один с неединичной (ненулевой) прозрачностью, или формируют связанное состояние в континууме [1]. Было показано, что слияние резонансов и антирезонансов [2], может быть соотнесено с особой точкой вспомогательного неэрмитового гамильтониана, связанного с эффективным гамильтонианом Фешбаха открытой системы. Проявление свойств этой особой точки в спектре пропускания молекулярного проводника обещает создание нанoeлектронных устройств с высокой скоростью переключения и низким управляющим напряжением [3].

Для возможности эффективного управления слиянием резонансов требуется наличие вырожденных или почти вырожденных уровней в молекуле. В связи с этим особый интерес вызывают молекулы дирадикалов за счет наличия на уровне Ферми двух (с учетом спина — четырех) вырожденных уровней, заполненных двумя электронами. Поскольку энергия Ферми отвечает максимально возможной энергии заполненного одноэлектронного состояния, то наличие вырождения при этой энергии энергетически невыгодно. В реальных молекулах вырождение снимается одним из трех способов: деформация молекулы (эффект Яна–Теллера), переход молекулы в триплетное состояние (спин-поляризованное состояние с параллельной ориентацией спинов двух электронов), переход в спин-поляризованное синглетное состояние (антипараллельная ориентация спинов двух электронов). Последнее состояние является аналогом антиферромагнитного состояния в кристаллах, то есть подразумевает сохранение в молекуле локализованных спиновых моментов. Реализация в конкретной молекуле дирадикала того или иного сценария понижения симметрии и снятия вырождения существенным образом определяет интерференционную картину в квантовом транспорте и зависит от геометрии молекулы и параметров ее электронной структуры и особенностей межэлектронного взаимодействия.

Рассмотрим двухуровневую модель с гамильтонианом:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{e-e} + \hat{H}_{tun} \quad (1)$$

Здесь $\hat{H}_0 = \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^2 \epsilon_i \hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i,\sigma} + \tau \sum_{\sigma} \left(\hat{c}_{1,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{2,\sigma} + \hat{c}_{2,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{1,\sigma} \right)$ — гамильтониан изолированной молекулярной системы без взаимодействия,

$\hat{H}_{e-e} = U(\hat{n}_{1\uparrow}\hat{n}_{1\downarrow} + \hat{n}_{2\uparrow}\hat{n}_{2\downarrow})$ описывает кулоновское взаимодействие электронов в рамках модели Хаббарда, а \hat{H}_{tun} — туннельную связь системы с электродами и сами электроды. В приближении среднего поля можно оценить энергии спин-поляризованных и не поляризованных состояний изолированной молекулы. Так, при $U < 2\tau$ основное состояние будет синглетным без спиновой поляризации, а при $U > 2\tau$ — синглетным с антипараллельными спинами. При этом разность энергий между двумя спин-поляризованными состояниями (с антипараллельной и параллельной ориентацией спинов) уменьшается с ростом U . Самосогласованное решение транспортной задачи в приближении среднего поля показывает, что спиновая поляризация сохраняется при наличии туннельной связи с электродами, что приводит к различным спектрам туннельной прозрачности в триплетном состоянии (в синглетном состоянии спиновая зависимость туннельной прозрачности отсутствует).

Описание открытой системы в рамках приближения Хаббарда (Хаббард-I) не дает спин поляризованные решения, если электроды описываются в приближении широкой зоны [4, 5]. В частности, требуется учет действительной части собственной энергии электродов, которая при этом должна быть достаточной большой величины по сравнению с мнимой частью. Рассмотрим электроды в модели полубесконечных цепочек (рис. 1,а). При этом необходимое соотношение между действительной и мнимой частями собственной энергии может быть достигнуто, например, вблизи края зоны, где мнимая часть мала (обращается в ноль на самом краю зоны), а действительная велика (достигает максимального значения на краю зоны) [6]. На рисунках 1,б–ж изображены разрешенные по спину спектры пропускания молекулы в триплетном состоянии. Видно наличие особых точек (рис. 1, в,г для спина «вниз» и рис. 1, з,д для спина «вверх») при различных параметрах. Для параметров, соответствующих рис. 1,б–г заселенность электронов со спином «вверх» крайне мала и поэтому прозрачность электронов со спином «вниз» практически не отличается от случая при $U=0$. В ситуации на рис. 1,ж спиновая поляризация перестает существовать и спектры прозрачности для разных спинов совпадают. Как и в случае приближения среднего поля, в синглетном состоянии спиновая зависимость туннельной прозрачности отсутствует.

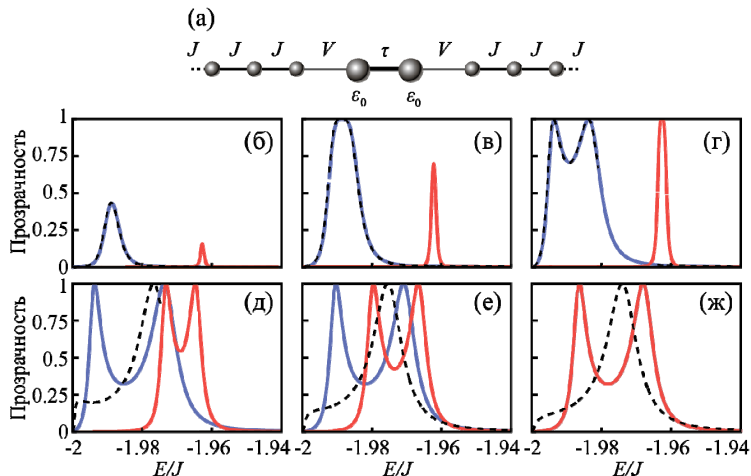


Рис. 1. (а) Схематичный вид двухузельной системы, подключенной к полубесконечным цепочкам, играющим роль электродов. Вероятности туннелирования для электронов со спинов «вниз» (синие линии), спином «вверх» (красные линии) и при $U=0$ (черные штриховые линии) при нулевой температуре. В расчете использованы параметры: $V=J/4$, $U=10J$, $\epsilon_1=\epsilon_2=-1.9575J$, $E_F=-1.97J$ и $\tau=0.00125J$ (б), $\tau=0.00325J$ (в), $\tau=0.006J$ (г), $\tau=0.0125J$ (д), $\tau=0.01375J$ (е) и $\tau=0.015J$ (ж)

Полученные результаты работы представляют интерес для разработки перспективных активных элементов молекулярной электроники в том числе и для приборов со спиновой поляризацией тока.

Список литературы

- [1] Gorbatsevich A. A. and Shubin N. M., *Phys. Rev. B* 96, 205441 (2017).
- [2] Shubin N. et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* 23, 20854 (2021).
- [3] Gorbatsevich A. A., Krasnikov G. Y., and Shubin N. M., *Sci. Rep.* 8, 15780 (2018).
- [4] Hewson A. C., *Phys. Rev.* 144, 420 (1966).
- [5] Sierra M. A. et al., *Phys. Rev. B* 93, 235452 (2016).
- [6] Ryndyk D. A. et al., in *Energy Transf. Dyn. Biomater. Syst.* (Springer, 2009), pp. 213–335.

СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ. СВЕРХТЕКУЧЕСТЬ

Эффекты увлечения в сверхпроводящих и сверхтекучих системах

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

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

²Институт спектроскопии РАН, г. Москва, Россия

Эффекты увлечения (дрэга) в многокомпонентных системах — это интересный класс транспортных явлений, изучение которых позволяет лучше понять квазичастичные и нелинейные свойства систем в нормальном и сверхтекучем состояниях. Эти эффекты состоят в том, что при воздействии сил на одну из компонент системы, которую называют активной, возникает токовый отклик не только этой компоненты, но и другой, пассивной компоненты. Зачастую такой перекрестный отклик определяется нелинейными восприимчивостями обеих компонент и дальними взаимодействиями между ними. *Диссипативный эффект кулоновского увлечения* в связанных полупроводниковых квантовых ямах и гетероструктурах двумерных материалов позволяет экспериментально исследовать электронные системы в нормальном (несверхтекучем) состоянии [1]. *Недиссипативный эффект увлечения* (или эффект Андреева–Башкина) проявляется в зацеплении токов сверхтекучих компонент и был предсказан для сверхтекучих и сверхпроводящих многокомпонентных систем, таких как смеси ^3He – ^4He , сверхпроводники и многокомпонентные бозе-конденсаты (см. обзор литературы [2]).

В общем же случае, линейный отклик изотропных мультикомпонентных систем на приложенное однородное поле описывается матрицей проводимостей $\sigma_{ij}(\omega)$ (где i, j — индексы компонент), которые связывают ток $\mathbf{j}_i = \sigma_{ij}(\omega)\mathbf{E}_j e^{-i\omega t}$ каждой компоненты i , появившийся в резуль-

тате воздействия на компоненту j некоторой меняющейся во времени силы \mathbf{F}_j . В терминах матрицы проводимости плотность сверхтекучего дрега n_i^{dr} , которая описывает эффект Андреева–Башкина, и транспроводимость ρ_D , которую измеряют в экспериментах по кулоновскому дрегу, можно выразить через низкочастотные пределы мнимой и действительной частей проводимости соответственно: $n_i^{\text{dr}} = m_j \lim_{\omega \rightarrow 0} \omega \text{Im} \sigma_{ij}(\omega)$ ($i \neq j$), $\rho_D \approx \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\text{Re} \sigma_{ab}(\omega)}{\omega \text{Re} \sigma_{aa}(\omega) \text{Re} \sigma_{bb}(\omega)}$.

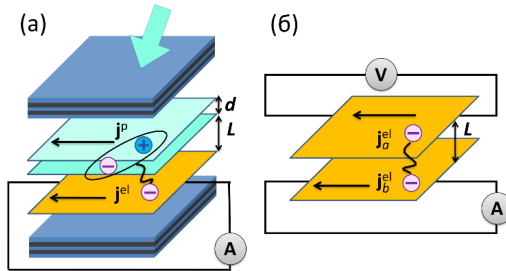


Рис. 1. Схематическое изображение двух исследуемых систем: (а) сверхпроводник с непрямыми экситон-поляритонами и (б) двухслойная сверхпроводящая система

В данном докладе мы представляем результаты теоретических исследований как статического недиссипативного эффекта увлечения (при $\omega = 0$) [3], так и динамического эффекта (при $\omega \neq 0$) для различных систем. Статический эффект увлечения изучался для электрон-поляритонных систем (рис. 1,а), состоящих из близкорасположенных сверхпроводника и слоя пространственно не прямых (или дипольных) экситонов, которые гибридизуются с фотонной модой микрополости и образуют поляритоны, формирующие бозе-конденсат, а также для двухслойных сверхпроводящих систем (рис. 1,б). В дополнение, для изучения общих свойств матрицы проводимости $\sigma_{ij}(\omega)$ сверхтекучих систем при ненулевых частотах, был рассмотрен динамический эффект увлечения для многокомпонентного трехмерного изотропного бозе-конденсата ультрахолодных атомных газов с контактным взаимодействием между частицами [4], что позволило единообразно изучить свойства как недиссипативного, так и диссипативного эффектов увлечения в модельной системе.

Расчеты матриц проводимости были проведены при помощи аппарата функций Грина и диаграмм Фейнмана. Было показано, что n_i^{dr} падает с увеличением температуры вблизи температуры сверхпроводящего перехода или бозе-конденсации и стремится к ненулевому значению при температурах, много меньших температуры перехода (рис. 2,а,б) для всех трех рассматриваемых систем. С увеличением межслойного расстояния L плотность дрэга n_i^{dr} уменьшается как степенная функция L . Было также показано, что в случае сверхпроводника в форме наноленты плотность дрэга может достигать тех же значений, что и в случае плоского двумерного сверхпроводника, но на гораздо больших расстояниях L , что объясняется ослаблением экранирования межслойного взаимодействия в одномерных системах по сравнению с двумерными.

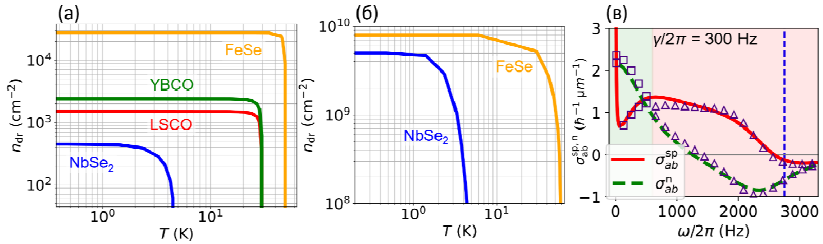


Рис. 2. Температурные зависимости плотности сверхтекучего дрэга для (а) электрон-поляритонной системы и (б) для системы, состоящей из двух плоских сверхпроводников, а также (в) транспроводимость как функция частоты приложенного возмущения для симметричного двухкомпонентного бозе-конденсата ⁸⁷Rb. Точки показывают аналитические аппроксимации

Расчет матрицы проводимости $\sigma_{ij}(\omega)$ многокомпонентного трехмерного бозе-конденсата ⁸⁷Rb (рис. 2,в) показал, что при достаточно малых частотах ω , сравнимых с обратным временем затухания квазичастиц γ , диссипативная часть транспроводимости $\sigma_{ab}^n(\omega) = \text{Re } \sigma_{ab}(\omega)$ имеет низкочастотный пик $\sim [\omega^2 + 4\gamma^2]^{-1}$, аналогичный друдевскому пику проводимости в металлах, а недиссипативная часть транспроводимости $\sigma_{ab}^{\text{sp}}(\omega) = \text{Im } \sigma_{ab}(\omega) \approx n_i^{\text{dr}}/m_i\omega$ пропорциональна плотности дрэга и расходится как ω^{-1} , что служит проявлением эффекта сверхтекучего увлечения. На больших частотах транспроводимость качественно ведет себя подобно проводимости в модели Лоренца: $\sigma_{ab}^{\text{sp}}(\omega)$

меняет знак, а $\sigma_{ab}^n(\omega)$ демонстрирует резонанс, характерный только для смеси бозе-конденсатов, появляющийся благодаря процессам взаимного превращения разных ветвей боголюбовских квазичастиц.

Аналитические расчеты были выполнены в рамках Госзадания FFUU-2024-0003 Института спектроскопии РАН. Численные расчеты были поддержаны Программой фундаментальных исследований Высшей школы экономики.

Список литературы

- [1] Narozhny B. N. and Levchenko A., Coulomb drag // *Reviews of Modern Physics* **88**, 025003 (2016).
- [2] Aminov A. F., Sokolik A. A., and Lozovik Yu. E., Superfluid drag between excitonic polaritons and superconducting electron gas // *Quantum* **6**, 787 (2022).
- [3] Aminov A. F., Sokolik A. A., and Lozovik Yu. E., Superconductor-polariton non-dissipative drag in optical microcavity // *Phys. Rev. B* **108**, 115415 (2023).
- [4] Aminov A. F., Sokolik A. A., and Lozovik Yu. E., Finite-frequency normal and superfluid drag effects in two-component atomic Bose-Einstein condensates, <https://arxiv.org/abs/2402.11606>

Наведенная сверхпроводимость в электроактивном полимере

К. Ю. Арутюнов^{1,2,*}, В. В. Завьялов², Х. Т. Смазнова¹,
А. Р. Юсупов³, Д. Д. Карамов⁴, А. Н. Лачинов^{3,4}

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

²Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, г. Москва, Россия

³Башкирский государственный педагогический университет, г. Уфа, Россия

⁴Институт физики молекул и кристаллов РАН, г. Уфа, Россия

*E-mail: karutyunov@hse.ru

Большинство полимеров можно отнести к классу органических диэлектриков. Сравнительно недавно было обнаружено, что существуют, так называемые, *электроактивные полимеры*, которые в основном со-

стоянии являются широкозонными диэлектриками, но под влиянием внешних параметров могут проявлять высокую электропроводность. Эффект интерпретируется как стимулирование металлического состояния [1]. Полидифениленфталид (ПДФ) относится к классу электроактивных органических диэлектриков, которые при приложении внешнего электростатического поля и/или механического напряжения проявляют электропроводящие свойства [2]. Отличные эксплуатационные свойства, а также чувствительность электрических и оптических свойств к внешним воздействиям (температура, давление, различные виды излучения, электрические и магнитные поля и др.) делают ПДФ перспективным материалом для применений в устройствах органической электроники.

В настоящей работе экспериментально исследовались электронные транспортные характеристики тонкопленочных слоистых гетероструктур сверхпроводник – ПДФ – сверхпроводник, где в качестве сверхпроводящих материалов использовался свинец или индий. В широком температурном диапазоне вольт-амперные характеристики удовлетворительно описываются в рамках инжекционной модели токов. Ниже соответствующих критических температур свинца ~ 8 К или индия $\sim 3,4$ К зависимости $R(T)$ и $V(I)$ демонстрируют особенности, которые могут быть объяснены эффектом наведенной сверхпроводимости в тонкой пленке проводящего полимера, находящегося в контакте с массивным сверхпроводником [3, 4]. Эффект наблюдается в структурах с толщинами полимера менее 300 нм. Анализ сколов гетероструктур методом просвечивающей электронной микроскопии не выявил наличия микроскопических дендритов или макроскопических закороток, которые могли бы тривиальным образом объяснить наблюдаемое поведение.

Работа поддерживалась программой сотрудничества «Зеркальные лаборатории» Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» и Башкирского государственного педагогического университета им. М. В. Акмуллы.

Список литературы

- [1] Lachinov A. N., Vorob'eva N. V., *Physics - Uspekhi* 49(12), 1238 (2006).
- [2] Lachinov N., Kornilov V. M., Zagurenko T. G., and Zherebov A. Yu., *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 102(4), 640 (2006).

- [3] Arutyunov K. Yu., Artemov V. V., Vasiliev A. L., Yusupov A. R., Karamov D. D., Lachinov A. N., Beilstein *J. Nanotechnology* 13, 1551, (2022).
- [4] Арутюнов К. Ю., Беляев К. А., Артемов В. В., Васильев А. Л., Юсупов А. Р., Карамов Д. Д., Лачинов А. Н., *Физика твердого тела* 65(1), 151 (2023).

Сверхпроводимость в ко-допированных железом кристаллах сверхпроводника $\text{Sr}_{0.06}\text{Bi}_2\text{Se}_3$

М. И. Банников^{1,2,*}, В. П. Мартовицкий¹, Ю. Г. Селиванов¹,
А. Ю. Кунцевич¹

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

²Научно-исследовательский институт «Высшая школа экономики»,
г. Москва, Россия..

*E-mail: bannikovmi96@gmail.ru

Экспериментально исследовано влияние ко-допирования железом на параметры кристаллической решетки, проводящие свойства и сверхпроводимость в кристаллах $\text{FeSe}_x\text{Sr}_{0.06}\text{Bi}_2\text{Se}_3$ с номинальной долей железа $0 < x < 0.15$ и в кристаллах $\text{Fe}_x\text{Bi}_2\text{Se}_{3+x}$ с номинальной долей железа $0 < x < 0.06$. Во второй серии кристаллов обнаружена высокая подвижность, связанная, по всей видимости, с «@залечиванием» точечных дефектов допирующими атомами, но отсутствует сверхпроводимость. В первой серии кристаллов также обнаружено повышение подвижности, и, при достаточно низких концентрациях железа, остаётся сверхпроводимость. Наши результаты показывают, что за сверхпроводимость в материалах, основанных на $\text{Sr}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ответственна именно кристаллическая фаза, связанная со структурным положением атомов Sr в матрице Bi_2Se_3 .

Введение

В 2015 году в кристаллах $\text{Sr}_y\text{Bi}_2\text{Se}_3$ была найдена сверхпроводимость [1], которая привлекла внимание своей необычностью: малая концентрацией носителей и возможное спаривание с ненулевой чётностью,

сопровожаемое высокой долей сверхпроводящей фазы (до 100 %) и высоким структурным качеством, а также длительным сохранением сверхпроводимости при хранении на воздухе. Впоследствии в этом кристалле, а также в родственных соединениях ($\text{Cu}_y\text{Bi}_2\text{Se}_3$, $\text{Nb}_y\text{Bi}_2\text{Se}_3$) был открыт ряд новых эффектов: нематическая сверхпроводимость (спонтанное нарушение вращательной симметрии проводящих свойств в магнитном поле), дираковский характер поверхностных состояний и нематичность выше T_c (подробнее см. обзор [2]). Тем не менее, до сих пор окончательно не разрешён вопрос о расположении допирующих атомов металла в матрице Bi_2Se_3 и его влияния на сверхпроводимость.

В недавней работе [3] впервые было сообщено об обнаружении сверхпроводимости в кристаллах состава $\text{Fe}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$, причём сверхпроводимость наблюдалась при сравнительно малых концентрациях допирующих атомов и сопровождалась заметным повышением подвижности носителей заряда. Авторы работы высказывают предположение о том, что распределение железа по кристаллу неоднородно и кристалл разбивается на домены. В объёме доменов концентрация допирующих атомов минимальна, и именно с проводимостью по доменам связана высокая подвижность. На границах доменов высаживается большая часть железа, и сверхпроводящий ток течёт как раз по этим границам (хотя авторы отвергают гипотезу об образовании фазы FeSe на границах доменов). В пользу этого предположения свидетельствует наличие перехода в проводимости и отсутствие перехода в магнитной восприимчивости (из-за малой доли сверхпроводящей фазы). Авторы предполагают, что аналогичный механизм может быть ответственен за сверхпроводимость и в соединениях с другими допантами (Sr , Cu , Nb).

В нашей работе были исследованы две серии кристаллов $\text{Fe}_x\text{Bi}_2\text{Se}_{3+x}$ и $\text{Fe}_x\text{Sr}_{0.06}\text{Bi}_2\text{Se}_{3+x}$ с целью изучения сверхпроводимости и проводящих свойств в этих соединениях.

Методы и результаты

Мы вырастили две серии кристаллов с номинальными составами $\text{Fe}_x\text{Sr}_{0.06}\text{Bi}_2\text{Se}_{3+x}$ ($0 < x < 0.06$) и $\text{Fe}_x\text{Bi}_2\text{Se}_{3+x}$ ($0 < x < 0.15$) при помощи модифицированного метода Бриджмена.

Параметры кристаллической решётки и структурное совершенство кристаллов исследовались с помощью метода рентгеновской дифракции на дифрактометре Panalytical XPert Pro MRD Extended. Мы обнаружили, что катионы железа уменьшают параметр решетки вдоль оси c и увеличивают параметр решетки в базисной плоскости с одновременным отклонением оси c от перпендикуляра к базисной плоскости в сторону возрастания угла. Также, судя по кривым качания, снятым на разных точках одного и того же кристалла, вхождение железа в кристалл существенно неоднородное.

Магнитотранспортные свойства кристаллов исследовались в диапазоне температур 1,7–300 К и магнитных полях до 5Т на криостате miniCFMS. В кристаллах серии $\text{Fe}_x\text{Bi}_2\text{Se}_{3+x}$ было обнаружено существенное повышение низкотемпературной подвижности от $1000 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$ в исходном Bi_2Se_3 до $6000 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$ и увеличение Residual Resistance Ratio (от 1,5 до 6), но не была обнаружена сверхпроводимость. Увеличение подвижности в несколько при допировании представляет собой сильное экспериментальное наблюдение и может найти дальнейшие практические применения.

В кристаллах серии $\text{Fe}_x\text{Sr}_{0,06}\text{Bi}_2\text{Se}_{3+x}$ при не слишком больших значениях x (до 0,01) наблюдался сверхпроводящий переход по сопротивлению и по намагниченности, хотя доля сверхпроводящей фазы в большинстве кристаллов существенно меньше 100 %. Сверхпроводимость и высокая подвижность сохраняются в кристаллах и после длительного хранения на воздухе.

Как следует из наших данных, допирование железом, действительно повышает подвижность, «залечивая» точечные дефекты, но не приводит к появлению сверхпроводимости в $\text{Fe}_x\text{Bi}_2\text{Se}_{3+x}$, а в $\text{Fe}_x\text{Sr}_{0,06}\text{Bi}_2\text{Se}_{3+x}$ подавляет сверхпроводимость при достаточно больших концентрациях железа. В то же время при малых концентрациях сохраняется сверхпроводимость в объёме с заметной долей сверхпроводящей фазы.

Список литературы

- [1] Liu Z. et al., *J. Am. Chem. Soc.*; 137, 10512 (2015).
- [2] Yonezawa S. et al., *Nature Physics* 13, 123 (2017).
- [3] Zich J. et al., *Phys. Rev. B* 108, 125308 (2023).

Исследование микроструктуры и сверхпроводящих свойств монокристаллов $\text{KCa}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{F}_2$

А. Ю. Дегтяренко¹, А. В. Садаков¹, А. В. Усольцев², Ц. Гэ²

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

²*Университет Шанхая, г. Шанхай, КНР*

Недавно открытое соединение $\text{ACa}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{F}_2$ ($A = \text{K, Rb, Cs}$) является представителем слоистых железосодержащих сверхпроводников, с критической температурой T_c от 28 до 34 К [2–4]. Соединение $\text{ACa}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{F}_2$ имеет сложное кристаллическое строение. Отдельные двойные слои Fe_2As_2 в кристаллической структуре $\text{ACa}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{F}_2$, образуются в результате срастания двух фаз CaFeAsF и AFe_2As_2 . Такая слоистая структура приводит к значительной анизотропии сверхпроводящих свойств. В данной работе были проведены исследования монокристалла $\text{KCa}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{F}_2$, выращенных из расплава собственного компонента KAs [2]. Соединение 12442 ($\text{KCa}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{F}_2$) имеет узкий интервал кристаллизации и образуется из двух фаз 1111 (CaFeAsF) и 122 (KFe_2As_2) [2]. Высокое качество монокристалла было подтверждено методом рентгеновской дифрактометрии и измерением температурной зависимости магнитной восприимчивости - ширина сверхпроводящего перехода составила менее 2 К при $T_c = 34$ К. С помощью электронной микроскопии высокого разрешения были обнаружены дефекты вдоль плоскости ab . Эти дефекты представляют собой монослои CaFeAsF и KFe_2As_2 , объемная доля которых составляет порядка 4 %. Несмотря на это, нам удалось обнаружить вклад данных дефектов при проведении туннельного эксперимента. В ходе наблюдения за эффектом Андреевских отражений в симметричном контакте S-c-S, образованном слабой связью внутри образца, мы смогли определить величину большой щели CaFeAsF и её температурное поведение вплоть до локальной T_c (28 К), которая лежит ниже T_c (34 К) $\text{KCa}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{F}_2$. Аналогично многим родственным соединениям сверхпроводников на основе железа [3, 4], эти дефекты могут выступать в качестве дополнительных центров пиннинга. Полученные петли магнитного гистерезиса для двух ориентаций поля $H//ab$ и $H//c$ симметричны, что свидетельствует о преобладании механизма объемного пиннинга в образце. Рассчитанная плотность критического тока составила $\sim 10^6$ А/см². Также, мы обнару-

жили второй пик намагниченности (SMP) при высоких температурах (вблизи T_c), что не соответствует обычному положению SMP в родительских фазах 1111 и 122. При измерении первого критического поля в обеих ориентациях наблюдается существенное отличие в температурных зависимостях $H_{c1}(T)$ в зависимости от ориентации.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда № 23-12-00307.

Список литературы

- [1] Wang Z. C. et al. Superconductivity in $KCa_2Fe_4As_4F_2$ with separate double Fe_2As_2 layers // *J. Am. Chem. Soc.* 2016. 138(25), 7856–7859.
- [2] Wang T. et al. Single-Crystal Growth and Extremely High H_{c2} of 12442-Type Fe-Based Superconductor $KCa_2Fe_4As_4F_2$ // *J. Phys. Chem. C.* 2019. 123(22), 13925–13929.
- [3] Ishida S. et al. Unique defect structure and advantageous vortex pinning properties in superconducting $CaKFe_4As_4$ // *NPJ Quantum Mater.* 2019. 4, 272019.
- [4] Degtyarenko A. Y. et al. Synthesis and HRTEM Investigation of $EuRbFe_4As_4$ Superconductor // *Nanomaterials.* 2022. Т. 12. № 21. С. 3801.

Измерение расщепления температуры сверхтекучего перехода в чистом ^3He в нематическом аэрогеле в магнитном поле

В. В. Дмитриев¹, М. С. Кутузов², Д. В. Петрова^{1,3}, А. А. Солдатов¹,
А. Н. Юдин¹

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

²Metallurg Engineering Ltd., г. Таллинн, Эстония

³Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,
г. Москва, Россия

E-mails: dypetrova_2@edu.hse.ru, metallurg@metallurg.eu

Сверхтекучесть ^3He связана с куперовским спариванием частиц с полным орбитальным моментом и спином равными 1. Это позволяет существование различных по своей структуре и свойствам сверхтекучих

фаз. Однако в чистом ${}^3\text{He}$ в отсутствие магнитного поля реализуются только A и B фазы: в B фазе сверхтекучая щель является изотропной, в то время как в A фазе она становится равной 0 в двух точках на поверхности Ферми. При помещении ${}^3\text{He}$ в магнитное поле становится доступной еще одна фаза — так называемая A_1 фаза. Ее отличительной особенностью является то, что в ней есть только состояния с проекцией спина $|\uparrow\uparrow\rangle$, в то время как в A фазе присутствуют как проекции $|\uparrow\uparrow\rangle$, так и $|\downarrow\downarrow\rangle$. Область существования A_1 фазы линейна по полю и составляет примерно $1.2 - 6 \frac{\text{мкК}}{\text{кЭ}}$ при давлениях от 0 до 34 бар.

Еще одним способом, позволяющим реализацию новых фаз, является контролируемое введение примесей, роль которых могут играть аэрогели высокой пористости. Аэрогель — материал, состоящий из твердых нитей, размер которых много меньше расстояния между ними. Использование нематического аэрогеля, все нити которого имеют преимущественно одно направление, делает выгодными и другие фазы. Например, полярную и бета фазы, сверхтекучая щель в которых обращается в 0 на экваторе сферы Ферми. В бета фазе, аналогично A_1 фазе, есть только состояния $|\uparrow\uparrow\rangle$.

В случае проведения экспериментов в чистом ${}^3\text{He}$ (без добавления ${}^4\text{He}$) в нематическом аэрогеле его нити покрываются твердым парамагнитным слоем ${}^3\text{He}$. В результате вблизи T_{ca} вместо полярной фазы, которая становится выгодной в случае предварительного покрытия нитей ${}^4\text{He}$, реализуется чистая A фаза, а температура сверхтекучего перехода T_{ca} оказывается заметно более подавлена [1]. В ${}^3\text{He}$ в аэрогеле также должно происходить расщепление температуры перехода в магнитном поле, которое, согласно теоретическим предсказаниям [2], должно быть нелинейным по магнитному полю из-за влияния магнитного рассеяния. Недавние исследования [3] показали, что в низких магнитных полях температура верхнего перехода T_{ca1} (из нормальной в A_1 фазу) зависит нелинейно от поля.

Для изучения сверхтекучего ${}^3\text{He}$ могут использоваться различные резонаторы, например, вибрирующая проволочка. Если поместить металлическую арку в вертикальное магнитное поле и подавать на нее переменный ток, то она будет совершать периодические колебания в плоскости, перпендикулярной магнитному полю. Такая система будет иметь механический резонанс на собственной частоте колебаний. При этом параметры

этого резонанса будут определяться свойствами как самой проволоочки, так и окружающей среды. В экспериментах в ^3He образец аэрогеля приклеивается к такой вибрирующей проволоочке (рис. 1). Жидкий ^3He заполняет пространство между нитями аэрогеля, в результате чего параметры резонанса начинают зависеть и от свойств жидкости внутри аэрогеля.

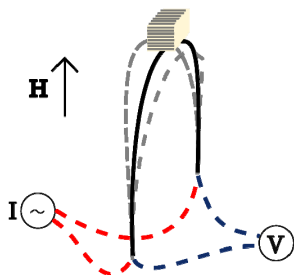


Рис. 1. Проволочка с приклеенным образцом аэрогеля

В случае использования анизотропного образца аэрогеля кроме основного механического резонанса вибрирующей проволоочки также наблюдается вторая мода колебаний, которая является аналогом звуковой моды и возникает за счет колебаний нормальной и сверхтекучей компонент внутри образца аэрогеля. В этой серии экспериментов в результате сканирования в большом диапазоне частот удалось измерить температурные зависимости параметров обеих мод резонанса. По этим данным удалось как изучить зависимость температуры верхнего перехода T_{ca1} в широком диапазоне магнитных полей, причем наблюдаемая область нелинейности значительно не соответствует теоретическим предсказаниям, так и обнаружить нижний переход T_{ca2} (из A_1 в A_2 фазу) благодаря использованию высоких магнитных полей от 2 до 3 Тл, чего не было возможно сделать ранее [3].

Список литературы

- [1] Dmitriev V. V., Soldatov A. A., Yudin A. N., *PRL*. 2018. V. 120. P. 075301.
- [2] Baramidze G. A., Kharadze G. A., *J. Low Temp. Phys.* 2004. V. 135. P. 399.
- [3] Dmitriev V. V., Kutuzov M. S., Soldatov A. A., Yudin A. N., *PRB*. 2023. V. 107. P. 0245070.

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

В. В. Дмитриев¹, М. С. Кутузов², Д. В. Петрова^{1,3},
А. А. Солдатов¹, А. Н. Юдин¹

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

²*Metallurg Engineering Ltd., г. Таллинн, Эстония*

³*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», г. Москва, Россия*

В докладе будут представлены результаты экспериментов со сверхтекучим ^3He в нематическом аэрогеле (все нити такого аэрогеля параллельны друг другу) в отсутствие покрытия поверхности гелием-4. В этом случае нити аэрогеля покрыты несколькими атомными слоями твердого парамагнитного ^3He , что должно приводить к спин-обменному рассеянию квазичастиц ^3He . Эксперименты проводились в сильных магнитных полях (до 30 кЭ) с использованием метода механического резонанса вибрирующей проволоочки, на которую был наклеен образец аэрогеля.

Известно, что при помещении объемного ^3He в магнитное поле в узкой области температур реализуется сверхтекучая A_1 фаза. Ее отличительной особенностью является то, что в ней есть только состояния с проекцией спина $|\uparrow\uparrow\rangle$, в то время как в A фазе (реализующейся в отсутствие магнитного поля) присутствуют как проекции $|\uparrow\uparrow\rangle$, так и $|\downarrow\downarrow\rangle$. Ширина области температур существования A_1 фазы в объемном ^3He линейна по полю и меняется в пределах $1.2\div 6$ мК/кЭ при изменении давления от 0 до 34 бар.

В случае ^3He помещенного в изотропный аэрогель (в отличие от объемного ^3He) ранее экспериментально не удавалось наблюдать A_1 фазу в малых магнитных полях [1]. В ряде теоретических работ [2,3] это объяснялось спин-обменным рассеянием квазичастиц ^3He на поверхностном твердом слое ^3He адсорбированном на нитях аэрогеля. Согласно теории, область существования A_1 фазы в этом случае должна быть подавлена и возрастать нелинейно при повышении поля. В последующих экспериментальных работах удалось наблюдать A_1 фазу в аэрогеле, но в доста-

точно высоких полях, где зависимость уже перешла в линейный режим [4]. Таким образом, экспериментальных данных в промежуточных магнитных полях, где зависимость имела бы нелинейный характер и описывалась соответствующей теоретической зависимостью модели спин-обменного рассеяния, так и не было получено. Между тем вопрос о типе рассеяния квазичастиц носит принципиальный характер для описания свойств сверхтекучего ^3He помещенного в аэрогель или иное ограниченное пространство.

В наших экспериментах удалось наблюдать переход в A_1 фазу в аэрогеле, и получить полевую зависимость температуры сверхтекучего перехода ^3He [5]. Эта зависимость носит нелинейный характер, что свидетельствует о влиянии магнитного рассеяния на расщепление температуры сверхтекучего перехода, как это было предположено в теоретических работах. Однако, в эксперименте наблюдалось существенное количественное несоответствие теоретическим ожиданиям — выход на линейный режим зависимости происходит в гораздо меньших магнитных полях, чем предсказывает теория. Одно из возможных объяснений — для немагнитического (анизотропного) аэрогеля, использованного в нашем эксперименте, необходимы дополнительные поправки в теории, построенной изначально для изотропного аэрогеля. В связи с этим, одним из возможных шагов для проверки теоретической модели, может стать повторение описанных экспериментов для случая изотропного аэрогеля и сравнение полученных данных.

Список литературы

- [1] Gervais G., Yawata K., Mulders N., and Halperin W. P., *Phys. Rev. B* **66**, 054528 (2002).
- [2] Sauls J. A. and Sharma P., *Phys. Rev. B* **68**, 224502 (2003).
- [3] Baramidze G. A. and Kharadze G. A., *J. Low Temp. Phys.* **135**, 399 (2004).
- [4] Choi H. C., Gray A. J., Vicente C. L., Xia J. S., Gervais G., Halperin W. P., Mulders N., and Lee Y., *Phys. Rev. Lett.* **93**, 145302 (2004).
- [5] V.V. Dmitriev, M.S. Kutuzov, A.A. Soldatov, and A.N. Yudin, *Phys. Rev. B* **107**, 024507 (2023).

Расщепление сверхтекучего перехода в чистом ^3He в изотропном аэрогеле в сильном магнитном поле

В. В. Дмитриев¹, Д. В. Петрова^{1,2}, А. А. Солдатов¹, А. Н. Юдин¹

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

²Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», г. Москва, Россия

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 различных 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 $\downarrow\downarrow$). При охлаждении из A_1 фазы происходит переход 2-го рода в A_2 фазу (к конденсату добавляются пары $\downarrow\downarrow$), которая при дальнейшем охлаждении плавно переходит в чистую A фазу. Возникновение верхнего T_{c1} и нижнего T_{c2} переходов в высоком поле вместо одного T_c в нулевом поле принято называть расщеплением сверхтекучего перехода, так как $T_{c2} < T_c < T_{c1}$.

При температурах ~ 1 мК, когда ^3He становится сверхтекучим, все примеси вымерзают, а сама квантовая жидкость является сверхчистым веществом. Для изучения влияния примесей на сверхтекучий ^3He используют аэрогели высокой пористости. Так, в первых экспериментах использовался изотропный (кремниевый) аэрогель, представляющий собой “мочалку” из хаотически ориентированных нитей диаметром ~ 3 нм и расстоянием между нитями ~ 100 нм. Оказалось, что фазовая диаграмма ^3He в таком аэрогеле качественно совпадает со случаем объемного ^3He ,

но с заметным подавлением температуры сверхтекучего перехода в аэрогеле (T_{ca}). В присутствии магнитного поля вблизи T_{ca} должна теоретически возникать A_1 фаза, но расщепление перехода экспериментально наблюдали только в высоких полях 70–150 кЭ [1], тогда как в полях до 8 кЭ расщепление обнаружено не было [2].

При покрытии нитей аэрогеля ~ 3 атомными слоями ^4He создается зеркальный характер рассеяния квазичастиц ^3He , и в этом случае область существования A_1 фазы линейно зависит от поля. Однако в случае чистого ^3He (без добавления ^4He) нити аэрогеля покрываются твердым парамагнитным слоем ^3He , который создает диффузный характер рассеяния квазичастиц ^3He и включает еще магнитный канал рассеяния. Согласно теории, магнитное рассеяние должно приводить к нелинейной зависимости обеих сверхтекучих переходов ^3He от поля [3,4] в изотропном аэрогеле, но никто не проводил соответствующие измерения в промежуточных магнитных полях.

В данной работе с помощью вибрирующей проволоки с приклеенным к ней образцом кремниевого аэрогеля, погруженной в жидкий чистый ^3He и помещенной в высокое магнитное поле (вплоть до ~ 32 кЭ), было обнаружено расщепление температуры сверхтекучего перехода и измерена зависимость температурной области существования A_1 фазы в аэрогеле от величины магнитного поля. Экспериментальный результат мы сравниваем со случаем объемной A_1 фазы и теоретическими предсказаниями в аэрогеле.

Список литературы

- [1] Choi H. C., Gray A. J., Vicente C. L., Xia J. S., Gervais G., Halperin W. P., Mulders N., and Lee Y., *Phys. Rev. Lett.* **93**, 145302 (2004).
- [2] Gervais G., Yawata K., Mulders N., and Halperin W. P., *Phys. Rev. B* **66**, 054528 (2002).
- [3] Sauls J. A. and Sharma P., *Phys. Rev. B* **68**, 224502 (2003).
- [4] Baramidze G. A. and Kharadze G. A. J., *Low Temp. Phys.* **135**, 399 (2004).

Сверхпроводимость алмазов, синтезированных в системах Au-B-C, Ag-B-C и Cu-B-C

Е. А. Екимов¹, В. А. Сидоров¹, Н. М. Щелкачёв¹, С. Г. Ляпин¹,
Р. А. Хмельницкий²

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

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

Синтез алмазов, легированных бором, в традиционных ростовых системах на основе Fe, Co и Ni, не позволяет достичь достаточной степени легирования алмаза бором, что выражается в полупроводниковой зависимости электрического сопротивления полученных образцов алмаза в диапазоне температур 2–300 К и отсутствию в них признаков сверхпроводимости. Наиболее вероятно это связано с тем, что бор легко образует бориды с этими металлами. Синтез боридов оказывается более выгодным, чем вхождение бора в растущую решётку алмаза. Впервые благородные металлы — золото и серебро, а также медь, которые не образуют боридов, были использованы в качестве сред для синтеза сильно легированных бором алмазов при давлениях 8–9 ГПа. Золото и серебро не являются катализаторами при синтезе алмаза, тогда как элементарный бор каталитически активен при температурах плавления эвтектики В-С при температурах выше 2500 К и давлении 9 ГПа. Было обнаружено, что синтез алмаза в ростовых средах Ag-B и Au-B начинается при температурах близких к температурам плавления Ag и Au, 1600 и 1800 К соответственно. Медь является нетрадиционным катализатором для синтеза алмаза: в системе Cu-C алмазы образуются под давлением при температурах около 2000 К и медь также не образует боридов. В наших экспериментах в системе Cu-B-C образование алмазов начинается при 1620 К — температуре, соответствующей плавлению меди в условиях нашего эксперимента. Вычисления показывают, что золото и серебро растворяют атомы бора без значительного изменения электронной структуры расплава, таким образом, расплавы этих металлов служат носителями для атомов бора, который является катализатором при значительно более низкой температуре, чем обычно. Видимо то же самое происходит и в расплаве меди. Полученные поликристаллические алмазные образцы

содержат дисперсные включения Au, Ag и Cu, а также следы карбида бора. Образования боридов металлов не обнаружено. Спектроскопия комбинационного рассеяния света подтвердила высокую концентрацию бора в решётке алмаза. Измерения температурной зависимости электрического сопротивления синтезированных образцов алмаза показали, что все они обладают металлической проводимостью при комнатной температуре и переходят в сверхпроводящее состояние при температурах 2.5–4.5 К. Таким образом, мы показали, что расплавы «некаталитических» металлов, которые не образуют боридов, а также меди могут быть использованы для синтеза сильно легированных бором сверхпроводящих алмазов при относительно низких температурах.

Представленное исследование было профинансировано РФФИ и GACR, проект № 20-52-26017. Результаты опубликованы в работах [1, 2].

Список литературы

- [1] Екимов Е. А., Сидоров В. А., Хмельницкий Р. А., Ляпин С. Г. Синтез сверхпроводящих легированных бором алмазов в растворе углерода и бора в расплавах золота и меди // *Неорганические материалы*, т. 59, №9, 1–7 (2023).
- [2] Ekimov E. A., Sidorov V. A., Chtchelkatchev N. M., Lyapin S. G., Khmelnit-sky R. A. Gold and silver: Noble solvents for the synthesis of superconducting boron-doped diamonds // *Diamond & Related Materials* **142**, 110784 (2024).

Нейтронно-оптические исследования сложнопорядоченных слоистых систем

В. Д. Жакетов^{1,2,*}

¹*Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия*

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

**E-mail: zhaketov@nfj.inr.ru*

Низкоразмерные магнитные и сверхпроводящие гетероструктуры, благодаря наличию большого количества интересных явлений активно исследуются в настоящее время. Одним из эффективных методов исследу-

дования магнетизма является рефлектометрия поляризованных нейтронов, позволяющая получить изотопные и магнитные профили по глубине с нанометровым разрешением. На рефлектометре РЕМУР реактора ИБР-2 (Дубна) проводились низкотемпературные исследования эффектов близости в сверхпроводяще-ферромагнитных системах [1] и редкоземельных пленках с нетривиальным магнитным упорядочением [2].

В настоящее время активно исследуются эффекты близости на границе раздела двух сред. Особый интерес представляют двумерные низкоразмерные структуры со сверхпроводящими (S) и ферромагнитными (F) свойствами, в которых реализуется взаимодействие двух антагонистичных друг другу параметров порядка. Перспективными системами для изучения эффектов близости являются S/F-гетероструктуры из ниобия и редкоземельных (RE) металлов [3]. В первую очередь отмечается высокая прозрачность границы раздела S/F для таких систем RE/Nb, как Gd/Nb, что упрощает проникновение сверхпроводящих корреляций в F-слои. Во-вторых, редкоземельные металлы характеризуются низкими значениями точки Кюри, что сближает энергии обоих взаимодействий и облегчает реализацию эффектов близости. Некоторые редкоземельные элементы, такие как Dy и Ho, являются редкоземельными антиферромагнетиками с геликоидальной структурой, позволяющей генерировать дальнедействующую триплетную сверхпроводимость. Для слоистой гетероструктуры $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Nb}(40 \text{ нм})/[\text{Dy}(6 \text{ нм})/\text{Ho}(6 \text{ нм})]_{34}/\text{Nb}(10 \text{ нм})$ получено, что при температуре ниже сверхпроводящего перехода магнитное состояние гелимагнетика подстраивалось под сверхпроводимость, а именно верное магнитное упорядочение перестраивалось в гелимагнитное [4]. Характерная глубина проникновения сверхпроводящих корреляций в гелимагнетик соответствовала примерно 30 периодам геликоида.

Описанные периодические слоистые системы являются искусственными слоистыми кристаллами. При отражении нейтронов от периодической слоистой структуры наблюдаются пики Брэгга. Особый интерес представляют также и слоистые искусственные квазикристаллы. Возможно создание искусственных слоистых систем, обладающих квазикристаллическостью в направлении перпендикулярном плоскости структуры. Рассмотрена возможность создания слоистых квазикристаллов из чередующихся сверхпроводящих и ферромагнитных слоёв. Данные модельные системы просты для изготовления и исследований, но позволяют изу-

чать нетривиальные явления, такие как фрактальная сверхпроводимость и дальний магнитный порядок в квазипериодической системе, а также их сосуществование. Безусловно особый интерес представляет создание структур Фибоначчи с использованием магнетиков с геликоидальным магнитным порядком.

Список литературы

- [1] Никитенко Ю. В., Жакетов В. Д., *ЭЧАЯ*, т. 53, вып. 6, с. 1339–1400 (2022).
- [2] Девятериков Д. И. и др., *Поверхность*, № 10, стр. 24-28 (2022).
- [3] Khaydukov Yu. N. et al., *Phys. Rev. B*, vol. 99, pp. 140503(R) (2019).
- [4] Zhaketov V. D. et al., *Physics of the Solid State*, Vol. 65, No. 7 (2023).

Superconductivity from incoherent Cooper pairs in strong coupling and flat-band regimes

A. A. Zyuzin¹, A. Yu. Zyuzin²

¹*QTF Centre of Excellence, Department of Applied Physics,
Aalto University, FI-00076 Aalto, Finland*

²*Ioffe Physical-Technical Institute, St. Petersburg, Russia*

The recent experimental progress in material engineering has revitalized the study of unusual superconductivity in, for example, disordered materials [1], flat-band systems [2], and quantum materials including twisted bilayer graphene [3]. The investigation of superconductivity in materials hosting saddle-point van-Hove singularities and flat bands within their electronic band structure has a long history dating back to theoretical works [4, 5] and [6]. Cuprate-superconductors is the primary example where this model was applied to investigate the reasons for high-temperature superconductivity. Recently the developments of graphene-based nanostructures have offered another platform for investigating the impact of flat-band states and electron-correlations on superconductivity.

We have theoretically demonstrated that, despite the significant enhancement of the flat-band electronic density of states favouring Cooper pair formation, their nearly dispersionless nature might pose a significant impedi-

ment to pair condensation. Specifically, we showed that the normal metal state might become unstable towards the formation of local Cooper pairs at temperatures much higher than the superconducting transition temperature. A preformed Cooper pair state manifests as a system of small domains exhibiting spatially uncorrelated random phase of the pairing order parameter. Andreev reflection processes between the domains, ensured by electrons from dispersive bands, which inevitably correlate with the flat bands in realistic materials, give rise to phase synchronization and superconductivity at elevated temperatures.

We predicted that a similar scenario of superconductivity might be applied to systems with a strong attractive interaction between electrons in the intermediate BCS to BEC crossover regime. Specifically, in the case of conductors with parabolic bands [7], we found that the pairing instability is governed by two physically distinct short and long-range scale electron-electron correlations, supporting local pair binding at high temperatures and long-range phase-synchronization between such preformed pairs at low temperatures.

We consider the conditions for the emergence of a state with spatially phase incoherent Cooper pair order parameter in flat-band and strongly interacting systems [8]. It will be show that this state can be characterised by a pseudogap in electron DOS determined by electron scattering by phase fluctuations. The mean-field theory describing a phase transition between the preformed Cooper pair and superconducting states will be presented showing that the superconducting transition temperature and the upper critical magnetic field are enhanced in the strong coupling regime.

References

- [1] Sacépé B., Feigelman M., Klapwijk T. M., *Nat. Phys.* 16, 734 (2020).
- [2] Volovik G. E., *JETP Lett.* 107, 518 (2018).
- [3] Andrei E. Y., MacDonald A. H., *Nature Material* 19, 1265 (2021).
- [4] Hirsch J. E., Scalapino D. J., *Phys. Rev. Lett.* 56, 2732 (1986).
- [5] Dzyaloshinskii I. E., *JETP Lett.* 46, 118 (1987).
- [6] Khodel V. A., Shaginyan V. R., *JETP Lett.* 51, 553 (1990).
- [7] Zyuzin A. A. and Zyuzin A. Yu., Superconductivity from incoherent Cooper pairs in strong-coupling regime, arXiv: 2308.04508.
- [8] Zyuzin A. A., Zyuzin A. Yu., Preformed Cooper pairs in flat band semimetals, *Phys. Rev. B (Letters)* 106, 020502 (2022).

SnS-андреевская спектроскопия сверхпроводящего $\text{NaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$

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

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

²*Московский физико-технический институт, г. Москва, Россия*

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

Слоистое соединение $\text{NaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$ относят к группе 111 железосодержащих сверхпроводящих (СП) пниктидов. Образец остаётся магнитным при слабом электронном допировании, температуры магнитного и структурного перехода в стехиометрическом составе $T_m \approx 43$ К и $T_s \approx 55$ К соответственно. Переход в СП состояние на фазовой диаграмме достигается при максимальной критической температуре $T_c \approx 22$ К, $x \approx 0.03$ [1]. Такие двойственные свойства объясняются наличием естественнофазового расслоения в объёмном кристалле: СП и магнитная фазы разделены в реальном пространстве. Исследование образцов осложняется быстрой деградацией в присутствии даже следовых количеств кислорода и паров воды, поэтому эксперимент требуется проводить в защитной атмосфере. На поверхности Ферми по результатам ARPES [2] присутствует дырочный цилиндр около Γ -точки зоны Бриллюэна и вложенные электронные цилиндры около M-точки, каждая зона вносит вклад в сверхпроводимость ниже T_c .

Целью нашей работы было определение величин СП щелей и их температурных зависимостей в $\text{NaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$ недодопированного и передопированного составов методами спектроскопии эффекта некогерентных многократных андреевских отражений (МАО), а также исследование температурного поведения повышенной андреевской динамической проводимости (ДП) при нулевом напряжении смещения $G_{\text{ZBC}}^A(T)$.

В исследованных монокристаллах номинального недодопированного состава $\text{NaFe}_{0.979}\text{Co}_{0.021}\text{As}$ и передопированного состава $\text{NaFe}_{0.955}\text{Co}_{0.045}\text{As}$, выращенных методом кристаллизации из раствора в расплаве из собственных компонентов (“self-flux”), при $T = 4.2$ К создавались контакты на микротрещине (техника «break-junction» [3]) типа

сверхпроводник-нормальный металл-сверхпроводник (SnS). Нами были проведены измерения вольтамперных характеристик (ВАХ) и спектров ДП андреевских баллистических контактов на основе железосодержащего арсенида с СП фазой Na(Fe,Co)As с критической температурой перехода $T_c \approx 20.4\text{--}22.7$ К, по исчезновению повышенной андреевской проводимости при нулевом смещении. При анализе ВАХ при гелиевой температуре $T = 4.2$ К обнаружены такие признаки реализации эффекта MAO, в соответствии с теоретическими моделями [4,5], как: повышенная проводимость при $eV = 0$, избыточный андреевский ток во всем диапазоне напряжений смещения, а также наличие субгармонической структуры (СГС) на значениях $eV_n(0) = 2\Delta(0)/n$, где n — натуральное число (на спектрах ДП наблюдаются острые минимумы); отсутствие сверхтоковой ветви на напряжении $eV = 0$ говорит о том, что режим некогерентный.

Чтобы обосновать наблюдение именно эффекта MAO, построили температурные зависимости $G_{ZBC}^A(T)$ для контактов с различными значениями сопротивления в нормальном состоянии и различными параметрами прозрачности. Теоретическое предсказание поведения величины нормированной андреевской ДП при $eV = 0$ в модели [4] в случае двухщелевой сверхпроводимости:

$$\frac{G_{ZBC}^A(T)}{G_N} \propto (1 - a) \tanh \frac{\Delta_L(T)}{2k_B T} + a \tanh \frac{\Delta_S(T)}{2k_B T} \quad (1)$$

где G_N — ДП контакта в нормальном состоянии выше T_c , k_B — константа Больцмана, a — парциальный множитель, определяющий вклад электронов зон с большой и малой СП щелями в $G_{ZBC}^A(T)$.

В качестве $\Delta_S(T)$ взяли экспериментальные положения минимумов СГС на температурных спектрах ДП в зависимости от температуры, а в качестве $\Delta_L(T)$ для случая анизотропной СП щели — как среднее значение между $\Delta_L^{\text{in}}(T)$ и $\Delta_L^{\text{out}}(T)$ наименьшим и наибольшим значением энергии связи куперовских пар в данных зонах. На рис. 1 представлены экспериментальные температурные зависимости проводимостей $G_{ZBC}^A(T)$, а также отдельно первое и второе слагаемое формулы (1). При $T < 0.5T_c$ полученные $G_{ZBC}^A(T)$ проходят между теоретическими кривыми и могут быть описаны в рамках двухщелевой модели с использованием экспериментальных $\Delta_{L,S}(T)$ с подобранным множителем $0 < a < 1$. Заметное падение $G_{ZBC}^A(T)$ вблизи T_c может быть вызвано пониженной плотностью электронных состояний вблизи уровня Ферми, характерной

для железосодержащих СП, и/или сильным неупругим рассеянием электронов в процессе МАО, и/или температурным размытием при $T > 2/3T_c$.

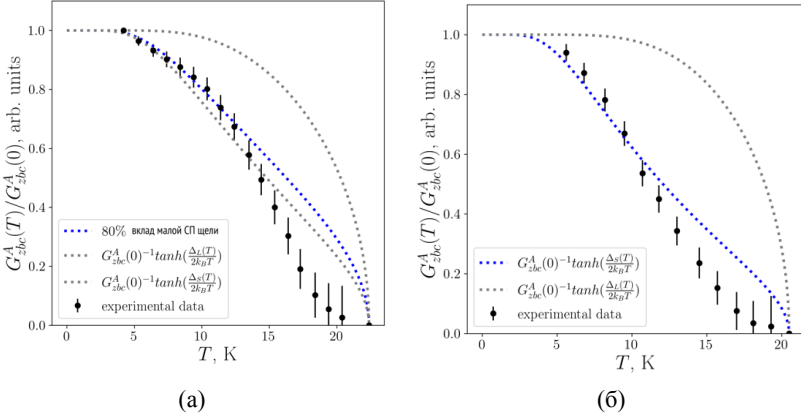


Рис. 1. Температурные зависимости экспериментальной андреевской проводимости при нулевом смещении $G_{ZBC}^A(T)$ в SnS-андреевских контактах на основе СП $\text{NaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$, нормированных на своё значение при $T = 4.2$ К (жирные точки): а) для недодопированного состава штриховыми серыми линиями показаны теоретические [4] вклады двух эффективных зон с $G_{ZBC}^A(T)$ на основе экспериментальных кривых $\Delta_{LS}(T)$, синяя штриховая линия между ними аппроксимация формулой (1) с весовым коэффициентом $a = 0.8$; б) для передопированного состава штриховые линии аналогично (а) вклады из (1), лучшая аппроксимация $a = 1$

Список литературы

- [1] Kuzmicheva T. E., Kuzmichev S. A. Electron and Superconducting Properties of the AFeAs (A= Li, Na) Family Alkali-Metal Pnictides: Current Stage of the Research (mini-review) // *JETP Letters*. 2021. Vol. 114. P. 630.
- [2] Ge Q. Q. [et al.]. Anisotropic but Nodeless Superconducting Gap in the Presence of Spin-Density Wave in Iron-Pnictide Superconductor $\text{NaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$ // *Phys. Rev. X*. 2013 3, P. 011020.
- [3] Кузьмичев С. А., Кузьмичева Т. Е. Техника “break-junction” применительно к слоистым сверхпроводникам // *Физика низких температур*. 2016. Т. 42. № 11. С. 1284–1310.
- [4] Gunsenheimer U., Zaikin A. D. Ballistic charge transport in superconducting weak links // *Phys. Rev. B*. 1994. Vol. 50. P. 6317.

- [5] Kueimmel R. Andreev scattering of quasiparticle wave packets and current-voltage characteristics of superconducting metallic weak links // *Phys. Rev. B.* 1990. Vol. 42. P. 3992.
- [6] Devereaux T. P., Fulde P. Multiple Andreev scattering in superconductor-normal metal–superconductor junctions as a test for anisotropic electron pairing // *Phys. Rev. B.* 1993. Vol. 47. P. 14638(R).

Обобщенные уравнения БКШ для исследования механизма сверхпроводимости ферропниктидов

А. Е. Каракозов

*Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН,
г. Москва, г. Троицк, Россия
E-mail: chkara@rambler.ru*

Электрон-бозонное взаимодействие спаривания — функция Элиашберга $\alpha^2(\mathbf{q}, \omega)F(\mathbf{q}, \omega)$ — в «обычных» сверхпроводниках может быть рассчитана как «из первых принципов» так и обращением уравнений Элиашберга с найденной экспериментально туннельной плотностью состояний $dI(V)/dV \sim N(V) = \text{Re}\{V/[V^2 - \Delta^2(V)]^{1/2}\}$. Для многозонных коррелированных железосодержащих сверхпроводников (далее ферропниктиды, ФП) и то и другое в настоящее время вряд ли возможно. Однако для исследования механизма спаривания в ФП в этом случае возможно ограничиться низкотемпературным пределом уравнений Элиашберга — уравнениями БКШ с энергией обрезания в виде «среднелогарифмической частоты» Ω_{ln} , определяемой как $\lambda \ln \Omega_{ln} = 2 \int d\omega \alpha^2(\omega)F(\omega) \ln \omega / \omega$, $\lambda = 2 \int d\omega \alpha^2(\omega)F(\omega) / \omega$ [1, 2], дополненными хорошо известными для «обычных» сверхпроводников эмпирическим соотношениями [2], обобщение которых для многозонного сверхпроводника в виде (1), (2) хорошо выполняется для большой « σ »-щели и критической температуры T_c в двухзонном сверхпроводнике MgB_2 с очень сложными фононным и электронным спектрами.

$$\frac{2\Delta_{\sigma}(0)}{T_c} = \left(\frac{2\Delta_{\max}(0)}{T_c} \right)_{2band}^{BCS} \left[1 + 12.5(T_c / \Omega_{ln})^2 \ln(\Omega_{ln} / 2T_c) \right], \quad (1)$$

$$\frac{T_c}{1.2\Omega_{\ln}} = \lambda_{\text{eff}}^{2\text{band}}. \quad (2)$$

В частности, можно показать, что в MgB_2 найденным из уравнений Элиашберга с рассчитанной «из первых принципов» спектральной функцией $\alpha^2(\mathbf{q}, \omega)F(\mathbf{q}, \omega)$ [3] значениям $\Delta_{\pi}/\Delta_{\sigma}=0.380$, $2\Delta_{\sigma}/T_c = 4.18$, $T_c = 39.4$ К в обобщённой с учетом формул (1), (2) модели БКШ соответствуют значения $\Delta_{\pi}/\Delta_{\sigma} = 0.362$, $2\Delta_{\sigma}/T_c = 4.24$ и $T_c = 42$ К.

Обращение таких уравнений с некоторым минимальным набором экспериментальных параметров позволяет определить в ФП как константы связи в фононном и нефононном — спин-флуктуационном (СФ) каналах сверхпроводимости, так и степень корреляции спиновой и зарядовой компонент СФ возбуждений. В отличие от MgB_2 ситуация в ФП несколько проще. Так, можно показать, что в ФП с низкой плотностью носителей и малыми дырочными (« h », вокруг точки Γ) и электронными (« e », вокруг точек $X = (\pi, 0)$ и $Y = (0, \pi)$) карманами модельное БКШ межзонное СФ e - h взаимодействие $V_{SF}(\mathbf{k}_e, \mathbf{k}_h) \approx G_s$, а внутризонные взаимодействия $U_h(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \approx U$, $U_e(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \approx U(1 \pm d\cos 2\varphi_{XY})(1 \pm d\cos 2\varphi'_{XY})$, причем коэффициент анизотропии e -щели $\Delta_e(\mathbf{k}) = \Delta_e(1 + \eta\cos 2\varphi)$ не совпадает с коэффициентом анизотропии d взаимодействия U_e [4]. Например, в двух зонном БКШ сверхпроводнике $\eta = d[1 - \Lambda_0(\lambda_h, x, \gamma, \theta)]/(1 - x^2)$, где $d = G_d/U \leq 1$, $x = G_s/U$ ($G_{s,d}$ — s и d компоненты СФ), $\theta = \Delta_h/\Delta_e$ и $\gamma = N_e/N_h$ — отношение плотностей состояний в e и h зонах.

Двухзонная система уравнений БКШ в виде

$$\ln(\theta) = \Lambda_1(\lambda_h, x, \gamma, \theta), \quad (3)$$

$$\ln(1.2\Delta_h / 2\Omega_{\log}) = \Lambda_2(\lambda_h, x, \gamma, \theta), \quad (4)$$

где $\lambda_h = UN_h$ — максимальная константа связи (в h -зоне), а Λ_i простые алгебраические выражения, совместно с (1), (2) для найденных экспериментально Δ_h , Δ_e , T_c , η и γ в двухзонном сверхпроводнике определяют все константы взаимодействия в фононном и нефононном каналах, доминирующий механизм спаривания и параметр корреляции спиновой и зарядовой компонент G_d / G_s , существенный для построения СФ теории сверхпроводимости в ФП. Такой же поход может быть применен и для исследования механизмов спаривания и свойств СФ возбуждений в ФП и с большим числом зон. Все необходимые для решения обращенных

уравнений БКШ в виде (3), (4) с учетом соотношений (1), (2) экспериментальные параметры в принципе могут быть получены, например, а одном туннельном эксперименте.

Список литературы

- [1] Каракозов А. Е., Максимов Е. Г., Машков С. А., *ЖЭТФ* 68, 1937 (1975).
- [2] Allen P. B. and Dynes R.C., *J. Phys. C: Solid State Phys.*, Vol. 8, 1975.
- [3] Liu A. Y., Mazin I. I. and Kortus J., *Phys. Rev. Lett.* 87 087008 (2001).
- [4] Karakozov A. E., Magnitskaya M. V., Kadyrov L. S., and Gorshunov B. P., *Phys. Rev. B.* 99 054504 (2019).

Структура сверхпроводящего параметра порядка пниктидов $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ семейства 1144 по данным туннельной спектроскопии планарных контактов на микрорешине

Т. Е. Кузьмичева^{1*}, С. А. Кузьмичев^{2,1}, К. С. Перваков², В. А. Власенко²,
А. Д. Ильина^{2,3}, И. А. Никитченков^{1,2}, А. С. Медведев²

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

²*Физический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, г. Москва, Россия*

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

^{*}*E-mail: kuzmichevate@lebedev.ru*

Пниктиды $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ (семейство 1144) полностью немагнитны и сверхпроводят в стехиометрическом составе ниже $T_c \approx 36$ К. С помощью техники «break-junction» [1] в образцах создавались планарные SIS и SnS-наноконтакты (S — сверхпроводник, n — тонкий нормальный металл, I — изолятор). В SnS-контактах с некогерентным транспортом наблюдался эффект многократных андреевских отражений (IMARE), вызывающий избыточный ток на $I(V)$ -характеристике при любых смещениях eV , повышенную динамическую проводимость dI/dV при $eV \rightarrow 0$, а также серии щелевых особенностей при $eV_n = 2\Delta_d(0)/n$, $n = 1, 2, \dots$, положение которых напрямую определяет величины сверхпроводящих (СП) параметров порядка при любых температурах вплоть до T_c [2].

Методами IMARE-спектроскопии установлена многощелевая сверхпроводимость $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ и напрямую определены величины трех СП параметров порядка $\Delta_L^{\text{out}}(0)$, $\Delta_L^{\text{in}}(0)$, $\Delta_S(0)$ с характеристическими отношениями $r_i \approx 5.5, 3.7, 1.5$, соответственно ($r_i \equiv 2\Delta_i(0)/k_B T_c$). Показано, что величины r_i воспроизводятся, не зависят от геометрических размеров контакта и его сопротивления и соответствуют объемным СП параметрам порядка.

Напрямую определенные температурные зависимости СП щелей $\Delta_i(T)$ типичны для случая умеренного межзонного взаимодействия в k -пространстве (рис. 1, слева). Зависимости $\Delta_L^{\text{out},\text{in}}(T)$ схожи друг с другом (отношение $\Delta_L^{\text{out}}/\Delta_L^{\text{in}}$ практически не меняется с температурой, как показано на вставке к рис. 1, слева), что позволяет, предположительно, отнести эти СП параметры порядка к единому, анизотропному СП конденсату с большой СП щелью Δ_L , имеющей расширенный s -волновой тип симметрии без точек нулей. Малая СП щель с температурой закрывается чуть быстрее, что характерно для «слабого» конденсата в многощелевом сверхпроводнике.

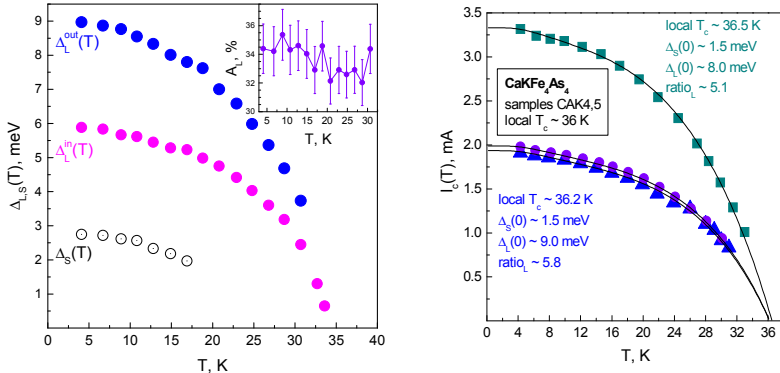


Рис. 1. Слева: температурные зависимости трех СП параметров порядка (кружки), измеренные напрямую методом IMARE-спектроскопии. На вставке показана температурная зависимость предположительной анизотропии большой СП щели $A_L \equiv 100\% \cdot [1 - \Delta_L^{\text{in}}/\Delta_L^{\text{out}}]$. Справа: температурные зависимости амплитуды критического джозефсоновского тока (точки) для разных SIS-контактов. Сплошными линиями показаны аппроксимации многозонной моделью на основе формулы Амбегаокара – Баратова и экспериментальных температурных зависимостей $\Delta_i(T)$ (слева)

Показано, что с использованием экспериментальных $\Delta_c(T)$ возможно описать температурную зависимость критического джозефсоновского тока $I_c(T)$ в рамках многозонного подхода на основе формулы Амбегао-кара–Баратова (рис. 1, справа).

Полученная щелевая структура $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ (число СП параметров порядка, их характеристические отношения и вид температурных зависимостей) близка к таковой для родственного пниктида $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ с магнитным переходом ниже T_c [3], а также пниктидам семейства $\text{Ba}(\text{Fe,Ni})_2\text{As}_2$ и $(\text{Ba,K})\text{Fe}_2\text{As}_2$ [4], исследованных нами ранее.

Список литературы

- [1] Кузьмичев С. А., Кузьмичева Т. Е., *ФНТ*. 2016. № 11. С. 1284–1310.
- [2] Kümmel R., Gunsenheimer U., Nikolsky R., *Phys. Rev. B*. 1990. V. 42. P. 3992.
- [3] Kuzmicheva T., Pervakov K., Vlasenko V., Degtyarenko A., Kuzmichev S., *J. Supercond. Novel Magn.* 2024. V. 37. № 2. P. 379–388.
- [4] Kuzmicheva T., Kuzmichev S., Pervakov K., Vlasenko V., *Phys. Rev. B*. 2021. V. 104. P. 174512.

Магнитные свойства и сверхпроводимость полигидридов железа, синтезированных при высоких давлениях мегабарного диапазона

И. С. Любутин^{1*}, А. Г. Гаврилюк^{1,2}, В. В. Стружкин³, Д. Н. Трунов²,
С. Н. Аксёнов², А. А. Миронович², М. В. Любутина¹, И. А. Троян¹

¹Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова,
НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия

²Институт ядерных исследований РАН, г. Троицк, г. Москва, Россия

³Center for High Pressure Science and Technology Advanced Research,
Shanghai, China

*E-mail: lyubutinig@mal.ru

Вначале мы установили, что ферромагнитная ОЦК-фаза $\alpha\text{-Fe}$ при переходе в ГПУ-фазу $\epsilon\text{-Fe}$ при давлениях выше 15 ГПа становится и остаётся немагнитной даже при низких температурах вплоть до 4 К [1].

Свойства гидридов железа, высоко насыщенного водородом, ранее экспериментально не изучались, однако теория предсказывает, что некоторые гидриды железа могут быть сверхпроводниками [2].

В данной работе методом лазерного нагрева образцов железоборазан (NH_3BH_3) в камерах с алмазными наковальнями при давлениях до 216 ГПа и температурах до 2000 К синтезированы несколько фаз полигидридов железа FeH_x .

В первой серии экспериментов при давлениях 77–157 ГПа получены несколько соединений FeH_x , и их магнитные и электронные свойства изучены методом синхротронной мессбауэровской спектроскопии на ядрах Fe-57 (nuclear forward scattering -NFS) при высоких давлениях в интервале температур 4–300 К во внешних магнитных полях до 5 Тл [1, 3]. Данные NFS указывают на образование семи соединений FeH_x с весьма разными электронными и магнитными свойствами (рис. 1). Температура Нееля T_N , определенная для фазы FeH_2 при давлении 82 ГПа, составляет около 174 К [3]. Еще одним неожиданным результатом является открытие одной из фаз FeH_x неизвестного состава, которая при давлении 128 ГПа остается магнитоупорядоченной в диапазоне температур 4–300 К, а экстраполированное значение намагниченности показывает, что значение T_N может достигать ~ 2100 К! [3]. Существование магнитных фаз соединений железа при столь рекордно высоком давлении уникально и ранее не наблюдалось. Наши предварительные рентгеновские и NFS-исследования [3] показали, что сверхпроводимость не возникает в полигибридах железа при насыщении водородом вплоть до FeH_4 .

В результате дополнительных синтезов при более высоких давлениях до 216 ГПа нами впервые были синтезированы две сверхпроводящие фазы полигидридов железа $\text{FeH}_x(\text{I})$ и $\text{FeH}_x(\text{II})$ с более высоким содержанием водорода. Их сверхпроводящие свойства изучены путем измерения электросопротивления $R(T)$ при высоких давлениях (180–216 ГПа) в диапазоне температур 8–300 К (рис. 2). На основании данных $R(T)$ были идентифицированы две сверхпроводящие фазы FeH_x с максимальными критическими температурами перехода $T_c \approx 25.0$ и 27.7 К [4]. Сверхпроводимость в гидридах железа, обнаруженная при измерении электросопротивления $R(T)$, подтверждается дополнительными измерениями дифференциальной проводимости методом микро-контактной спектроскопии (PCS).

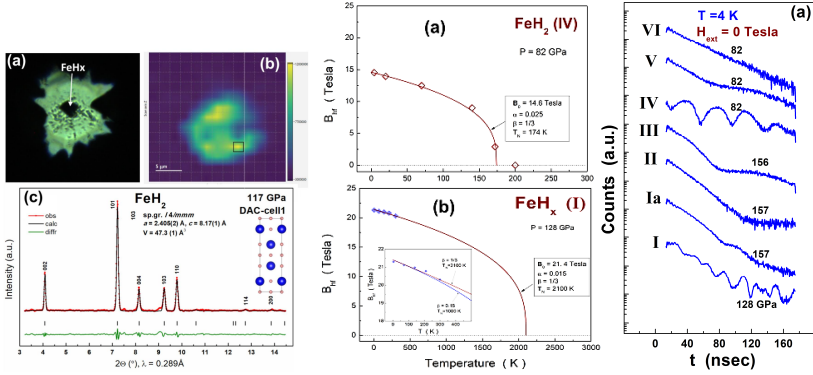


Рис. 1. Слева: фотография образца в камере высокого давления (а) и распределение фазы FeH_2 по образцу ((б) показано слева желтым цветом). Рентгеновская дифрактограмма фазы $I4/mmm$ — FeH_2 и её кристаллическая структура (с). В центре: температурная зависимость магнитного поля B_{Hf} на ядрах Fe-57 в фазе $I4/mmm$ - $\text{FeH}_2(\text{IV})$ при давлении 82 ГПа и в фазе $\text{FeH}_x(\text{I})$ при давлении 128 ГПа. В фазе $\text{FeH}_x(\text{I})$ экстраполированное значение температуры Нееля около 2100 К. Справа: спектры NFS семи различных фаз полигидридов железа при температуре 4 К. Осцилляции в спектрах указывают на магнитные корреляции

По данным обработки микрофотографий выполнен расчёт удельного объёма железа V_{Fe} в полигидридах $\text{FeH}_x(\text{I})$ и $\text{FeH}_x(\text{II})$ и построена его барическая зависимость. При сравнении с теоретическими расчётами оказалось, что удельный объём на один атом железа в фазе $\text{FeH}_x(\text{I})$ соответствует фазе FeH_5 , а в фазе $\text{FeH}_x(\text{II})$ соответствует структуре FeH_6 [4]. Мы предполагаем, что полученные в нашей работе сверхпроводящие фазы могут соответствовать структуре FeH_5 (пр. гр. $I4/mmm$) и/или структуре FeH_6 (пр. гр. $Cmmm$ или $C2/c$), предсказанным в работе [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (гранты № 22-12-00163 и № 22-12-00163). Рентгеноструктурные и NFS-исследования выполнены при поддержке НИЦ «Курчатовский институт».

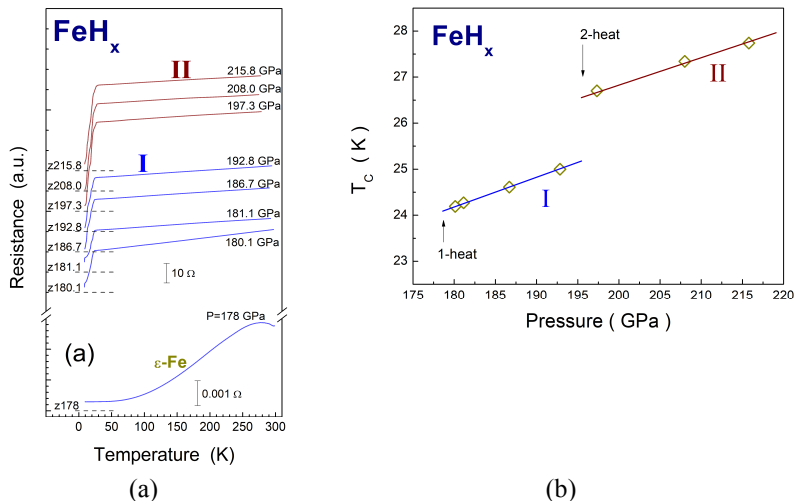


Рис. 2. (а) Температурная зависимость сопротивления $R(T)$ в гидридах $\text{FeH}_x(\text{I})$ и $\text{FeH}_x(\text{II})$ при высоких давлениях (180–216 ГПа) в диапазоне температур ~ 8 –300 К. (б) Зависимость T_c от давления для гидридов $\text{FeH}_x(\text{I})$ и $\text{FeH}_x(\text{II})$. Для образца, полученного при $P_{\text{syn}} = 178$ ГПа, $T_c \approx 25$ К. Для образца, полученного при $P_{\text{syn}} = 195$ ГПа, $T_c \approx 28$ К.

Список литературы

- [1] Гаврилюк А. Г., Стружкин В. В., Аксёнов С. Н., Миронович А. А., Троян И. А., Иванова А. Г., Любутин И. С. Электронные и магнитные свойства фазы железа ϵ -Fe при высоких давлениях до 241 ГПа в области температур 4–300 К // *Письма в ЖЭТФ* **117** (2023) 132–144.
- [2] Kvashnin A. G., Kruglov I. A., Semenov D. V., and Oganov A. R. Iron Superhydrides FeH_5 and FeH_6 : Stability, Electronic Properties, and Superconductivity // *J. Phys. Chem. C* **122**, (2018) 4731.
- [3] Гаврилюк А. Г., Стружкин В. В., Аксёнов С. Н., Иванова А. Г., Миронович А. А., Троян И. А., Пахомова А., Любутин И. С. Синтез и магнитные свойства фаз полигидридов железа при высоких давлениях мегабарного диапазона // *Письма в ЖЭТФ* **116** (2022) 780–793.
- [4] Гаврилюк А. Г., Троян И. А., Стружкин В. В., Трунов Д. Н., Аксёнов С. Н., Миронович А. А., Иванова А. Г., Любутин И. С. Синтез и сверхпроводящие свойства некоторых фаз полигидридов железа при высоких давлениях // *Письма в ЖЭТФ* **118** (2023) 735–747.

О природе спаривания носителей заряда в ВТСП на основе BaBiO_3

А. П. Менушков

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

Родительское соединение BaBiO_3 висмутатных высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) BaBi(Pb)O_3 ($T_c \approx 13$ К) и Ba(K)BiO_3 ($T_c \approx 30$ К) со структурой перовскита, демонстрирует необычные электронные и структурные свойства, которые можно удовлетворительно объяснить, если предположить, что все носители заряда находятся в спаренном состоянии [1]. Используя рентгеновскую спектроскопию поглощения (EXAFS + XANES) на синхротронном излучении мы обнаружили в висмутатах аномальный низкотемпературный ангармонизм, получивший объяснение в виде колебаний части атомов кислорода в двухъямном потенциале [2]. Причиной наблюдаемой аномалии является различное электронное заполнение соседних октаэдрических комплексов.

На основе экспериментов мы предложили модель диспропорционирования связи $2\text{Bi}\underline{\text{L}}^1\text{O}_6 \rightarrow \text{Bi}\underline{\text{L}}^0\text{O}_6 + \text{Bi}\underline{\text{L}}^2\text{O}_6$, которая подчеркивает роль спаривания в реальном пространстве и может объяснить аномалии основного состояния BaBiO_3 , отмеченные в [1]. В этой модели $\text{Bi}\underline{\text{L}}^2\text{O}_6$ представляет собой несущий пару дырок $\underline{\text{L}}^2$ малый октаэдр, который ведет себя как жесткая молекула с вакантной верхней антисвязывающей орбиталью $\text{Bi}6s - \text{O}2p_{\sigma^*}$. $\text{Bi}\underline{\text{L}}^0\text{O}_6$ представляет собой большой мягкий октаэдр, несущий электронную пару и проявляющий себя как нестабильная молекула с заполненной верхней антисвязывающей орбиталью $\text{Bi}6s - \text{O}2p_{\sigma^*}$. При этом локальная электронная пара может туннелировать между соседними комплексами в соответствии с динамическим обменом $\text{Bi}\underline{\text{L}}^2\text{O}_6 \leftrightarrow \text{Bi}\underline{\text{L}}^0\text{O}_6$, вызывая колебания атома кислорода в двухъямном потенциале.

Наша модель диспропорционирования связи хорошо согласуется с результатами рентгеновской и нейтронной дифракции, неупругого рас-

сеяния нейтронов и электронов, комбинационного рассеяния света и фотоэмиссионной спектроскопии. Учитывая сохранение спаривания в реальном пространстве, наблюдаемое при допировании калием исходного BaBiO_3 [3], она позволила предложить новый сценарий микроскопического механизма сверхпроводимости в $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{BiO}_3$ на основе существования пространственно-разделенной ферми-бозе-смеси [4]. Однако исследования, проведенные до настоящего времени с использованием экспериментальных и теоретических методов можно рассматривать лишь как косвенное доказательство локального спаривания носителей заряда в основном состоянии BaBiO_3 .

Недавно, совместно с группой ученых из Гамбурга, мы провели уникальный эксперимент на Европейском лазере на свободных электронах EuXFEL по рентгеновской спектроскопии поглощения BaBiO_3 с временным разрешением при возбуждении фемтосекундным импульсом оптического лазера через оптическую щель [5]. Результаты эксперимента дают прямое доказательство существования локальных пар электронов и дырок в основном состоянии BaBiO_3 и позволяют сделать однозначные выводы о природе спаривания носителей заряда в висмутатах.

Работа поддержана Минобрнауки РФ (соглашение № 075-15-2021-1352).

Список литературы

- [1] Uchida S., Kitazawa K., and Tanaka S., *Phase Transitions* 8, 95 (1987).
- [2] Menushenkov A. P. and Klementev K. V., *J. Phys.: Condens. Matter.* 12, 3767 (2000).
- [3] Menushenkov A. P., Troyan I. A., and Eremets M. I., *JETP Lett.* 77, 521 (2003).
- [4] Menushenkov A. P., Klementev K. V., Kuznetsov A. V., and Kagan M. Y., *J. Exp. Theor. Phys.* 93, 615 (2001); *J. Supercond. Novel Magn.* 29, 701 (2015).
- [5] Menushenkov A. P. et al. — in press.

Электронная зонная структура, природа химической связи, магнитные и магнитоэлектрические свойства La_2CuO_4 и $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$ — исходных соединений для изготовления высокотемпературных сверхпроводников

В. Г. Орлов^{1,2}, Г. С. Сергеев¹

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
г. Москва, Россия

²Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет), г. Москва, Россия

La_2CuO_4 и $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$, несмотря на различия в составах и кристаллических структурах, имеют ряд схожих свойств, которые, по-видимому, могут рассматриваться в качестве признаков, предвещающих появление высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) при фазовом переходе полупроводник-металл, происходящем в результате допирования ($\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$) или формирования соединения типа $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$. В качестве первого подобного свойства можно назвать специфический механизм химической связи, наличие которого было выявлено нами в $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$ [1] и La_2CuO_4 [2], также как и в самих ВТСП [1] с помощью анализа особенностей в распределении зарядовой плотности. Данный механизм характеризуется количеством критических точек типа bond (bond critical points (BCPs)) в распределении зарядовой плотности, приходящихся на неэквивалентные атомы в элементарной ячейке соединения, которое значительно превышает число валентных электронов в атомах. Кроме того, в ВТСП и в исходных для их получения соединениях Лапласиан зарядовой плотности $\nabla^2\rho_b$ для всех BCPs имеет положительный знак [1, 2], свидетельствующий об отсутствии ковалентной связи и о выталкивании зарядовой плотности из областей вблизи BCPs [3]. Следует отметить также обнаруженную нами [1] корреляцию между величиной Лапласиана зарядовой плотности в BCP с наибольшим значением ρ_b и критической температурой T_c ВТСП. Данный механизм химической связи может стимулировать флуктуации зарядовой плотности. Наличие таких флуктуаций с характерной энергией порядка 10 мэВ практически во всех содер-

жащих медь ВТСП было обнаружено при температурах выше температуры появления псевдощели в широкой области концентраций дырок p на фазовой диаграмме T - p с помощью метода неупругого рассеяния рентгеновского излучения (Inelastic X-ray Scattering (RIXS)) [4].

В качестве второго, общего для La_2CuO_4 и $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$ свойства, можно назвать линейный магнитоэлектрический эффект (ЛМЭЭ). Обнаружение ЛМЭЭ в $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$, а также парамагнетизма, зависящего от магнитной предыстории образца [5], было интерпретировано в [5] с помощью предположения о наличии в $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$ парамагнитных центров – дырок в электронной подсистеме кислорода, которые могут совершать перескоки между атомами кислорода с переворотом спина. Дополнительным свидетельством наличия ЛМЭЭ в $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$ могут служить расщепления линий спектров ЯКР ^{209}Bi , вызванные внутренним локальным магнитным полем величиной порядка 170 Гс [6]. Расщепления линий ЯКР спектров ^{139}La в орторомбическом La_2CuO_4 , обнаруженные в работе [7], интерпретировались в ряде последующих работ как следствие слабо неколлинеарного антиферромагнитного упорядочения спинов Cu.

В данной работе на основе результатов расчетов электронной зонной структуры La_2CuO_4 [2], выполненных с помощью программного комплекса WIEN2k [8] при учете спиновой поляризации атомов Cu, вычислены значения градиентов кристаллического электрического поля (ГЭП) в местах расположения ядер La и Cu. В качестве обменно-корреляционного функционала в [2] была использована комбинация модифицированного Траном и Блахой обменного потенциала Беке и Джонсона [9] и корреляций в линейном по зарядовой плотности приближении без учета сильных корреляций типа взаимодействия Хаббарда U (кулоновского отталкивания d -электронов с противоположно направленными спинами на одном и том же атоме Cu). Корректность использованной процедуры подтверждена в [2] рассчитанными значениями полупроводниковой щели порядка 2 эВ, магнитным моментом атомов меди 0.725 μ_B , а также значениями энергий валентных электронов и оптическими свойствами La_2CuO_4 , совпадающими с экспериментальными данными. Рассчитанные значения констант квадрупольной связи для ядер ^{139}La и $^{63,65}\text{Cu}$ в La_2CuO_4 также оказались близкими к экспериментальным.

Для орторомбического La_2CuO_4 , симметрия которого описывается пространственной группой $Cmce$ (D_{2h}^{18}), имеется два магнитных класса, допускающие наличие в нем ЛМЭЭ: $D_{2h}(D_2)$ и $D_{2h}(C_{2v})$. В данной работе обсуждается возможность их экспериментального наблюдения, а также предложен сценарий появления ВТСП, основанный на присутствии в образце флуктуаций зарядовой плотности и ЛМЭЭ.

Список литературы

- [1] Orlov V. G., Sergeev G. S. Peculiarities of electron density distribution in bismuth chalcogenides, iron pnictides, cuprates and related unconventional superconductors // *Physica B*. 2018. V. 536. P. 839–842.
- [2] Орлов В. Г., Сергеев Г. С. Электронная зонная структура, антиферромагнетизм и природа химической связи в La_2CuO_4 // *ЖЭТФ*. 2023. Т. 164. № 1. С. 107–116.
- [3] Bader R. F. W. Atoms in Molecules: A Quantum Theory. – International Series of Monographs on Chemistry 22. — Oxford: Oxford Science Publications, 1990.
- [4] Arpaia R., Chiringhelli G. Charge order at high temperature in cuprate superconductors // *J. Phys. Soc. Jpn.* 2021. Vol. 90. P. 111005.
- [5] Nizhankovskii V. I., Kharkovskii A. I., Orlov V. G. Magnetoelectric effect in $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$ // *Ferroelectrics*. 2002. Vol. 279. P. 157–166.
- [6] Кравченко Э. А., Орлов В. Г., Шлыков М. П. Магнитные свойства кислородных соединений висмута (III) // *Ученые химии*. 2006. Т. 75. № 1. С. 86–104.
- [7] Kitaoka Y. et al. ^{139}La pure quadrupole resonance of high T_c superconducting materials $(\text{La}_{1-x}\text{M}_x)_2\text{CuO}_4$ (M= Ba, Sr) // *Japanese J. Appl. Phys.* 1987. Vol. 26. № 4. P. L397–L398.
- [8] Blaha P. et al. WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties — Austria: Vienna University of Technology, 2021.
- [9] Tran F., Blaha P. Accurate band gaps of semiconductors and insulators with a semilocal exchange-correlation potential // *Phys. Rev. Lett.* 2009. Vol. 102. P. 226401.

Спектроскопия андреевского отражения FeSe. Двухзонное описание зависимостей энергетических щелей от температуры

В. А. Степанов¹, М. В. Голубков¹, А. В. Садаков¹,
А. С. Усольцев¹, Д. А. Чареев²

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

²Институт экспериментальной минералогии Российской академии наук,
г. Черноголовка, Россия

Зависимости энергетических щелей многозонного сверхпроводника от температуры $\Delta_i(T)$ содержат ценную информацию о зонной структуре, симметрии параметров порядка, константах внутризонного и межзонного спаривающих взаимодействий $\lambda_{ij} = V_{ij}N_j$ ($i, j = 1, 2$; V_{ij} — сила взаимодействия, N_j — плотность состояний на уровне Ферми). Изучение зависимостей $\Delta_i(T)$ в двухзонном сверхпроводнике FeSe ($T_c = (9 - 13)$ К) в работах [1–5] дали противоречивые результаты. Измерения на точечных контактах [1–3] и по проникновению магнитного поля в кристалл [4] показали практически полное отсутствие межзонного взаимодействия. Изучение зависимости критического магнитного поля $H_{c2}(T)$ от температуры и направления при напряжённости поля до 38 Т и температуре $T/T_c = 1-0.3$ показало необходимость учета межзонного рассеяния [5].

В нашей работе измерены спектры андреевского отражения $\sigma(V) = dI/dV(V, T)$ точечных контактов между токопроводящим клеем на основе Ag и высококачественным кристаллом FeSe [6] (контакт Ag/FeSe) в диапазоне температур $T = (4+13)$ К. Анализ спектров в рамках упрощенной двухзонной модели $\sigma(V) = \sigma_1(V, \Delta_1, \Gamma_1, Z_1) \times w + \sigma_2(V, \Delta_2, \Gamma_2, Z_2) \times (1 - w)$ (5 свободных параметров вместо семи: Δ_1, Δ_2 — энергетические щели зон s-симметрии, $\Gamma_1, \Gamma_2 = 0$ — параметры уширения, $Z_1 = Z_2$ — параметры туннельного барьера, w — вклад первой зоны в проводимость [2]) выявил две энергетические щели, закрывающиеся при одной температуре и их зависимости от температуры $\Delta_{1,2}(T)$. Амплитуды энергетических щелей FeSe Δ_1 и Δ_2 при разных температурах, полученные в результате аппроксимации измеренных проводимостей $\sigma(V)$, приведены на рис. 1 сим-

волами. Видно, что температурная зависимость $\Delta_1(T)$ резко изменялась при $T > 9.5$ К и Δ_1 обращалась в ноль при $T \approx 12$ К. Такая зависимость $\Delta_1(T)$ связана с появлением на поверхности FeSe тонкого слабо связанного с объёмом кристалла слоя с большей, относительно T_c кристалла критической температурой в результате допирования поверхности FeSe органическими растворителями, входящими в состав токопроводящего клея. Вследствие небольшой толщины и слабой связи с объёмом, этот слой при $T < 9.5$ К оказывал незначительное влияние на энергетические щели FeSe [7]. На вставке рис. 1 показаны зависимости от температуры параметров Γ_1 , Z_1 , w . Параметр барьера $Z_1 \approx 0.7$ практически не изменялся с ростом температуры до 9.5 К, как и в работе [2]. Γ_1 умеренно увеличивался с T , что естественно, рост w , по-видимому, связан с разной скоростью уменьшения амплитуд щелей и зависимостью проводимости в нормальном состоянии $\sigma_N(V, T)$ от температуры.

Анализ измеренных зависимостей $\Delta_{1,2}(T)$ в диапазоне температур (4.2 ÷ 9.5) К проводился в рамках модели Москаленко–Suhl [8]:

$$\Delta_i = \sum_{j=1,2} \lambda_{ij} \Delta_j F(\Delta_j), \quad i=1,2$$

$$F(\Delta_i) = \int_0^{\omega_D} \frac{dE}{\sqrt{E^2 + \Delta_i^2}} \tanh \frac{\sqrt{E^2 + \Delta_i^2}}{2k_B T} \quad (1)$$

где E — энергия, k_B — постоянная Больцмана, $\omega_D = 13.67$ meV — энергия Дебая в FeSe [9]. Для двухзонного сверхпроводника из уравнений (1) получим систему уравнений (2):

$$\begin{cases} \Delta_1(1 - \lambda_{11}F(\Delta_1)) - \Delta_2\lambda_{12}F(\Delta_2) = 0, \\ \Delta_2\lambda_{21}F(\Delta_1) - \Delta_2(1 - \lambda_{22}F(\Delta_2)) = 0. \end{cases} \quad (2)$$

Уравнения (2) решались численно. Подбор констант λ_{ij} для аппроксимации измеренных величин $\Delta_1(T)$ и $\Delta_2(T)$ проводился по критерию минимума суммы квадратов отклонений измеренных точек от вычисленных $\Delta_i(T)$. Результаты этой работы показаны на рис. 1 линиями. $\Delta_1(T)$ и $\Delta_2(T)$ обращались в ноль при одной температуре. Критическая температура кристалла FeSe, найденная в точке $\Delta_i(T) = 0$, равна $T_c = 10.2$ К. Эта температура совпадает с началом перехода кристалла в сверхпроводящее состояние по зависимости $\rho_{ab}(T)$. Константы спаривающих внутри и меж-

зонных взаимодействий и энергетические щели зон при $T = 0$ К равны: $\lambda_{11} = 0.63$, $\lambda_{22} = 0.13$, $\lambda_{12} = 0.7$. $\lambda_{21} = 0.09$, $\Delta_1(0) = 2.09$ meV ($2\Delta_1/k_B T_c = 4.7$), $\Delta_2(0) = 0.63$ meV ($2\Delta_2/k_B T_c = 1.4$).

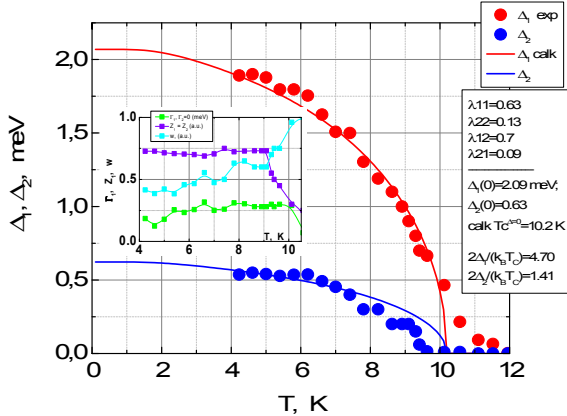


Рис. 1

Полученные результаты указывают на слабое спаривающее взаимодействие в первой (сильной) зоне, сравнимое с ним межзонаное взаимодействие и s++ симметрию параметра порядка, что согласуется с выводами работы [6].

Список литературы

- [1] Ponomarev Ya. G. et al., *J. Supercond. Nov. Magn.* **26**, 2867 (2013).
- [2] Naidyuk Yu. G. et al., *Phys. Rev. B* **96**, 094517 (2017).
- [3] Bashlakov D. L. et al., *Low Temp. Phys.* **45**, 1222 (2019).
- [4] Khasanov R. et al., *Phys.Rev. Lett.* **104**, 087004 (2010).
- [5] Bristow M., Gower A., Prentice J. C. A. et al., *Phys. Rev. B* **108**, 184507 (2023).
- [6] Chareev D., Osadchii E., Kuzmicheva T. et al., *CrystEngComm.* **15**, 1989 (2013).
- [7] Vrba J. and Woods S. B. *Phys. Rev. B* **4**, 87 (1971).
- [8] Suhl H., Matthias B. T., and Walker L. R. *Phys. Rev. Lett.* **3**, 552 (1959).
- [9] Zvyagina G. A. et al., *EPL*, **101**, 56005 (2013).

Динамический эффект близости в гибридной структуре сверхпроводник / ферромагнитный диэлектрик

Я. В. Туркин¹, Н. Г. Пугач¹

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

Инжектирование чистых сверхпроводящих спиновых токов и управление магنونным спектром в гибридных структурах типа сверхпроводник/ферромагнитный диэлектрик, открывает потенциальные возможности для создания устройств сверхпроводящей спинтроники и магноники. Такие устройства не будут испытывать Джоулева нагрева и обеспечат высокую скорость переключения между логическими состояниями, длительное время спиновой релаксации, а также ненулевой эффект связи между различными магнитными типами колебаний. Так, например, использование динамического эффекта близости, потенциально позволяет создавать направленные магنونные ответвители для реализации логических элементов [1], данные ответвители обладают значительно лучшим коэффициентом связи, чем дипольные ответвители, предложенные ранее. Также подобные гибридные структуры могут найти применение в магنونных кристаллах, и гибридных метаматериалах.

В работе рассмотрена теоретическая модель динамического эффекта близости, построенная в формализме системы линеаризованных нестационарных уравнений Узаделя [2] и Ландау–Лифшица–Гильберта, которые описывают связанный линейный оклик сверхпроводника и ферромагнитного диэлектрика. Учитывая периодический характер прецессии намагниченности, уравнение Узаделя может быть записано в виде Фурье-разложения [3], что позволяет получить стационарную задачу в частотном пространстве. Обратный эффект близости сверхпроводника с ферромагнитным диэлектриком был учтен при помощи нестационарного спинового матричного тока, инжектируемого из магнитного слоя [4]. В целях упрощения модели, в граничных условиях для сверхпроводника учитывается только слагаемое первого порядка по углу спинового смешивания. Система линеаризованных уравнений была решена аналитически и численно. Построены распределения спинового тока и наведенной намагниченности

внутри сверхпроводника и на его интерфейсе с магнетиком, исследована их зависимость от температуры, а также влияние спиновой поляризации квазичастиц на исследуемую систему. Полученные результаты позволяют рассмотреть влияние эффекта близости сверхпроводника на возможное возникновение ненулевого коэффициента линейной связи между различными спиновыми гармониками в магнетике.

Работа поддержана научным фондом НИУ ВШЭ.

Список литературы

- [1] Bobkova I .V. et al. Magnon-cooparons in magnet-superconductor hybrids // *Comm. Mat.*, 2022, 3, № 1.
- [2] Brinkman A. et al. Microscopic nonequilibrium theory of double-barrier Josephson junctions // *Phys. Rev. B*, 2003, v. 68, Iss. 22, p. 224513.
- [3] 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.
- [4] Eschrig M. et al. General boundary conditions for quasiclassical theory of superconductivity in the diffusive limit: application to strongly spin-polarized systems // *New Journal of Physics*, 2015, Vol. 17, p. 083037.

Short-range orthorhombic fluctuations in the FeSe by the 111Cd-TDPAC method

A. V. Tsvyashchenko¹, A. Velichkov^{2,3}, A. V. Salamatin²,
M. V. Magnitskaya¹, N. M. Chtchelkatchev¹, A. V. Bokov¹,
D. A. Salamatin^{1,2}, A. V. Sidorov¹, M. G. Kozin⁴, A. V. Nikolaev⁴

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

²*Dzelepov Laboratory of Nuclear Problems, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

³*Institute for Nuclear Research and Nuclear Energy, Bulgerin AS, Sofia, Bulgaria*

⁴*Skobel'syn Institute of Nuclear Physics Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*

FeSe, a binary compound, is the simplest of the iron-based superconductors with $T_c \approx 8$ K [1]. It has been considered to be an ideal candidate for stud-

ying the mechanism of unconventional superconductivity, but even after many years of intensive research our understanding is far from complete due to the controversial nature of the nematic phase preceding the superconductivity [2].

The term `nematicity` first referred to a liquid-crystal phase, and in the context of FeSe it is understood as a spontaneous reduction of the discrete rotational symmetry driven by electron correlations. The transition to the nematic phase, occurring at a temperature $T_{\text{nem}} \approx 90$ K, is closely related to a structural transition from the parent tetragonal phase (with the space symmetry $P4/nmm$) to the orthorhombic structure ($Cmme$) [1,2,3].

Here we present the results of our investigations of FeSe performed with the perturbed angular correlation (PAC) spectroscopy. PAC spectroscopy provides information on the local electronic structure and dynamics at the site of the PAC probe, which experiences the electric interaction between the nuclear charge distribution and the surrounding charge distribution. In our case, the technique provides direct measurements of electric field gradient (EFG) of the local electronic structure at the crystal site of the PAC probe nucleus.

A sample containing impurity nuclei $^{111}\text{In}/^{111}\text{Cd}$ was obtained at a pressure of 5GP. In addition to the main tetrahedron phase, the sample contained an admixture of a high -pressure hexagonal phase of about 15 %. Of the temperature dependences of the spectra of angular anisotropy, the parameters of hyperfine interpretations, which are expanding to the probe nuclei, are determined as in the nodes of the iron of selenium. It was found that at all temperatures local orthorhombic symmetry is observed and the spectra are described with a non-zero asymmetry parameter η ($0 \leq \eta \leq 1$) for nuclei in the iron site and zero for nuclei in the selenium site. The electric field gradient is determined from the dependence on the measured quadrupole frequency and the asymmetry parameter, where the quadrupole coupling constant $\nu_Q = eQV_{zz}/h$ and the asymmetry parameter $\eta = (V_{xx} - V_{yy})/V_{zz}$, and where $V_{ii} = \partial^2 V / \partial^2 i$ ($i = x, y, z$) are the principal-axis components of the EFG tensor. The experimental values of the electric field gradients are close to the values obtained from first principles for the orthorhombohedral phase. At $T = 90$ K, the temperature of transition to the nematic phase, the asymmetry parameter η tends to 1.

This experimental research was funded by the Russian Science Foundation Grant No. 22-12-00008.

References

- [1] Hsu F.-C., Luo J.-Y., Yeh K.-W., Chen T.-K., Huang T.-W., Wu P. M., Lee Y.-C., Huang Y.-L., Chu Y.-Y., Yan D.-C., and Wu M.-K., *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 105, 14262 (2008).
- [2] McQueen T. M. et al. Tetragonal-to-orthorhombic structural phase transition at 90 K in the superconductor $\text{Fe}_{1.01}\text{Se}$ // *Phys. Rev. Lett.* 103, 057002 (2009).
- [3] Fernandes R. M., Chubukov A. V., and Schmalian J. What drives nematic order in iron-based superconductors? // *Nature Phys.* 10, 97–104 (2014).

КОРРЕЛЯЦИИ. КВАНТОВЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

Учет кулоновских корреляций для расчета сдвиговых фототоков

Г. В. Будкин, Е. Л. Ивченко

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

Представлены результаты по теоретическому исследованию сдвиговых токов при прямых переходах между валентной зоной и зоной проводимости с учетом кулоновских корреляций между электроном и дыркой. В полупроводниковых структурах без центра инверсии, выведенных из теплового равновесия, могут возникать постоянные токи, даже если среднее значение внешних сил равно нулю. Генерация постоянного тока возможна в макроскопически однородных системах вследствие смещения волновых пакетов блоховских электронов в реальном пространстве при квантовых переходах при условии, что элементарная ячейка кристаллической решетки не обладает центром инверсии. Такие токи принято называть сдвиговыми фототоками [1].

Детальная микроскопическая теория сдвиговых токов при прямых переходах разработана для двумерных и трехмерных структур. Развита модель позволяет точно учесть корреляции между фотовозбужденными носителями заряда, индуцированные кулоновским взаимодействием. Продемонстрировано, что влияние кулоновского взаимодействия на сдвиговые токи проявляется в меру модификации волновых функций электрон-дырочных пар за счет их притяжения, а также модификации явного вида матричных элементов для прямых переходов.

В качестве примера нами рассмотрена генерация сдвиговых фототоков, индуцированных линейно поляризованным излучением, в объемных полупроводниках с тетраэдрической симметрией кристаллической ячейки. Получены частотные зависимости фототоков, и показано, что в данной модели происходит усиление сдвиговых фототоков, аналогичное усилению поглощения за счет кулоновского взаимодействия (фактор Зоммерфельда). Также изучена генерация сдвиговых фототоков и в двумерных структурах, в качестве модельной системы рассмотрены монослои дихалькогенидов переходных металлов при нормальном падении излучения и прямых оптических переходах. В более ранней работе [2] в таких системах был теоретически предсказан баллистический фототок, возникающий при возбуждении двумя источниками излучения: циркулярно поляризованного, который селективно индуцировал заселение долин K и K' , и линейно поляризованного, переводящего неравновесную долинную заселенность в электрический ток. В данной работе продемонстрировано, что при прямых оптических переходах возможна генерация фототока при возбуждении только одним источником света линейной поляризации. Показано, что для этого необходимо учесть отсутствие центра инверсии в матричных элементах оптических переходов и тригональную гофрировку спектра носителей заряда. Также в данном расчете сдвигового фототока учтено влияние кулоновских корреляций и продемонстрировано, что как и для случая двумерных структур это приводит к увеличению сдвиговых токов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 21-72-10035).

Список литературы

- [1] Belinicher V. I., Ivchenko E. L., and Sturman B. I., Kinetic theory of the displacement photovoltaic effect in piezoelectrics // *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 83, 649 (1982) [*JETP* 56, 359 (1982)].
- [2] Entin M. V., Magarill L. I., and Kovalev V. M., Photogalvanic effect in monolayer transition metal dichalcogenides under double illumination // *Journal of Physics: Condensed Matter* 31, 325302 (2019).

Критическая динамика квантового фазового перехода

М. Г. Васин

*Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики
им. Н. Л. Духова, г. Москва, Россия
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. С другой стороны, критические явления характеризуются возникновением длинноволновых флуктуаций, характерные временные масштабы которых значительно превышают времена когерентности. По этой причине, в случае исследования квантовых фазовых переходов становится актуальным вопрос о том, каким образом диссипация влияет на критическое поведение вблизи квантовой критической точки. На существование такого влияния указывает, например, экспериментально наблюдаемое плавное изменение критических индексов к среднеполювым значениям при приближении к $T = 0$ [1–5].

Теоретическое описание квантово-классического кроссовера (classical-to-quantum crossover) основано на пионерской работе Герца [6], в которой было показано, что в квантовых системах при $T = 0$ статика и динамика неразрывно связаны. При этом, в отличие от фазовых переходов при $T > 0$, значение динамического показателя z влияет на критическое поведение статической системы.

Попытки формального теоретического описания квантово-классического кроссовера обычно предпринимаются в статической интерпретации. Решение ищется в виде решения типичной задачи конечного размера [7–9], согласно которому, квантово-классический кроссовер представляет собой пересечение размерности $d \rightarrow d + 1$ некоторой эквивалентной классической критической системы конечного размера.

Альтернативный, динамический подход, основанный на технике Келдыша–Швингера, был предложен в работах [10–12]. Этот метод позволяет описать переход от диссипативной критической динамики, при $T > 0$, к адиабатической квантовой динамике, при $T = 0$. В результате удастся в аналитическом виде выразить изменение критических показателей при приближении температуры к нулю. В представленном докладе рассматриваются основные положения предложенного подхода.

В случае $\phi^2 + \phi^4$ модели, показано, что при переходе от высокотемпературного режима, в котором преобладают тепловые флуктуации, к квантовому режиму, в котором остаются только квантовые флуктуации, система приобретает эффективную размерность $d + z\Lambda(T)$, где $\Lambda(T)$ увеличивается от 0 до 1/2 при приближении температуры к нулю. При этом, критический режим реализуется не в единственной точке, а в интервале значений управляющего параметра, т. е. квантовая критическая точка оказывается «размытой» по управляющему параметру.

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] Hertz J., *Phys. Rev. B* **14**, 1165 (1976).
- [7] Millis A. J., *Phys. Rev. B* **48**, 7183 (1993).
- [8] Mercaldo M. T. et al., *Phys. Rev. B* **75**, 014105 (2007).
- [9] De Cesare L. et al., *Eur. Phys. J. B* **73**, 327–339 (2010).
- [10] Vasin M. G., Ryzhov V. N., Vinokur V. M., *Scientific Reports*, **5**, 18600 (2015).
- [11] Vasin M. G., Vinokur V.M., *Physica A*, **575**, 126035 (2021).
- [12] Vasin M. G., *Eur. Phys. J. Plus* **137**, 1049 (2022).

Mott insulator in the Ginzburg–Landau approximation for the Hubbard model

L. B. Dubovskii and S. N. Burmistrov

NRC “Kurchatov Institute”, Moscow, Russia

In 1930 on the basis of Bloch's theorem, A. Wilson [1] applied quantum mechanics for the first time to explain the fundamental difference between metallic and non-metallic crystals. The theorem states that the solutions of the Schrödinger equation in a periodic potential can be represented as plane waves modulated by the periodic functions with the crystal lattice space period. In the Wilson model, the allowed electron energy levels form the bands separated by the energy gaps. If all the allowed electronic states in the bands are filled or empty, the substance will be in the non-metallic state, namely, it will be an insulator or semiconductor. The number of states in the first band for the fcc or bcc structures equals the double number of atoms [2]. The Wilson model predicts the metal-to-insulator phase transition for the divalent compounds when the crystal structure consists of the filled and empty energy bands alone [3].

In 1937, Jan Hendrik de Boer and Evert Johannes Willem Verwey [4] noted that, by virtue of the band theory, various transition metal oxides must be conductors since they have the odd number of electrons per unit cell. However, using the example of nickel oxide NiO, it is found that such compounds actually manifest themselves as insulators. Neville Mott [3] and Rudolf Peierls [5] (also in 1937) predicted that such anomaly could be explained by involving the interactions between electrons.

The problem is called Mott insulator and can consistently be solved by using the Hubbard model [6]. Describing the metal system, J. Hubbard starts from the usual electron-ion Hamiltonian for a hypothetical partly filled narrow s-band containing n electrons per atom. In the case of narrow energy bands J. Hubbard has emphasized that one can take into account the atomicity of the electron distribution and employ very simple approximate representation of the electron-electron interactions. In fact, this approximation is mathematically much simpler to handle as compared with the Coulomb interaction in itself. On the whole, the analysis leads us to the simplified Hamiltonian in the coor-

dinate space. In many publications, J. Hubbard [7] have also discussed some important clarifications and generalizations of the Hubbard model [6].

The most significant result of the model is that the electron conduction bands, originated in the conventional electron theory of metals at half-filling, prove to be split into two sub-bands. The lower sub-band is completely filled with the conduction electrons. The upper sub-band proves to be completely empty. And the system becomes an insulator instead of the initial metal state. The consideration is performed numerically.

The explicit analytical formulas for the phenomena considered can be obtained by using the phenomenological Ginzburg–Landau approach formulated in [8].

Here, the Hubbard model is studied in the external magnetic field. The analysis is carried out phenomenologically within the framework of the Ginzburg-Landau theory with the order parameter describing the opposite spin electrons. The study is performed for the nearly half-filled lower Hubbard band in the metallic state. The final equations are the Pauli-like ones for the opposite spins and nonlinear as a result of interaction between electrons with the opposite spins. The equations can analytically be solved for the spatially homogeneous distributions in a number of most interesting cases. In particular, the problem on the metal-insulator transition is analyzed for the nearly half-filled Hubbard sub-bands. The critical magnetic field at which the transition from the metallic state to the insulator one takes place is found under the paramagnetic spin effect.

References

- [1] Wilson A. H., *Proc. Roy. Soc. (Lnd.)* **A133** Roy., 458 (1931).
- [2] Mott N. F., *Proc. Phys. Soc. (Lnd.)* **A62**, 416 (1949).
- [3] Mott N. F., The Metal – Non-Metal Transition // *Comments on Solid State Phys.* **2** (6), 183 (1970).
- [4] de Boer J. H., Willem Verwey E. J., *Proc. Phys. Soc. (Lnd.)* **49**, 59 (1937).
- [5] Peierls R., *Comments on Solid State Phys.* **2** (6) (note during discussion).
- [6] Hubbard J., *Proc. Roy. Soc.* **A276**, 238 (1963).
- [7] Hubbard J., *Proc. Roy. Soc.* **A277**, 237 (1964); *ibid.* **A281**, 41 (1963); *ibid.* **A285**, 542 (1965); *ibid.* **A296**, 82 (1966).
- [8] Dubovskii L. B., Burmistrov S. N., arXiv:2302.05958 [cond-mat., str-el].

Эффекты тримеризации в рамановских спектрах LiVO_2

Ю. С. Поносов,^{1*} Е. В. Комлева,^{1,2} Е. А. Панкрушина,³
Haohang Xu,⁴ Yu Sui,⁴ С. В. Стрельцов^{1,2}

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

²*Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия*

³*Институт геологии и геохимии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия*

⁴*Harbin Institute of Technology, Harbin, China*

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

LiVO_2 принадлежит к классу орбитально упорядоченных систем с трехкратно вырожденными орбиталями 3d ванадия. LiVO_2 кристаллизуется в ромбоэдрической структуре (R-3m) выше 500 К. Внутри чередующихся Li/V и O-слоев соответствующие ионы образуют решетку равнобедренных треугольников. Материал претерпевает структурный и магнитный переход при $T_c \sim 500$ К, причем низкотемпературная фаза оказывается немагнитной [1]. Все предлагаемые механизмы перехода предполагают образование спин-синглетного состояния в низкотемпературной фазе из-за появления ванадиевых тримеров в треугольной решетке [2, 3]. Данные, подтверждающие появление сверхструктуры при образовании тримеров, получены в порошковых рентгенодифракционных экспериментах и в экспериментах по просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), выполненных на монокристаллах LiVO_2 [4, 5].

Утроение примитивной ячейки в принципе может привести к изменению фононного спектра кристалла. Сложение дисперсионных кривых вследствие образования сверхструктуры приводит фононы с $q = (1/3, -1/3, 0)$ с границы старой зоны Бриллюэна в центр новой зоны Бриллюэна, делая эти фононы активными в неупругом рассеянии света. В данной работе мы предприняли попытку измерить поляризованные спектры комбинационного рассеяния света монокристалла LiVO_2 и изучить их поведение при переходе через T_c . Измеренные при 300К спектры показали гораздо большее число фононных линий (14–16), чем предсказывает теория и наблюдается в подобных системах с такой решеткой (2). Такие спектры исчезают при нагреве образца выше 500 К и снова появляются с некоторым температурным гистерезисом при его охлаждении.

Сравнение с рассчитанными из первых принципов фононными спектрами подтверждает связь измеренных спектров с реконструкцией кристаллической решетки при фазовом переходе, что дает возможность точного определения структуры низкотемпературной фазы.

Список литературы

- [1] Bongers P. F., Ph.D. thesis, The University of Leiden, Leiden, The Netherlands (1957).
- [2] Goodenough J. B., *Magnetism and the Chemical Bond* (Interscience, New York, 1963).
- [3] Pen H. F., van den Brink J., Khomskii D. I., and Sawatzky G. A., *Phys. Rev. Lett.* 78, 1323 (1997)
- [4] Cardoso L. P., Cox D. E., Hewston T. A., and Chamberland B. L., *J. Solid State Chem.* 72, 234 (1988).
- [5] Tian W., Chisholm M. F., Khalifah P. G., Jin R., Sales B. C., Nagler S. E., and Mandrus D., *Mater. Res. Bull.* 39, 1319 (2004).

Свойства точечных дефектов в Fe_3O_4 и FeCr_2O_4 : анализ результатов DFT+U в контексте экспериментальных данных

Г. Д. Чичеватов^{1,2}, В. В. Стегайлов^{1,2}

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

²Московский физико-технический институт (национальный
исследовательский университет), г. Москва, Россия

Кристаллы со структурой шпинели $\text{A}\text{M}_2\text{O}_4$ представляют большой интерес ввиду их широкого круга применений (фотокатализ, электрохимические источники тока, антикоррозионные материалы, спинтроника и др.). Однако шпинели, как правило, являются оксидами переходных металлов и/или редкоземельных элементов и относятся к классу сильно коррелированных оксидов. Проблема описания электронной структуры таких соединений является одной из наиболее актуальных задач современной физики конденсированного состояния [1,2].

Метод DFT+U в модификации Дударева [3] очень распространен в теоретических работах по моделированию сильно коррелированных оксидов переходных металлов и дефектов в них. Известны успешные попытки расчета энергий образования катионных точечных дефектов в магнетите Fe_3O_4 [4, 5] и барьера неадиабатического поляронного переноса в хромите FeCr_2O_4 [6].

За отсутствием полноценных теоретических исследований точечных дефектов в железо-хромистых шпинелях метод DFT+U был применен для расчета электронной структуры и энергий образования всего разнообразия точечных дефектов в магнетите Fe_3O_4 и хромите FeCr_2O_4 , впервые рассмотрены всевозможные типы дефектов (как катионные, так и кислородные) в этих шпинелях одновременно. При расчетах энергий образования было учтено, что химические потенциалы элементов должны меняться в пределах границ термодинамической стабильности шпинелей, найденных нами в удовлетворительном согласии с экспериментом. Проанализирована связь рассчитанных энергий образования катионных пар Френкеля в Fe_3O_4 с энергией активации константы Френкеля из термогравиметрических измерений Dieckmann и др. [7] и данными XAS (Elnaggar и др. [8]) по катионному беспорядку в стехиометрическом магнетите. На основе полученных результатов расчетов в рамках DFT+U сделана попытка разрешить кажущиеся противоречия в интерпретации экспериментов [7] и [8]. Наши результаты выявляют как сходства, так и различия дефектных магнетита и хромита, из которых FeCr_2O_4 является более дефектоустойчивым. Иерархия точечных дефектов по шкале энергий образования изменяется от магнетита к хромиту.

Список литературы

- [1] Streltsov S. V., Khomskii D. I. Orbital physics in transition metal compounds: new trends // *Phys. Usp.* 2017. V. 60(11). P. 1121–1146.
- [2] Anisimov V. I. et al. Band theory and Mott insulators: Hubbard U instead of Stoner I // *Phys. Rev. B.* 1991. V. 44(3). P. 943–954.
- [3] Dudarev S. L. [et al.]. Electron-energy-loss spectra and the structural stability of nickel oxide: An LSDA+U study // *Phys. Rev. B.* 1998. V. 57(3). P. 1505–1509.

- [4] Shutikova M. I., Stegailov V. V. Vacancy Formation Energy in the Cubic Phase of Magnetite in the Framework of the DFT+U Method // *J. Exp. Theor. Phys.* 2021. V. 133(2). P. 206–228.
- [5] Shutikova M. I., Stegailov V. V. Frenkel pair formation energy for cubic Fe₃O₄ in DFT + U calculations // *J. Phys. Condens. Matter.* 2022. V. 34(47): 475701.
- [6] Fominykh N. A., Stegailov V. V. Polarons and charge transfer in FeCr₂O₄ chromite treated by the DFT+U method // *JETP Letters.* 2023. V. 117(11). P. 857–862.
- [7] Dieckmann R., Schmalzried H. Defects and Cation Diffusion in Magnetite (VI): Point Defect Relaxation and Correlation in Cation Tracer Diffusion // *Berichte Bunsenges. Für Phys. Chem.* 1986. V. 90(7). P. 564–575.
- [8] Elnaggar H. et al. Temperature-driven self-doping in magnetite // *Phys. Rev. Lett.* 2021. V. 127: 186402.

On the fragmentation of charge carriers in heavy fermion metals

V. R. Shaginyan,^{1,2,*} A. Z. Msezane,² G. S. Japaridze²

¹*Petersburg Nuclear Physics Institute, Gatchina, 188300, Russia*

²*Clark Atlanta University, Atlanta, GA 30314, USA*

**E-mail: vrshag@thd.pnpi.spb.ru*

The recent paper [1] is devoted to measurements of shot noise to probe excitations in nanowires of the heavy fermion (HF) metal YbRh₂Si₂. The authors observed that shot noise is strongly suppressed, and claim that the suppression cannot be attributed to either electron-phonon or electron-electron interactions in a Fermi liquid. Their observation suggests that the current is not carried by well-defined quasiparticles in the YbRh₂Si₂, and calls for similar research into other strange metals.

In this comment, we show that it is unlikely that the affected carriers in bulk YbRh₂Si₂ would have undergone any fragmentation. Rather, it is the electron-phonon interaction that suppresses noise. Indeed, experimental observations unambiguously show that the Wiedemann–Franz law holds in YbRh₂Si₂, implying that no fundamental breakdown of quasiparticle behavior occurs in the archetypical HF metal [2]. Moreover, detailed study of the temperature evolution of quasiparticles in the HF metal Sr₂RuO₄ demonstrates that quasiparticles

persist up to temperatures above 200 K, far beyond the Fermi liquid regime [3]. It was shown that HF metals can exhibit a quasiclassical behavior that remains applicable to the description of the resistivity of HF metals due to the presence of a transverse zero-sound collective mode, reminiscent of the phonon mode in solids. It is demonstrated that at temperatures T , in excess of an extremely low Debye temperature $T_D \leq 1$ K, the resistivity $\rho(T) \sim T$, since the mechanism, forming this dependence, is the same as the electron-phonon mechanism that prevails at high temperatures in ordinary metals [4, 5]. The same mechanism allows one to explain the optical conductivity in YbRh_2Si_2 [6] and suppressing the short noise in HF metals. It is worth noting that the current-carrying excitations in nanowires of YbRh_2Si_2 can be different from the excitation of the bulk YbRh_2Si_2 , since the nanowires can be represented by one dimensional HF metal that possesses special properties, see e.g. [7].

We conclude that there is no reason to assume the fragmentation of charge carriers, and we can refer to William Shakespeare's immortal comedy that the paper [1] is "Much Ado About Nothing."

References

- [1] Chen L., Lowder D. T., Bakali E., Andrews A. M., Schrenk W. et al. Shot noise in a strange metal // *Science* **382**, 907 (2023).
- [2] Reid J.-Ph., Tanatar M. A., Daou R., Hu R., Petrovic C., and Taillefer L. Wiedemann–Franz law and nonvanishing temperature scale across the field-tuned quantum critical point of YbRh_2Si_2 // *Phys. Rev. B* **89**, 045130 (2014).
- [3] Hunter A., Beck S., Cappelli E., Margot F., Straub M., Alexanian Y. et al., Fate of Quasiparticles at High Temperature in the Correlated Metal Sr_2RuO_4 // *Phys. Rev. Lett.* **131**, 236502 (2023).
- [4] Shaginyan V. R., Popov K. G. and Khodel V. A. Quasi-classical physics and T-linear resistivity in both strongly correlated and ordinary metals. *Phys. Rev. B* **88**, 115103 (2013).
- [5] Shaginyan V. R., Msezane A. Z., and Japaridze G. S. Peculiar Physics of Heavy-Fermion Metals: Theory versus Experiment // *Atoms* **10**, 67 (2022).
- [6] Shaginyan V. R., Msezane A. Z., and Zverev M. V. Transport properties of strongly correlated Fermi systems // *Symmetry* **15**, 2055 (2023).
- [7] Khodel V. A., Shaginyan V. R. and Khodel V. V. New approach in the microscopic Fermi system theory // *Phys. Rep. Phys. Rep.* **249**, 1 (1994).

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ И ТРИВИАЛЬНЫЕ МЕТАЛЛЫ И ПОЛУМЕТАЛЛЫ

Magnetotransport and magnetic H – T phase diagram in heavy fermionic Weyl semimetal YbCoC_2

M. A. Anisimov^{1,2*}, A. V. Bogach¹, D. A. Salamatin², V. A. Sidorov²,
A. V. Bokov², and A. V. Tsvyashchenko²

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

²*Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, RAS, Troitsk, Russia*

**E-mail: anisimov.m.a@gmail.com*

Rare earth ternary dicarbides RTC_2 (where R is RE element, and T — transition element) have attracted much attention due to their intriguing chemical and physical properties [1, 2]. Some of them have also prospects for practical applications as cooling refrigerators because of large or even giant reversible magnetocaloric effect [3, 4]. Here we study moderately heavy fermionic ($\gamma = 190 \text{ mJ/mol}\cdot\text{K}^2$ [5]) Weyl semimetal YbCoC_2 which belongs to RCoC_2 family. YbCoC_2 is the only one antiferromagnet among heavy RCoC_2 alloys [5, 6] with the highest for Yb-based compounds Neel temperature $T_N \approx 26$ – 27 K. The rest members of heavy RCoC_2 systems are ferromagnets with several configurations of the alignment of magnetic moments. In this situation, the study of magnetotransport may yield new insight into the mechanisms responsible for the ground state formation in YbCoC_2 .

Polycrystalline single-phase sample of YbCoC_2 was synthesized by melting of Yb, Co, C under the conditions $P = 8$ GPa and $T = 1500$ – 1700 K by using a Toroid high-pressure cell. The sample's quality was proved by X-ray diffraction method. The measurements of galvanomagnetic properties (resistivity and magnetoresistance) were carried by four-probe dc -technique at temperatures 1.8– 300 K in applied magnetic fields up to 82 kOe. Negative quadratic magnetoresistance $\Delta\rho/\rho \sim -H^2$ detected in paramagnetic state was explained in

terms of Yosida model, which takes into account the scattering of conduction electrons on localized magnetic moments of rare-earth ions. The analysis of both local and bulk magnetic susceptibility allows proposing the existence of short-range correlations in wide PM vicinity of T_N . Several scenarios are discussed. We also reconstructed magnetic H – T diagram of YbCoC_2 and assumed the existence of A-phase in this compound.

This experimental research was funded by the Russian Science Foundation Grant No. 22-12-00008 (<https://rscf.ru/project/22-12-00008/>).

Список литературы

- [1] Hillier A. D. et al., *Phys. Rev. Lett.* **102**, 117007 (2009).
- [2] Ray R. et al., *Quantum Materials* **7**, 19 (2022).
- [3] Li B. et al., *Applied Physics Letters* **92**, 242508 (2008).
- [4] Meng L. et al., *RSC Advances* **6**, 74765 (2016).
- [5] Salamatin D. A. et al., *Phys. Rev. B* **101**, 100406 (2020).
- [6] Salamatin D. A. et al., *Magnetochemistry* **9**, 152 (2023).

The contribution of spin fluctuations to resistivity in B20 metals MnSi and MnGe

M. A. Anisimov^{1,2*}, A. V. Bogach¹, A. V. Sidorov², A. V. Bokov²,
A. V. Tsvyashchenko²

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

²*Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, RAS, Troitsk, Russia*

*E-mail: anisimov.m.a@gmail.com

In the family of B20 the metallic $3d$ -compounds MnSi and MnGe have attracted considerable attention as model objects with experimental realization of exotic magnetic structures. Here both the lack of inversion symmetry in Mn atomic arrangement corresponding to cubic $P2_13$ space group as well as the competition between several different magnetic interactions including Dzyaloshinskii–Moriya one stabilize helix or under some conditions different skyrmion spin textures (the last ones are under debates for MnGe). However,

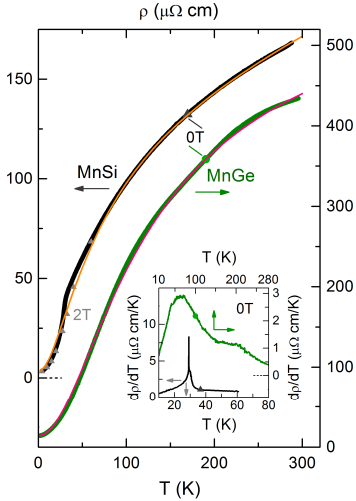


Fig.1. Temperature evolution of resistivity measured for MnSi, MnGe at constant magnetic fields $H = 0$, and 2 T. Solid lines display the fit with the contribution of localized spin fluctuations

proven presence of several different types of SF [4, 5]. Moreover in MnGe a phase separation is realized in intermediate phase, when slow and rapid chiral SF associated with long-range and short range ordered helices coexist within a large temperature interval below Neel point ($100 \text{ K} < T < T_N$ [5]).

The resistivity was analyzed by original procedure which takes into account along with the scattering of electrons on both phonons (ρ_{BG}) and non-magnetic impurities (ρ_0) additional one channel caused by contribution of localized spin fluctuations (ρ_{sf}). The last component was analyzed in the framework of single band model. It was shown that ρ_{sf} term plays significant role not only in paramagnetic (PM) but also in magnetically ordered states of compounds under investigation. Spin fluctuation temperature was estimated as $\theta_{sf}(\text{MnSi}) \approx 120 \text{ K}$ and $\theta_{sf}(\text{MnGe}) \approx 250\text{--}300 \text{ K}$. This model may be applied to the resistivity analysis in other d -metallic systems.

This experimental research was funded by the Russian Science Foundation Grant No. 22-12-00008 (<https://rscf.ru/project/22-12-00008/>).

skyrmion issues do not limit the broad spectrum of physical phenomena in these materials, which include also quantum phase transition under external pressure in MnSi [1], as well as large topological Hall [2], and topological Nernst effects in MnGe [2, 3], etc. At the same time the study of spin fluctuations (SF) and spin-fluctuation transitions is of great fundamental interest as well.

In current work we study temperature dependence of resistivity measured on MnSi single crystal and on two MnGe-based polycrystals (host MnGe and $\text{Mn}_{0.98}\text{Fe}_{0.02}\text{Ge}$ doped system) of a high quality [$\rho(300 \text{ K})/\rho_0 = 31, 1.6$, respectively] in the range 2–300 K, in magnetic fields up to 8 T. The quality of the crystals was controlled by chemical analysis and X-ray methods. The choice of these compounds as objects of study was dictated by

References

- [1] Pfeiderer C. et al., *Nature* **414**, 427 (2001).
 [2] Kanazawa N. et al., *Phys. Rev. Lett.* **106**, 156603 (2011).
 [3] Shiomu Y. et al., *Phys. Rev. B* **88**, 064409 (2013).
 [4] Grigoriev S. V. et al., *Phys. Rev. B* **81**, 144413 (2010).
 [5] Martin N. et al., *Phys. Rev. B* **93**, 174405 (2016).

Поляризационные свойства хиральных метаповерхностей

Н. В. Валенко¹, О. А. Дмитриева^{1,2}, С. Г. Тиходеев^{1,2,3}

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

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

³Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, г. Москва, Россия

В последнее время большой интерес исследователей вызывают хиральные метаповерхности, обладающие так называемой максимальной хиральностью, например, полностью пропускающие электромагнитное излучение одного знака циркулярной поляризации и полностью отражающие излучение другого знака циркулярной поляризации [1–5]. В докладе будет рассмотрен пример метаповерхности, подобной предложенной в работе [1], оптимизированной для диапазона длин волн 10–12 мкм. Структура представляет собой фотоннокристаллический слой с квадратной решеткой хиральных отверстий с осью вращения C_2 (см. на рис. 1). Предполагается, что метаповерхность изготовлена из слоя алмаза с показателем преломления 2.4 и толщиной 4 мкм. Период решетки 7 мкм, элементарная решетка состоит из слившихся в одно целое центрального квадратного отверстия со стороной 3 мкм и двух смещенных прямо-

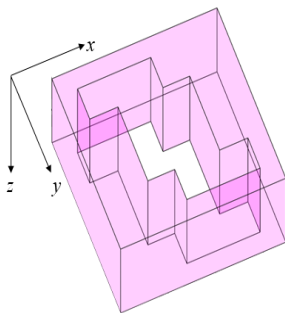


Рис. 1. Схематическое изображение элементарной ячейки хиральной метаповерхности

угольных отверстий со сторонами 3,1 и 1,2 мкм, центры которых имеют координатами $(-1.2, +2.1)$ и $(+1.2, -2.1)$ мкм. Структура была оптимизирована для длины волны света $\lambda = 11$ мкм.

Расчетные спектры пропускания и отражения падающего по нормали к метаповерхности циркулярно-поляризованного излучения показаны на рис. 2. На левой панели показаны спектры для лево-поляризованного падающего света, а на правой — право-поляризованного. Видно, что метаповерхность почти полностью отражает лево-поляризованную волну также в лево-поляризованную, и почти полностью пропускает право-поляризованную волну в лево-поляризованной волны. Такие необычные поляризационные свойства хиральных метамембран, насколько нам известно, были впервые продемонстрированы в работе [1].

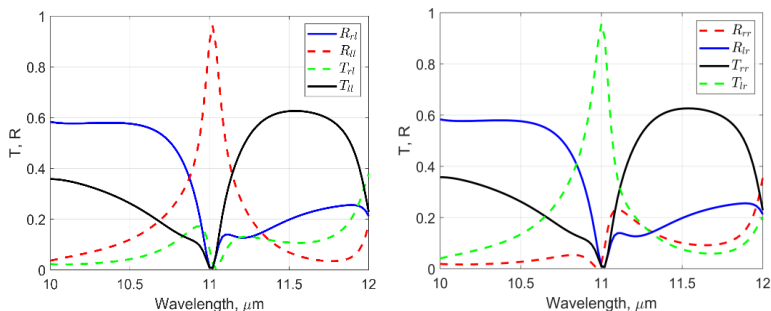


Рис. 2. Рассчитанные Фурье-модальным методом оптические спектры пропускания (T) и отражения (R) хиральной метаповерхности лево- и право-циркулярно поляризованного электромагнитного излучения (левая и правая панели, соответственно)

В докладе будут проанализированы хиральные свойства такой метаповерхности и критическое влияние на них оптических потерь.

Работа поддержана грантом РФФ № 22-12-00351.

Список литературы

- [1] Semnani B. et al. M. Spin-preserving chiral photonic crystal mirror // *Light-Sci. Appl.* 9 :23, 1-12 (2020).
- [2] Gorkunov M. V. et al. Metasurfaces with Maximum Chirality Empowered by Bound States in the Continuum // *Phys. Rev. Lett.* 125, 093903 (2020).

- [3] Voronin K. et al. Single-Handedness Chiral Optical Cavities // *ACS Photonics* 2022, 9, 2652–2659.
- [4] Kühner L. et al. Unlocking the out-of-plane dimension for photonic bound states in the continuum to achieve maximum optical chirality // *Light-Sci. Appl.* 12:250, 1-11 (2023).
- [5] Dyakov S. A. et al. Chiral Light in Twisted Fabry-Pérot Cavities // *Adv. Opt. Materials*. DOI10.1002/adom.202302502 (2024).

Новый механизм отрицательного магнитосопротивления в слоистых антиферромагнитных полуметаллах

П. Д. Григорьев^{1,2,3*}, И. Р. Шеин⁴, А. В. Садаков⁴, О. А. Соболевский⁴,
Н. С. Павлов⁵, И. А. Некрасов⁶, Е. Мальцев⁷, В. М. Пудалов⁴

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

²*НИТУ «МИСИС», г. Москва, Россия*

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

⁴*Научный центр В.Л. Гинзбурга Физического института
им. П. Н. Лебедева РАН, г. Москва, Россия*

⁵*Институт электрофизики РАН, г. Екатеринбург, Россия*

⁶*Институт химии твердого тела РАН, г. Екатеринбург, Россия*

⁷*Институт исследований твердого тела и материалов им. Лейбница,
IFW, 01069 Дрезден, Германия*

*E-mail: grigorev@itp.ac.ru

Слоистые топологически нетривиальные и тривиальные полуметаллы с антиферромагнитным (АФМ) упорядочением магнитной подрешетки обладают отрицательным магнитосопротивлением, которое хорошо коррелирует с изменением АФМ намагниченности в магнитном поле. Об этом эффекте сообщалось в ряде экспериментальных исследований с EuFe_2As_2 [1], EuSn_2As_2 [2], EuSn_2P_2 [3], EuIn_2As_2 [4] и др., где сопротивление квадратично уменьшается с увеличением поля на величину около $\delta\rho/\rho \sim 4\text{--}6\%$ вплоть до поля спин-флип. Несмотря на то, что этот эффект хорошо документирован экспериментально, его теоретическое объясне-

ние до сих пор отсутствует. Мы предлагаем новый теоретический механизм, описывающий наблюдаемое магнитосопротивление и не предполагающий ни его топологического происхождения, ни шероховатости поверхности, ни их потенциальной дефектной структуры, ни электрон-магнетонного рассеяния. Этот новый механизм связан с нарушением симметрии между АФМ подрешетками и соответствующим изменением координатной зависимости волновых функций электронов проводимости для спиновых подзон, которая сжимает волновые функции и усиливает рассеяние электронов на точечных дефектах. Проведенные численные расчеты методом функционала плотности подтверждают это сжатие. Предложенный механизм магнитосопротивления применим к широкому классу слоистых АФМ-упорядоченных полуметаллов. Мы также провели детальное экспериментальное исследование этого эффекта в EuSn_2As_2 и сравнили его с нашими теоретическими предсказаниями. Рассчитанное магнитосопротивление качественно согласуется с экспериментальными данными для кристаллов различного состава.

Список литературы

- [1] Sanchez J. J., Fabbris G., Choi Y. et al., *Phys. Rev. B* **104**, 104413 (2021).
- [2] Huijie Li, Wenshuai Gao, Zheng Chen et al., *Phys. Rev. B* **104**, 054435 (2021).
- [3] Xin Gui, Ivo Pletikosic, Huibo Cao, et al., *ACS Centr. Sci.* **5**(5), 900 (2019).
- [4] Yu F. H., Mu H. M., Zhuo W. Z. et al. *Phys. Rev. B* **102**, 180404(R) (2020).

Вклад фермионов с псевдоспином 1 и 3/2 в орбитальную магнитную восприимчивость топологических полуметаллов

Д. А. Пшенай-Северин¹, С. А. Николаев¹, А. Т. Бурков¹

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

Материалы с нетривиальной топологией зонной структуры обладают рядом интересных особенностей. Среди них наиболее простой вид электронного спектра имеют вейлевские полуметаллы, для которых характерно пересечение двух зон с линейным законом дисперсии в точках Вейля. Низкоэнергетические возбуждения вблизи этих узлов называются

фермионами с псевдоспином $1/2$, а их топологический заряд (число Черна) по модулю равен единице. В зоне Бриллюэна должно присутствовать несколько вейлевских узлов так, чтобы их суммарный топологический заряд был равен нулю. При этом на поверхности возникают Ферми-арки, соединяющие проекции топологических узлов с противоположным зарядом на поверхностную зону Бриллюэна. Их число определяется модулем топологического заряда узла.

Спектр фермионов, псевдоспин которых больше $1/2$, соответствует пересечению трех и более зон с линейным законом дисперсии. Например, было показано, что в материалах с определенной кристаллической структурой возможно возникновение узлов с многократным вырождением энергетических уровней и линейным законом дисперсии в их окрестности [1]. К ним относится, например, моносилицид кобальта, кристаллизующийся в кубической нецентросимметричной структуре (пространственная группа $P2_13$, No. 198 [2]). В CoSi топологические состояния возникают вблизи Γ и R-точек зоны Бриллюэна, инвариантных к обращению времени [3, 4]. Топологический заряд узлов по модулю равен 4, что соответствует возникновению четырех Ферми арок на поверхности материала. Эти особенности зонной структуры были подтверждены экспериментами по фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением [5, 6, 7].

Особенности спектра топологических полуметаллов в магнитном поле приводят к возникновению интересных транспортных свойств, таких как хиральная аномалия и отрицательное магнетосопротивление [8]. Магнитная восприимчивость топологических полуметаллов также обладает рядом особенностей, проявляющихся в логарифмической расходимости диамагнитной восприимчивости, когда химпотенциал приближается к энергии вейлевского узла [9]. Восприимчивость вейлевских полуметаллов исследовалась в ряде работ, обзор которых приведен в [10].

В настоящей работе исследованы уровни Ландау и особенности орбитальной магнитной восприимчивости χ в топологических полуметаллах с более сложным спектром, соответствующим фермионам с псевдоспином 1 или $3/2$. Спектр, характерный для квазичастиц с псевдоспином 1 наблюдается в моносилициде кобальта вблизи Γ -точки зоны Бриллюэна без учета спин-орбитального взаимодействия (СОВ). При учете СОВ, такой узел расщепляется на два, соответствующих псевдоспинам $1/2$ и $3/2$. Электронный спектр в магнитном поле вблизи Γ -точки был

рассчитан в $k \cdot p$ приближении и хорошо согласуется с полученным для CoSi в модели сильной связи.

В случае квазичастиц с псевдоспином 1 и $3/2$, как и в вейлевских полуметаллах, восприимчивость возрастает по модулю, когда химпотенциал μ приближается к энергии узла ϵ_0 . Но, если в вейлевском полуметалле орбитальная восприимчивость остается при этом отрицательной, то в случае фермионов с псевдоспином 1 она меняет знак и сильно возрастает при $\mu = \epsilon_0$, что связано с большим вкладом средней бездисперсионной зоны. Особенности уровней Ландау для квазичастиц с псевдоспином $3/2$ также приводят к немонотонной зависимости орбитальной восприимчивости от химпотенциала с многократной сменой знака. Это отражается и на температурной зависимости восприимчивости. Как и в случае вейлевского полуметалла, она оказывается немонотонной, однако тип экстремума меняется. В вейлевском полуметалле он соответствует минимуму, т. е. большим по модулю отрицательным значениям восприимчивости, которые наблюдались, например, в вейлевском полуметалле TaAs при 185 К [11]. В случае квазичастиц с псевдоспином 1 восприимчивость возрастает с уменьшением температуры, проходя через максимум с положительными значениями χ , после чего убывает и меняет знак. Величина восприимчивости в максимуме растет, когда μ приближается к ϵ_0 . Для квазичастиц с псевдоспином $3/2$ восприимчивость возрастает по модулю с уменьшением температуры, но знак χ может меняться в зависимости от положения химпотенциала. Интересно, что экспериментальные исследования магнитной восприимчивости в моносилициде кобальта в работе [12] продемонстрировали ее сильное изменение с температурой, сопровождающееся сменой знака с отрицательного на положительный при понижении температуры до 25 К. Возможно, что эти особенности связаны с вкладом топологических состояний.

Список литературы

- [1] Bradlyn B., J. Cano, *Zh. Wang et al. Science* **353**, aaf5037 (2016).
- [2] Fedorov M. I., Zaitsev V. K.. In D.M. Rowe, ed., *CRC Handbook of Thermoelectrics*, Chapter 27. CRC Press, Boca Raton, 1995.
- [3] Tang P., Zhou Q., Zhang Sh.-Ch., *Phys. Rev. Lett.* **119**, 206402 (2017).
- [4] Pshenay-Severin D. A., Ivanov Y. V., Burkov A. A., Burkov A. T., *Journal of Physics: Condensed Matter* **30**, 135501 (2018).

- [5] Takane D., Wang Zh., Souma S. et al., *Phys. Rev. Lett.* **122**, 076402 (2019).
- [6] Rao Zh., Li H., Zhang T. et al., *Nature* **567**, 496 (2019).
- [7] Sanchez D. S., Belopolski I., Cochran T. A. et al., *Nature* **567**, 500 (2019).
- [8] Burkov A. A. *Annual Review of Condensed Matter Physics* **9**, 359 (2018).
- [9] Mikitik G. P., Svechkarov I. V. *Sov. Journal of Low Temperature Physics* **15**, 165 (1989).
- [10] Mikitik G. P., Sharlai Yu. V. *Journal of Low Temperature Physics* **197**, 272 (2019).
- [11] Liu Yu., Li Zh., Guo L. et al. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **408**, 73 (2016).
- [12] Stishov S. M., Petrova A. E., Sidorov V. A., Menzel D. *Phys. Rev. B* **86**, 064433 (2012).

Магнитосопротивление вейлевских полуметаллов с кулоновскими примесями

А. Ш. Дотдаев¹, Я. И. Родионов^{2,*}, К. И. Кугель², Б. А. Аронзон³

¹*Национальный университет науки и технологий МИСиС, г. Москва, Россия*

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

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

^{*}*E-mail: yaroslav.rodionov@gmail.com*

Анализируются транспортные характеристики вейлевских и дираковских полуметаллов в режиме сильного рассеяния на заряженных примесях и рассчитывается зависимость поперечного магнитосопротивления от магнитного поля в области сильных магнитных полей. Мы используем параметры, характерные для дираковского полуметалла Cd_3As_2 . До сих пор в литературе фактически рассматривался только случай относительно слабого примесного потенциала. Нами был использован подход, позволяющий снять это ограничение и рассмотреть образцы с произвольной концентрацией примесей, при условии, что спектр носителей все ещё можно считать дираковским. В задаче имеется дополнительный малый параметр: отношение магнитной длины к дебаевской длине кулоновского примесного потенциала. Для Cd_3As_2 этот параметр равен при-

мерно 0.05. Удаётся построить ряд теории возмущений только по данному параметру в условиях ультраквантового предела, когда в электронный транспорт вклад вносят только нулевой и первый уровни Ландау. В этом случае оказывается возможным полностью пренебречь температурными флуктуациями в системе. Для расчёта используется модель Келдыша, которая позволяет провести точное суммирование ряда теории возмущений по примесному взаимодействию в пределе бесконечной корреляционной длины последнего. Для получения результатов потребовалась модификация модели Келдыша для учёта конечной корреляционной длины примесного потенциала. В результате получена фазовая диаграмма поведения магнитосопротивления в осях T_{imp}, \sqrt{H} , где $T_{\text{imp}} = n_{\text{imp}}^{1/3} v$, v — скорость Ферми, а H — напряжённость магнитного поля [1], см. рис. 1.

Мы также изучили влияние анизотропии на магнитосопротивление вейлевских полуметаллов в ультраквантовом режиме. Многие вейлевские полуметаллы имеют квазичастичный спектр с выраженной аксиальной анизотропией. Мы показываем, что указанная анизотропия проявляет себя в сильной зависимости магнитосопротивления от полярного и азимутального углов, определяющих ориентацию оси анизотропии относительно приложенного магнитного поля и электрического тока. Мы также предсказываем, что отношение магнитосопротивлений в геометриях, где оси

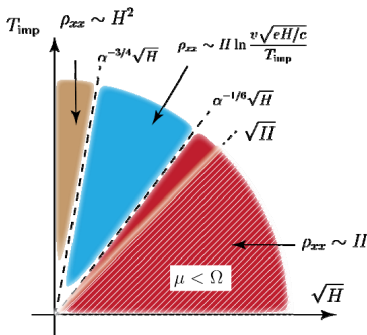


Рис. 1. Различные параметрические режимы для магнитосопротивления ρ_{xx} в зависимости от магнитного поля H и силы беспорядка T_{imp} . Заштрихованная область представляет собой режим, в котором химический потенциал μ ниже первого уровня Ландау, $\mu < \Omega = v\sqrt{2eH/c}$. Красная область представляет ранее изученный случай слабого беспорядка. Синяя область соответствует случаю среднего беспорядка. В этом режиме уровни Ландау по-прежнему хорошо разделены. Бежевая область соответствует случаю сильного беспорядка, для которого уровни Ландау сглажены

магнитного поля и анизотропии совпадают и где они ортогональны, масштабируются как $(v_{\perp}/v_{\parallel})^2$, где v_{\perp} и v_{\parallel} — соответствующие скорости Ферми.

Геометрия задачи представлена на рис. 2(а). Ось анизотропии (\mathbf{n}_0) наклонена под полярным углом Θ и азимутальным углом Φ .

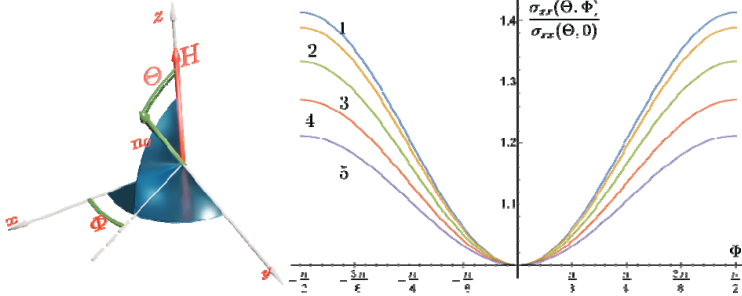


Рис. 2(а). Геометрия задачи

Рис. 2(б). Зависимость от угла Φ проводимости σ_{xx} при различных значениях полярного угла. Здесь Θ уменьшается с шагом $\pi/24$ (см. кривые от 1 до 5); $\Theta_n = \pi/2 - (n - 1)\pi/24$. Графики построены при реалистичных значениях $\zeta = 4$ (Cd_2As_3) и константы тонкой структуры $\alpha = 0.05$.

Главный результат состоит в полученной нами формуле проводимости [2]

$$\sigma_{xx} = \frac{\alpha^3}{\Omega^2} v_{\parallel}^3 n_{\text{imp}} [\cos^2 \Theta + \xi^{-2} \sin^2 \Theta] \ln \frac{1}{\alpha}, \quad (1)$$

где $\Omega^2 = 2eHv_{\parallel}/c$ — циклотронная частота, H — магнитное поле, $\alpha = e^2/(\hbar v_{\parallel}) \ll 1$ — параметр разложения теории возмущений и $v_{\perp} = \xi v_{\parallel}$. График зависимости проводимости σ_{xx} от угла Φ представлен на рис. 2(б).

Работа выполнена при поддержке РФФ, проект № 21-12-00254.

Список литературы

- [1] Rodionov Ya. I., Kugel K. I., Aronzon B. A. *Phys. Rev. B* **107**, 155120 (2023).
- [2] Dotdaev A. S., Rodionov Ya. I., Kugel K. I., Aronzon B. A. *Phys. Rev. B* **108**, 16512 (2023).

Микроволновая фотопроводимость в толстых пленках на основе топологической и тривиальной фаз $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$

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, 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. Энергетический 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.

В эпитаксиальных структурах на основе топологической фазы $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ранее в нашей научной группе были обнаружены нелокальный отклик и асимметрия фотопроводимости в магнитном поле в условиях воздействия терагерцового излучения с частотой 0,6–3,4 ТГц [1, 2]. При этом обсуждалось влияние на фотоотклик различных процессов, включающих генерацию носителей при соответствии энергии падающего кванта и энергии межзонного перехода. В настоящей работе фотовозбуждение осуществлялось микроволновым излучением с энергией кванта $\sim 0,2 \text{ мэВ}$, что позволяет практически исключить генерацию неравновесных носителей.

Исследованные образцы $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ составов $x = 0,126; 0,176$ были синтезированы методом молекулярно-лучевой эпитаксии на полуизолирующей подложке GaAs с ориентацией [013]. Толщина рабочего слоя со-

ставляла ~ 4 мкм. Мостики Холла с характерными размерами 1×5 мм² для исследования фотоэлектрических свойств изготавливались с помощью метода фотолитографии. Изучение транспорта в температурном диапазоне 4,2–200 К показало, что все образцы обладали электронной проводимостью, концентрация свободных электронов при температуре $T = 4,2$ К составляла $\sim 10^{15}$ см⁻³, подвижность $\sim 10^6$ см²/В·с. Исследование фотопроводимости проведено с использованием двойной модуляционной методики в условиях воздействия излучения диода Ганна с частотой ~ 47 ГГц в магнитных полях до 3 Тл в геометрии Фарадея при температурах 4,2–200 К.

Исследование фотопроводимости в магнитном поле показало, что в образце с $x = 0,126$ полевая зависимость отклика оказывается асимметричной. На рис. 1 представлены зависимости фотопроводимости от магнитного поля для двух различных пар потенциальных контактов, расположенных на противоположных сторонах мостика Холла.

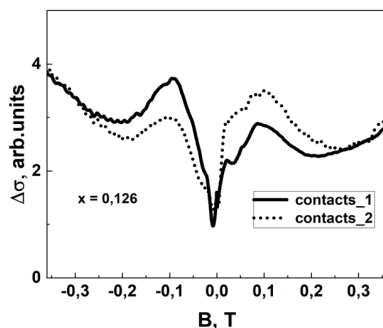


Рис. 1. Зависимость фотопроводимости, измеренной с использованием потенциальных контактов на противоположных сторонах мостика Холла, от магнитного поля ($T = 4.2$ К)

Фотоотклик не изменяется при одновременном изменении направления магнитного поля на противоположное и замене пары потенциальных контактов на зеркально расположенную. Описанные особенности магнитополевой зависимости фотопроводимости ранее наблюдались в аналогичных структурах на основе топологической фазы $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ в терагерцовом диапазоне [1, 2].

На рис. 2 приведена магнитополевая зависимость фотопроводимости для образца с $x = 0,176$ с прямым спектром.

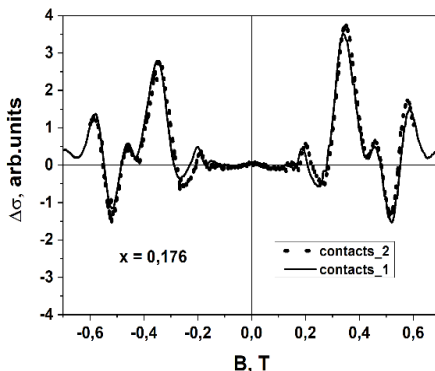


Рис. 2. Зависимость фотопроводимости от магнитного поля в образце с $x = 0,176$ ($T = 4,2$ К)

Из рисунка видно, что фотоотклик в магнитном поле демонстрирует осциллирующее поведение со сменой знака. Наблюдаемые особенности фотопроводимости в магнитном поле требуют дальнейшего изучения. Можно отметить, что фотопроводимость является симметричной по направлению магнитного поля и не зависит от положения потенциальных контактов на мостике.

Таким образом, в структурах на основе $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x = 0,126; 0,176$) обнаружена фотопроводимость, индуцированная СВЧ излучением с частотой 47 ГГц. Важно, что в образцах с инверсным спектром асимметрия фотопроводимости в магнитном поле, наблюдавшаяся ранее в терагерцовом спектральном диапазоне (энергия кванта 2,5–13 мэВ), регистрируется при уменьшении энергии возбуждающего кванта до 0,2 мэВ, то есть в условиях, практически исключающих фотогенерацию.

Список литературы

- [1] Galeeva A. V. et al. // *Sci. Rep.* 11 1587 (2021).
- [2] Galeeva A. V. et al. // *Sci. Rep.* 10 2377 (2020).

МЕТОДЫ. ТЕХНОЛОГИЯ

Импульсный нагрев для изучения фазовых переходов в твёрдых телах при высоких давлениях

П. В. Зинин, К. М. Булатов

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

Динамические измерения поверхностного распределения температуры нагретых тел с неизвестным коэффициентом излучения востребованы во многих областях науки и техники, включая геофизику, синтез новых материалов, изучению фазовых переходов и т. д. На сегодняшний день для определения распределения температур объектов с неизвестной излучательной способностью применяются дифракционные спектрометры. В НТЦ УП РАН разрабатываются новые методы импульсного нагрева и скоростного измерения поверхностного распределения температур на основе мультиспектральных камер [1]. В таких камерах в каждом пикселе содержится до шестнадцати спектральных каналов, что даёт возможность определить распределение температуры светящегося тела по шестнадцати независимым измерениям интенсивности теплового излучения. В данной работе показано, что применение мультиспектральных камер позволяет исследовать процессы плавления и фазовые переходы при высоких давлениях. В качестве примеров приведены результаты экспериментов по плавлению алюминиды никеля и изучение фазовых переходов в ковалентных триазиновых каркасах [2].

Список литературы

- [1] Bulatov K. M., Zinin P. V., Bykov A. A., Malykhina I. V., *Computer Optics*. **47**(1) 48-52 (2023).
- [2] Khorobrykh F., Bulatov K., Kutuza I., Zinin I., Kulnitskiy B., Goryunkov A., Lukonina N., Brotsman V., Sokolov S., Galkin A., Popov M., *Materials Chemistry and Physics*. **308** 128312 (2023).

Магнитометр на основе дисперсионного считывания состояний NV центра в алмазе

В. В. Сошенко^{1,2}, С. В. Большедворский^{1,2}, А. М. Козодаев^{3,4*},
Е. А. Примак^{3,5}, И. С. Кожокару^{1,2,3}, В. Н. Сорокин^{1,2},
А. Н. Смолянинов², А. В. Акимов^{1,2,3,6}

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

²Сенсор Спин Технолоджис, г. Москва, Россия

³Российский квантовый центр, г. Москва, Россия

⁴НИЯУ МИФИ, г. Москва, Россия

⁵МФТИ, г. Долгопрудный, Россия

⁶НИТУ МИСИС, г. Москва, Россия

*E-mail: kozodaev05@yandex.ru

При выполнении квантовых измерений в некоторых случаях оказывается выгодно измерять не непосредственный отклик квантовой системы, а отклик резонатора, внутрь которого помещена эта квантовая система. При таком подходе на резонатор воздействуют микроволновым полем и отслеживают его пропускание в зависимости от состояния квантовой системы, таким образом, пропускание зависит от эффективной частоты резонатора (рис. 1). Данная методика получила название дисперсионное считывание, основы которой получены в [1]. Изменение внешнего магнитного поля ведёт к изменению частоты квантовой системы, что в свою очередь детектируется методикой дисперсионного считывания [2].

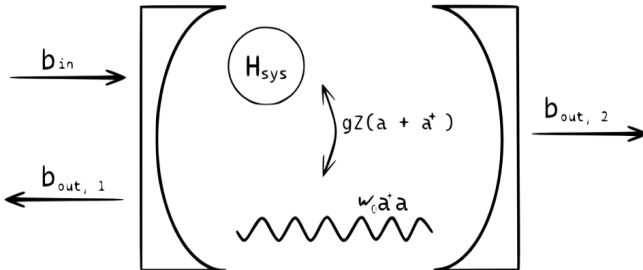


Рис. 1. Резонатор, связанный с входящими /выходящими модами, а также с внутренней квантовой системой

В данной работе в качестве квантовой системы, помещенной в резонатор, выбрана отрицательно заряженная азотная вакансия в алмазе (NV центр). Выбор обусловлен тем, что NV центр технологичен в изготовлении, обладает возможностью эффективной подготовки и считывания состояний, обладает одним из самых длинных времён когерентности электронного спина в твердотельных системах при комнатной температуре.

$$\chi(t, \tau) = -i \langle [Z_{int-picture}(t, \tau), Z(\tau)] \rangle_0 \theta(t - \tau) \quad (1)$$

$$i(\omega - \omega_c)a_\omega - ig^2\chi_\omega - \frac{\kappa}{2}a_\omega = \sum_v^2 b_{in,v} \sqrt{\kappa_v} \quad (2)$$

$$\dot{\rho} = -i[H, \rho] + \sum_j (L_j \rho L_j^\dagger - \frac{1}{2} \{L_j^\dagger L_j, \rho\}) \quad (3)$$

Для описания такой системы мы нашли функцию линейного отклика системы (1) и воспользовались квантовым уравнением Ланжевена (2). Особенностью такого подхода является учет поправок, не входящих в RWA приближение. Частота резонатора зависит от разных внешних параметров, например, температуры. Выполнив необходимые вычисления, мы получили режим работы магнитометра, в котором зависимость чувствительности от изменения температуры будет минимальной.

В качестве метода для улучшения считывания частоты системы в резонаторе мы предлагаем использовать резонатор с двумя геометрически ортогональными модами. Идея использования ортогональных мод заключается в измерении коэффициента пропускания резонатора из порта 1 в порт 2. При условии, что внешние поля в двух портах резонатора связаны каждый со своей модой пропускание должно равняться нулю в случае, когда частота поля сильно отстроена от частоты резонанса ДУС. При совпадении частоты поля и ДУС будет появляться рассеяние на ДУС и моды 1 в моду 2, и как следствие появится сигнал на втором выходе. Для аналитического описания такого метода мы воспользовались уравнением Линдблада (3) и рассмотрели связь резонатора с внешним полем, как диссипаторы когерентного состояния в уравнении Линдблада.

Список литературы

- [1] Collett M. J. and Gardiner C. W. Squeezing of intracavity and traveling-wave light fields produced in parametric amplification // *Phys. Rev. A*, vol. 30, sep 1984.
- [2] Kohler S. Dispersive readout: Universal theory beyond the rotating-wave approximation // *Phys. Rev. A*, vol. 98, aug 2018.

**Исследования электронно-инерционных эффектов
в металлических проводниках в поле центробежных
ускорений — к 110-летию опытов русских ученых
П. Н. Лебедева, Л. И. Мандельштама и Н. Д. Папалекси**

А. Р. Лепешкин

*Московский авиационный институт (национальный исследовательский
университет), г. Москва, Россия*

Впервые центробежные опыты (при стационарном вращении) по инерционному распределению зарядов во вращающейся катушке (в виде тора) провел П. Н. Лебедев [1] с использованием магнитометра, а во вращающемся диске с использованием скользящих контактов и гальванометра – американский ученый Э. Ф. Никольс [2]. Считается, что электронно-инерционный эффект в металлических проводниках катушек при нестационарном вращении впервые установили опытным путем Л. И. Мандельштам и Н. Д. Папалекси в 1913 г. В их опытах при нестационарном вращении катушки на концах провода возникала переменная разность потенциалов и подключенный к концам провода телефон издавал звук. Этот опыт в 1916 г. был усовершенствован американскими учеными Р. Ч. Толменом и Т. Стюартом [3]. Катушка в их опытах приводилась в быстрое вращение и затем резко тормозилась. При этом с помощью скользящих контактов и баллистического гальванометра регистрировался импульс тока неэлектрического происхождения, связанный с инерционным движением свободных зарядов в проводе на катушке. Суть этого эффекта заключается в том, что в образце металла газ свободных электронов, являясь инерционной средой, может обгонять или отставать от ионного остова решетки при резких изменениях скорости движения остова, т. е. при резком торможении или ускорении образца [4, 5]. Р. Ч. Толмен и Стюарт провели указанные электронно-инерционные опыты только при торможении с использованием катушек из медных и алюминиевых проводов [3]. По параметрам экспериментов они определили отношение заряда электрона к его массе и подтвердили, что носителями электрического тока являются свободные электроны.

Аппаратура того времени не позволила зарегистрировать электрический колебательный процесс во вращающейся катушке. В данной работе проведены электронно-инерционные опыты с использованием медного проводника в виде плоской спирали (спирального проводника), установленного на устройстве вращения, в поле радиальных и окружных центробежных ускорений в процессах как резкого ускорения, так и торможения. Соединительные гибкие провода от данного проводника были подключены к чувствительному анализатору спектра. Спиральный проводник резко приводился (ускорялся) во вращение (за 0.01 с) до максимальной частоты вращения 1500 об/мин и затем постепенно тормозился. Электрический сигнал от вращающегося спирального проводника был зарегистрирован на анализаторе спектра и его график представлен на рис. 1. В начале резкого ускорения вращения под воздействием центробежных ускорений свободные электроны начинают перемещаться от центра к периферии проводника и скапливаться в периферийной зоне и в результате была зарегистрирована максимальная величина электрического (отрицательного) сигнала -252 мкВ (рис. 1). При этом от образованной группы электронов в периферийной области возникает электрическое поле, сила которого перемещает электроны из периферии обратно к центру проводника, т.е. возникает явление электромагнитной индукции. Таким образом возникают электрические колебания во вращающемся спиральном проводнике. Анализ периодов колебаний затухающего электрического процесса в проводнике при его торможении позволяет определить частоту вращения проводника в каждый момент времени.

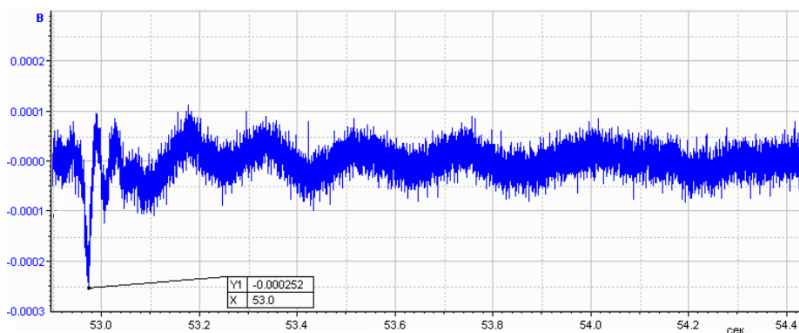


Рис. 1. Импульс ЭДС (при резком ускорении) и электроколебательный процесс (при постепенном торможении) в спиральном вращающемся проводнике

Приведен следующий эксперимент, в котором спиральный проводник резко ускорился и через 0.6 с резко тормозился. На рис. 2 представлен электрический сигнал в этом эксперименте.

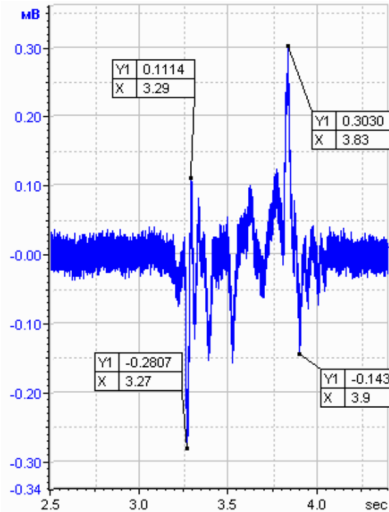


Рис. 2. Импульсы ЭДС во вращающемся спиральном проводнике при резком ускорении и торможении

Другие результаты и направления исследований электронно-инерционных эффектов в поле виброускорений и по влиянию указанных эффектов на температуропроводность проводников в поле центробежных ускорений представлены в работах [6, 7].

Список литературы

- [1] Lebedew P. *Ann. d. Phys.*, 39. 840 (1912).
- [2] Nichols E. F. *Physik, Z.*, 7, 640 (1906).
- [3] Tolman R., Stewart T. The electromotive force produced by the acceleration of metals // *Phys. Rev.* Vol. 8, No. 2. P. 97–116 (1916).
- [4] Гинзбург В. Л., Коган Ш. М. Об электронно-инерционных опытах // *ЖЭТФ*, Т. 61, вып. 3(9). С. 1177-1180 (1972).
- [5] Барнетт С. Гиромагнитные эффекты и эффекты инерции электронов // *Успехи физических наук*. Т. 18. Вып. 3 (1937).

- [6] Лепешкин А. Р. Электронно-инерционные опыты при воздействии виброускорений — к столетию опытов Манделъштама Л. И., Папалекси Н. Д. и Толмена Р. Ч. // Сборник трудов Всероссийской конференции. — М.: ФИАН. С. 104–105. (2014).
- [7] Lepeshkin A. R. Technique of studying thermal diffusivity of metallics in different directions in a field of centrifugal accelerations and forces // *Journal of engineering thermophysics*. V. 26. № 1. P. 10–16 (2017).

Application of the optical computer system with associative holographic memory to the simulation of the elementary processes in gas and plasma

S. A. Pozdneev

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

For the computer simulation of the dynamic of the elementary processes in nuclear, atomic and chemical physics the new optical computer system with associative holographic memory are proposed.

The system are consists of the next main components: three-dimensional associative holographic read-write memory which include memory of classes, set of lasers, two deflectors, electro-optic beam translator, holographic grating, three control shutters, filter, photodetector, microfilm of data and synchronizing system [1].

There are four regimes of the work [1, 2]:

- recording of classes i.e. descriptions of classes of data are recorded on the corresponding part of holographic memory; the descriptions look like set of words or images;
- recording of data i.e originals of data (documents, graphics, images) are recorded on the main memory;
- interactive retrieval i.e. the image of the question query is reflected on the filter, then it is compared with images of classes, then with images of original of date inside the images of the corresponding of classes; user is able to change the image of query on-line.
- output of the results of the retrieval; user is able to reflect on the screen.

The main advantages of this system are: effectiveness in work with the very large data base, reliability and mobility. The system may be used in complex information systems, in the systems of the control of the technological processes.

The main characteristics of this system are [2]: memory capacity — 5–8 Gbytes/1 Plane; research time — 1–5 sec/query; record time — 1 msec/1 image. The system may be used in fields such as: artificial intelligence system, decision support systems, information research systems, librarian, medicine, biology, space research, experimental, theoretical physics at all.

The results of the simulation of the simplest chemical reaction in gas and plasma (collision electrons and atoms with two and three atom molecules) are presented.

References

- [1] Pozdnev S. A. Optical computer system with associative holographic memory // 15-th International Conference on Coherent and Nonlinear Optics. Book of Abstract, St. Petersburg, 1995, p. 40.
- [2] Pozdnev S. A., Raykov A. N. Optical computer system with associative holographic memory // Izobreteniya i Otkritiya, Patent N 1836698, Moscow, 1993 (in Russian).

Эффект Штерна-Герлаха как квантовая технология получения наноструктур с заданной однонаправленной анизотропией физических свойств

Ф. А. Пудонин¹, И. А. Шерстнев¹, Д. С. Косцов¹, Д. Д. Носкова¹,
Н. К. Масракова², А. П. Болтаев¹

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, г. Москва, Россия
Университет науки и технологий МИСИС, г. Москва, Россия

В настоящее время исследования сильно анизотропных и хиральных структур приобрели особую актуальность поскольку они могут иметь уникальные оптические и электромагнитные свойства. Например, предполагается, что отрицательный коэффициент преломления может

быть получен в метаматериалах с сильной хиральностью. Часто хиральность может являться следствием возникновения в структурах однонаправленной анизотропии. В работе предложена новая квантовая технология получения хиральных систем из многослойных наноструктур, в основе которой лежит квантовый эффект Штерна–Герлаха. Для этого нами использовался метод катодного распыления, обеспечивающий осаждение материала на подложку в виде атомов (атомарный пучок), и добавлялось неоднородное магнитное поле. В этом случае процесс напыления происходит примерно так, как это имеет место в приборе для наблюдения эффекта Штерна–Герлаха. На примере многослойных систем с немагнитными металлическими и диэлектрическими слоями Ag, Bi и Al₂O₃ показано, что в зависимости от взаимной ориентации подложки, магнитного поля и пучка атомов распыляемого материала, на подложке вырастает ряд протяженных по площади пленок, в которых возникает однонаправленная анизотропия (оптическая, магнитная и др.), причем в различных пленках ориентация оси анизотропии может быть различная. Для характеристики возникшей анизотропии предложено использовать эффект оптической невзаимности. В результате в многослойных наноструктурах с металлическими слоями типа [Ag(Bi)–Al₂O₃]_N, выращенных в «геометрии» эффекта Штерна–Герлаха, был обнаружен аномально большой по величине эффект оптической невзаимности, что являлось следствием возникновения в этих структурах однонаправленной оптической анизотропии (хиральности).

Для того, чтобы убедиться, что используемое при напылении неоднородное магнитное поле действительно влияет на процесс роста и свойства немагнитных пленок, было проведено напыление структур [Bi(1 nm)–Al₂O₃(2 nm)]₅ на большие пластины керамического ситалла (45×60 мм²). В результате было обнаружено (даже визуально), что на подложках сформировалось несколько областей (пленок), разделенных областями, где пленки отсутствовали. Причем ось однонаправленной анизотропии в каждой из таких пленок имела свою ориентацию. Также было найдено, что, в зависимости от ориентации магнитного поля по отношению к подложке, ориентация оси анизотропии у выращенных структур может изменяться. Отметим, что зависимость ориентации однонаправленной оси анизотропии от взаимной ориентации магнитного поля и подложки позволяет выращивать многослойные наноструктуры с желаемой ориентацией оси анизотропии каждого из слоя многослойной

структуры. Это легко осуществить, например, простым поворотом подложки на желаемый угол во время напыления слоя при фиксированной ориентации магнитного поля. Например, можно получать многослойные магнитные структуры, каждый слой которой имеет нужную ориентацию намагниченности и получить в результате, например, геликоидную намагниченность в структуре, хотя изначально данный магнитный материал такой магнитной структурой не обладает. То же самое можно осуществить и для сегнетоэлектрических и других структур.

Здесь стоит отметить, что не обязательно в процессе (или после) осаждения слоев на подложку, выделенная (из-за воздействия неоднородного магнитного поля) начальная ориентация магнитных моментов у атомов будет продолжительное время сохраняться — взаимодействие между магнитными моментами (спинами) в структуре может привести к их полной или частичной разориентации и исчезновению анизотропии. Однако экспериментально обнаруженная анизотропия в уже выращенных структурах свидетельствует, что возникшая анизотропия сохраняется длительное время (более 2 лет). Было предположено, что разориентация магнитных моментов будет ослаблена, если выращенные металлические слои в многослойной структуре будут достаточно тонкими или состоять из островков определенного размера, расположенных на некотором расстоянии друг от друга. В результате проведенных исследований было показано, что на возникшую анизотропию в многослойных структурах оказывает сильное влияние внутрислоевые взаимодействия атомных моментов в пленке. Были получены зависимости величины эффекта оптической невзаимности и ориентации оси однонаправленной анизотропии от ориентации магнитного поля по отношению к образцу во время напыления и от толщины металлических слоев.

Мы считаем, что самым важным и неожиданным (удивительным) результатом в работе является отсутствие заметного влияния, например, внешнего магнитного поля и температуры на ориентацию однонаправленной оси анизотропии и на величину эффекта невзаимности в уже выращенных структур. Т. е. чрезвычайно трудно разрушить создавшуюся во время роста анизотропию, даже, например, отжигая структуры со слоями из V_i при температуре, близкой к температуре плавления V_i . Это значит, что выращенные данной квантовой технологией структуры являются сильно коррелированными системами.

РАЗНОЕ

Усиление электронных и атомарных корреляций в молекулярно-кластерных композициях разнородных веществ

Т. А. Аксенова, И. С. Цебрук, Н. В. Классен, В. В. Кедров,
А. П. Киселев, А. П. Покидов

Институт физики твердого тела им. Ю.А.Осипяна РАН, Черноголовка

Молекулярно-кластерные композиции органика – неорганика занимают промежуточное положение между наноккомпозитами таких составов, где за счет наноскопичности зерен и большой площади межзеренных границ влияние на макросвойства оказывают перемешивания электронных и фононных состояний приграничных областей, и атомарными смесями разнородных веществ, где один из компонентов является основным, а атомы второго его как бы легируют (так, например, выглядят молекулы металлоорганики). Зерна молекулярно-кластерных композиций, с одной стороны, еще достаточно велики для сохранения характеристик органики и неорганики. С другой же стороны их размеры уже уменьшены до квантовых масштабов, когда волновые функции электронных и колебательных состояний проникают на всю глубину зерна соседней инородной фазы, создавая предпосылки для формирования качественно новых свойств таких смесей. Например, множество электронов неорганического компонента может значительно активнее взаимодействовать друг с другом через высокоамплитудные фононы органики, за счет чего, по результатам теоретического анализа, возможно формирование уникальных оптических и электрофизических свойств типа рекордной светоизлучательной способности или высокотемпературной сверхпроводимости [1–3].

Мы апробировали несколько методик формирования молекулярно-кластерных композиций органика – неорганика с помощью деформационных, оптических, электрических, магнитных, акустических, радиационных воздействий на разные смеси такого рода. И когда размеры этих компонентов уменьшались до квантовых масштабов (порядка десяти–двадцати нанометров), наблюдались ранее не известные факты. Обнаружено деформационное внедрение с аномально высокими скоростями на многие десятки микрон в неорганические твердые тела, содержащих ароматические кольца органических люминофоров. При этом траектории внедрения схожи с прямолинейными микронитями, идущими перпендикулярно поверхности в глубину кристалла. Это объясняется тем, что механическая деформация искажает симметрию ароматических колец и по этой причине резко активизируется притяжение к неорганическим атомам тех узлов колец, чья энергия заметно увеличилась за счет деформационного искажения. По этой причине деформируемые молекулы с ароматическими кольцами втягиваются внутрь неорганическими атомами. Такого же рода активация взаимодействий между ароматической органикой и неорганикой наблюдалась и при других воздействиях, искажающих симметрию — например, ультразвуковых, электрических, магнитных, лазерных. Неорганические катионы и анионы взаимодействуют с разными участками ароматических колец [4]. Для ионов галогенов типичны реакции замещения ими ионов водорода (т. е. протонов), связанных с угловыми атомами углерода (в наших экспериментах это были йод и бром в использованных нами йодиде цезия и бромиде лантана — хорошо известных неорганических сцинтилляторах [5]). С другой стороны, катионы этих сцинтилляторов (цезий и лантан) за счет своих положительных зарядов притягиваются к зонам, расположенным по разные стороны от плоскости самого кольца, где расположены отрицательные пи-электроны. Захват катионов ароматическими кольцами резко изменяет их магнитные характеристики: изначально они диамагнитны за счет легкости перемещений пи-электронов по окружности кольца (такие движения даже могут привести к сверхпроводимости [3]). Но захват катиона приводит к закреплению пи-электронов и за счет их спинов кольцо становится парамагнитным. По этой причине морфологии отвержденных пленок полистирола с введенными в раствор частицами йодида цезия или бромида лантана в магнитном поле и без этого поля существенно различаются.

Без магнита морфологии пленок однородны, в то время как при отверждении в магнитном поле амплитудой порядка 0,4 Тл в них образуется регулярная картина параллельных друг другу нитевидных дуг, где концентрируются композиции из полимерных молекул и атомов наполнителя. Такое концентрирование можно объяснить выстраиванием ставших парамагнитными органических молекул в магнитном поле. Микроструктуры таких композиций с йодидом цезия и бромидом лантана сильно отличаются друг от друга. Рентгеновская дифрактометрия пленок с йодидом цезия выявляет наличие галообразных рефлексов аморфного полистирола и кристаллического иодида цезия, а также узкие рефлексы новой кристаллической фазы, возникшей в результате взаимодействия органики и неорганики. В случае же бромида лантана на месте его кристаллических рефлексов возникает размытое гало, свидетельствующее о формировании аморфной агломерации неорганики и органики. Более активное растворение бромида лантана в органике можно объяснить вдвое большим зарядом катиона лантана по сравнению с катионом цезия, что значительно усиливает взаимодействие иона лантана с ароматическими кольцами. Растворение бромида лантана подтверждается и исчезновением из спектра люминесценции композиции его спектральной полосы, в то время как в люминесценции композиции активированного полистирола с йодидом цезия присутствуют спектральные полосы и органики, и неорганики.

В результате испарения импульсным инфракрасным лазером пленок активированного полистирола с наполнителем из йодида цезия сканирующей электронной микроскопией обнаружено формирование кружевоподобных молекулярно-кластерных композиций из компонентов органики и неорганики с квантовыми поперечными размерами составляющих их нитей (порядка 10–20 нм). Это можно считать прямой демонстрацией продуктивности используемых нами методик для образования композиций с квантовыми свойствами, где электронные и атомарные корреляции между органическим и неорганическими составляющими могут регулироваться в широких пределах вариациями сочетаний деформационных, электрических, лазерных, магнитных и ультразвуковых воздействий. В докладе будут сообщены данные о структуре и свойствах полученных молекулярно-кластерных композиций.

Список литературы

- [1] Агранович В. М. и др. Экситоны и оптические нелинейности в гибридных органических-неорганических наноструктурах // *УФН*, 169:3 (1999), 348, «New concept for organic LEDs: non-radiative electronic energy transfer from semiconductor quantum well to organic overlayer». *Synthetic Metals* (2001), 116(1-3), 349.
- [2] Little W. A. Possibility of synthesizing superconductors // *Phys. Rev. A*, 1964, 134, p. 1416–1424. Little W.A., 1965, Superconductivity at room temperature // *Sci. Am.*, 212, p. 21–27.
- [3] Shrivastava S. K. Superconductivity in Organic Materials // *Journal of Emerging Technologies and Innovative Research*, 2019, v.6, p. 45–55.
- [4] Mineo H., Phan N.-L. and Fujimura Y. Quantum Control of Coherent π -Electron Dynamics in Aromatic Ring Molecules // *Front. Phys.* 2021, 9:675134.
- [5] Vinokurov S. A., Klassen N. V., Orlov A. D. Structural transformations in the system lanthanum bromide- water – electrical field // *Journal of Physics C*, 2021. Vol. 2056, Iss. 1. P. 12037.

Самосогласованный расчет эффектов мультистабильности экситон-поляритонов в хиральном микрорезонаторе

О. А. Дмитриева^{1,2*}, Н. А. Гиппиус², С. Г. Тиходеев^{1,2,3}

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

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

³Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, г. Москва, Россия

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

Исследование посвящено теоретическому анализу возникновения явлений би- и мультистабильности в хиральном полупроводниковом брэгговском микрорезонаторе с квантовыми ямами при сильной резонансной оптической накачке.

Ранее было показано [1–3], что подобные микрорезонаторы с квантовыми ямами могут проявлять би- и мультистабильность под воздействием сильной оптической накачки из-за синего сдвига экситонной частоты.

ты в результате взаимодействия между экситонами, а в случае хирально-го микрорезонатора наблюдается би- и мультистабильность степени циркулярной поляризации экситонной плотности [4].

В данной работе проведен самосогласованный расчет с учетом неоднородности распределения поля и экситонной плотности. Было получено распределение экситонной плотности для различных уровней интенсивности накачки (рис. 1). Показано, что отклик, рассчитанный с учётом неоднородности поля в системе, хорошо соответствует приближению среднего поля с небольшим отличием около 4 % (рис. 2).

Работа выполнена при поддержке РФФ (грант № 22-12-00351).

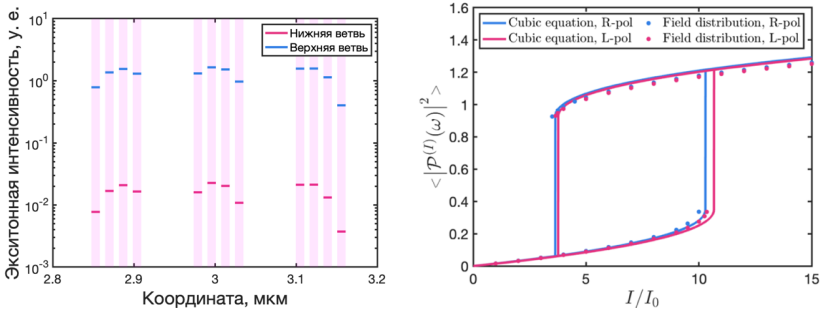


Рис. 1. Слева: зависимость экситонной интенсивности от координаты в направлении, перпендикулярном плоскости резонатора. Вертикальные полосы показывают положение квантовых ям в активной области микрорезонатора. Горизонтальные линии показывают усредненные значения интенсивности экситонов в соответствующих квантовых ямах на нижней (красные линии) и верхней (синие линии) ветвях бистабильного S-контура.

Справа: зависимость средней по объёму экситонной интенсивности от интенсивности накачки в правой (синим) и левой (красным) циркулярной поляризации, рассчитанная двумя методами: в приближении однородного поля — линии, с самосогласованным учётом неоднородности — точки.

Список литературы

- [1] Gippius N. A., Tikhodeev S. G., Kulakovskii V. D. et al. // *Europhys. Lett.* 2004. V. 67. P. 997.
- [2] Gippius N. A., Shelykh I. A., Solnyshkov D. D. et al., *Phys. Rev. Lett.* 2007. V. 98. P. 236401.

- [3] Гаврилов С. С., *УФН*, 2020. Т. 190, 137.
[4] Дмитриева О. А., Гиппиус Н. А., Тиходеев С. Г., *Доклады РАН. Физика. Технические науки*. 2023. Т. 510. С. 10–15.

Фрактонные модели в приложениях теории упругости искривленных геометрических структур с аллотропами углерода

Л. В. Ельникова

НИИ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия

Свойства квазичастиц фрактонов используются в устройствах хранения квантовой информации [1], а различные фрактонные модели могут обладать предсказательными возможностями при описании упругих и дефектных характеристик материалов, описываемых в рамках аппарата гравитационных и квантово-полевых теорий [2, 3].

В представленном докладе сообщается о применении фрактонной модели типа I при описании дисклинаций, индуцирующих агрегированные состояния наночастиц фуллерена в растворителях и в объеме полимерной матрицы. На основе представления о дуальности фрактонов и упругости [4, 5], а также калибровочного подхода к искривленным поверхностям [6], предлагается численное решение задачи об эволюции дисклинаций в базе дефектов на дуальной решетке. Подобные механизмы изучены ранее применительно к агрегации других углеродных наноструктур, например, наночастиц графена и нанографита в изотактическом полипропилене [7].

Список литературы

- [1] Haah J., *Phys. Rev. A*, **83**, 042330 (2011).
[2] Perez A., and Prohazka S., *Phys. Rev. D*, **106**, 044017 (2022).
[3] Tsaloukidis L., Fernandez-Melgarejo J. J., Molina-Vilaplana J., and Surowka P., *Phys. Review B*, **109**, 085427 (2023).
[4] Pretko M., Radzihovsky L., *Phys. Review Lett.*, **120**(19), 195301 (2018).
[5] Gromov A., Radzihovsky L., ArXiv: 2211.015130v1.

- [6] Kochetov E. A. and Osipov V. A., *J. Phys. A*, **32**, 1961 (1999).
[7] Elnikova L. V., Ozerin A. N., Shevchenko V. G., Nedorezova P. M., Ponomarenko A. T., Skoi V. V., Kuklin A. I. Cornell University Library. ArXiv: 2205.15392v1.

Влияние высокого давления на кристаллическую, магнитную структуру и колебательные спектры ван-дер-ваальсовых соединений

О. Н. Лис^{1,2*}, Д. П. Козленко¹, С. Е. Кичанов¹, Е. В. Лукин¹, И. Ю. Зель¹

¹*Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия*

²*Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань, Россия*

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

Ван-дер-ваальсовые соединения в настоящее время являются одними из наиболее интересных объектов исследования в области физики конденсированного состояния. Недавно было обнаружено сохраняющееся дальнейшее магнитное упорядочение в их двумерных формах, что открывает широкие возможности для применения. Особенностью ван-дер-ваальсовых соединений также является присущая им решетка типа «пчелиные соты», которая состоит из слабо связанных слоев. Свойства структуры ван-дер-ваальсовых соединений приводят к значительной чувствительности их физических свойств к внешним воздействиям, которые могут вызвать множество необычных явлений: зарядовое, орбитальное и спиновое упорядочения, сверхпроводимость, появление аномального эффекта Холла, скирмионные состояния, различные фазовые переходы и др., также важные для разработки, например, перспективных спинтронных устройств. Яркими представителями этого класса соединений являются бромид хрома CrBr_3 и теллурид железа Fe_3GeTe_2 , в которых также наблюдается ряд необычных физических явлений, представляющих как фундаментальный, так и практический интерес.

По сравнению с другими экспериментальными методами, воздействие высокого давления является прямым методом контролируемого из-

менения магнитных взаимодействий за счет вариации межатомных расстояний и углов. Проведение исследований при высоких давлениях дают уникальную возможность изучения взаимосвязи изменений структурных параметров кристалла с изменениями магнитной структуры, что необходимо для понимания природы и механизмов физических явлений, наблюдаемых в исследуемых объектах. Нейтронная дифракция в свою очередь предоставляет уникальную возможность исследовать одновременно кристаллическую и магнитную структуры.

Настоящая работа посвящена исследованию кристаллической, магнитной структуры и колебательных спектров CrBr_3 и Fe_3GeTe_2 в широких диапазонах температур и давлений. Детальные исследования кристаллической и магнитной структуры соединений проводились с помощью нейтронной дифракции на дифрактометре ДН-6 импульсного высокопоточного реактора ИБР-2 (ЛНФ, ОИЯИ, Дубна, Россия). Исследования с помощью нейтронной дифракции CrBr_3 позволили обнаружить в области ниже $T_c = 37$ К отрицательное тепловое объемное расширение, а также аномальное поведение межатомных расстояний, углов и частот колебательных мод, что указывает на проявляющуюся сильную спин-решеточную связь. Воздействие высокого давления приводит к подавлению магнитного упорядочения, а полное подавление ФМ-состояния и магнитный переход либо в АФМ-состояние, либо в магнитно-неупорядоченное состояние ожидается при $P \sim 8,4$ ГПа. Наши результаты также демонстрируют индуцированный давлением изоструктурный фазовый переход в ферромагнетике CrBr_3 , который происходит в диапазоне давлений 2,5–10 ГПа. Также были получены барические зависимости параметров элементарной ячейки и температуры Кюри. Дополнительные аномалии в поведении частот колебательных мод, обнаруженные при $P \sim 26$ ГПа, указывают на другое фазовое превращение, связанное с переходом в металлическое состояние. Исследования с помощью рентгеновской дифракции Fe_3GeTe_2 при высоких давлениях также позволили выявить изменения в барическом поведении структурных параметров, связанных с наблюдаемым изоструктурным переходом при $P \sim 7$ ГПа. Наблюдаемое аномальное поведение параметров элементарной ячейки, межатомных расстояний и углов, и колебательных мод могут свидетельствовать о конкурирующем характере внутрислоистых (ab) и межслоистых (вдоль c) взаимодействий.

Электрические корреляции между микропузырьками на поверхности водных растворов

А. А. Топоркова^{1,2}, С. А. Винокуров,² Н. В. Классен,² 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

Год назад, в мае 2023 года на аналогичной конференции СКЭС-23 был представлен наш доклад «О коррелированных взаимодействиях свободных и связанных зарядов в растительных биоматериалах». Там сообщалось о сильных электрических поляризациях, действующих на границах между стенками микрокапилляров и заполняющими их водными растворами. Коррелированные действия этих поляризаций в виде пробегающих по стенкам электромеханических волн в значительной степени определяют важные для жизни растения процессы передачи информационных сигналов и переноса необходимых растению питательных и восстановительных веществ [1]. Последующие наши исследования по выделению и аккумулярованию водорода путем электролиза водных суспензий растительных материалов выявили ряд особенностей в поведении, образующихся на поверхности воды при таком электролизе микропузырьков, заполненных преимущественно водородом. Первая особенность — механическая прочность пузырьков, которые ведут себя на поверхности воды подобно прочным упругим «мячикам», сохраняя свои стабильные объемы несколько десятков минут. Этой прочностью и стабильностью они сильно отличаются от пузырьков, образующихся при электролизе чистой воды. Те при столкновениях друг с другом сначала сливаются, а затем просуществовав десять–двадцать секунд, лопаются. Пузырьки же «растительного» происхождения не лопаются не только при встречах друг с другом, но и сохраняются даже при попытках проколоть их металлической иглой (рис. 1). Под нажимом иглы пузырек лишь упруго деформируется, а после отвода иглы быстро восстанавливает исходную форму.

Дополнительно к прочности и упругости микропузырьков в их поведении проявляются силы притяжения и отталкивания. При расстояниях между пузырьками порядка их собственного диаметра между ними

действует притяжение, вызывающее их сближение. Но при сближении начинает действовать отталкивание, не только не позволяющее им слиться, но в ряде случаев и мешающее им войти в контакт друг с другом. В такой ситуации между сближающимися пузырьками за доли секунды формируются перемычки, направленные по линии, соединяющей центры пузырьков (рис 2, слева). Важно отметить, что соседние пузырьки реагируют друг на друга задолго до соприкосновения, когда расстояние между ними еще порядка их собственного диаметра (рис. 2, справа).

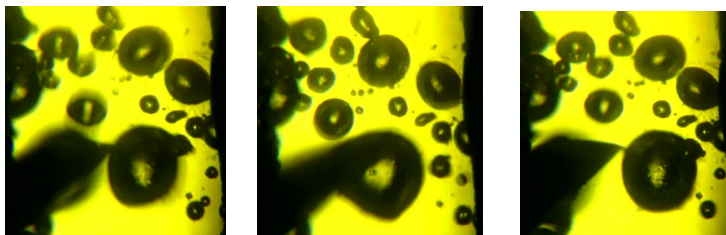


Рис. 1. В водородный пузырек на поверхности воды уперта стальная игла в попытке его проколоть (слева). Но пузырек только упруго деформируется под нажимом иглы (в центре), а после ее отвода восстанавливает прежнюю форму (справа)

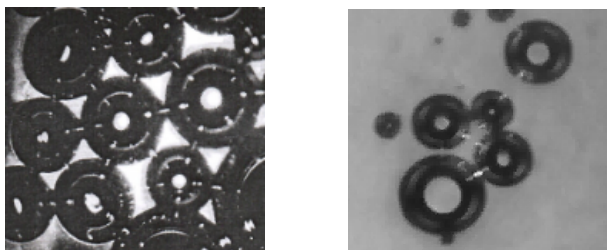


Рис. 2. Слева — агломерат из притягивавшихся друг к другу электролизных микропузырьков, которые не вошли в непосредственный контакт, а образовали между собой перемычки в виде микрохребтов на поверхности воды. На правом фото выше и правее центра видна светлая линия, как бы соединяющая пузырьки на значительном расстоянии. Светлые точки и линии на этих снимках образованы просветлениями поля зрения в частично скрещенных поляризаторах за счет образования оптической анизотропии на направленных неровностях поверхностей вода и пузырьков, вызванных их взаимодействием

Наблюдаемые особенности поведения газовых пузырьков растительного происхождения можно объяснить совместным действием содержащихся в мембранах растительных клеток поверхностно активных веществ (ПАВ) и сильной корреляции электрических зарядов, индуцированной притяжением и направленной ориентацией аномально больших дипольных моментов молекул воды к границам с растительными компонентами. ПАВ, извлеченные из мембран электрическим полем, образуют на поверхности воды тонкую пленку за счет гидрофобности одного из концов этих молекул. При образовании электролизных газов их молекулы образуют в объеме воды микропузырьки, быстро всплывающие на поверхность. В результате взаимодействия ПАВ, цепочек целлюлозы и молекул воды формируются механически прочные оболочки микропузырьков. Молекулы воды внутри них ориентируются вдоль поверхности, образуя сегнетоэлектрическое упорядочение за счет образования водородных связей с биополимерами. Быстрые осцилляции поверхности пузырьков генерируют большие дипольные моменты, вызывающие притяжение между пузырьками по типу ван-дер-ваальсового [2 – 4]. Но при их сближении начинается отталкивание одинаково заряженных наружных поверхностей оболочек (эти заряды компенсируют внутренний положительный заряд накопленных протонов).

Список литературы

- [1] Топоркова А. А., Аксенова Т. А., Винокуров С. А., Классен Н. В., Цебрук И. С. О коррелированных взаимодействиях свободных и связанных зарядов в растительных биоматериалах // XX Конференция “Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления”, Москва, ФИАН, 25 мая 2023 г. сб. трудов, с. 175–177.
- [2] Меньшиков Л. И., Меньшиков П. Л., Федичев П. О. Эффекты дальнего действия в воде // *Успехи физических наук*. 2020. Т. 190, № 5. С. 475–324.
- [3] Gorshunov B. P. et al. Incipient ferroelectricity of water molecules confined to nano-channels of beril // *Nature Communications*, 2016, 7: 12842, doi 10.1038.
- [4] Grunin Yu. B., Grunin L. Yu., Shiraya V. Yu., Ivanova M. S., Masas D. S. Cellulose — water system’s analysis by proton nuclear magnetic resonance and sorption measurements // *Bioresour. Bioprocess*. 2020. Vol. 7, No. 1.

Влияние точечных дефектов на поляронный транспорт в феррите никеля NiFe_2O_4

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

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

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

Шпинели оксидов переходных металлов являются как практически важным классом материалов, так и представляют фундаментальный интерес за счёт большого влияния эффектов сильных электронных корреляций. Феррит никеля NiFe_2O_4 является одним из наиболее активно изучаемых материалов этого класса, в связи с перспективами применения в устройствах спинтроники и энергонезависимой резистивной памяти. Для понимания фундаментальных основ свойств зарядового транспорта необходимо детальное изучение механизма температурно активированной поляронной проводимости. Множество существующих экспериментальных работ показывают большую сложность этого механизма с возможностью существования как электронных, так и дырочных поляронных носителей.

В данной работе, основываясь на успешном описании магнетита [1] и хромита [2], нами была построена модель феррита никеля в рамках теории функционала электронной плотности с учётом сильных корреляций в приближении DFT+U. Будут представлены расчёты электронной структуры в идеальных и дефектных конфигурациях, а также показаны возможные изменения в поляронном транспорте при присутствии дефектов.

Список литературы

- [1] Shutikova M. I., Stegailov V. V. Frenkel pair formation energy for cubic Fe_3O_4 in DFT+U calculations // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2022. Vol. 34, P. 475701.
- [2] Fominykh N. A., Stegailov V. V. Polarons and Charge Transfer in FeCr_2O_4 Chromite Treated by the DFT+U Method // *JETP Letters*. 2023. Vol. 117, P. 849-853.

Распределение Ферми–Дирака для дефектов с различной энергией кулоновской корреляции

С. М. Якубеня

НИИ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия

E-mail: seryak56@mail.ru

Уравнение электронейтральности является основополагающим при описании гальваномагнитных эффектов в полупроводниках. Основной компонентой этого уравнения является формула описывающая распределение Ферми–Дирака. В настоящей работе рассмотрены случаи распределения Ферми–Дирака для захвата различного числа носителей на один центр в процессе перезарядки дефектов в полупроводниках. Исходной точкой является уравнение комбинаторики описывающие число различных вариантов размещения возбуждений W в кластере, содержащим N узлов. Предполагается, что кластер содержит элементы только одного сорта. Рассматриваются ситуации, когда имеет место захват носителя заряда на один центр и двух носителей на один центр. В последнем случае принципиальным является проекция спина второго носителя, поскольку от этого зависит полная энергия системы и соответственно положение энергетического уровня в запрещенной зоне полупроводника. В том случае, когда реализуется ситуация характерная для дефектов с отрицательной энергией кулоновской корреляции захват двух носителей на один центр оказывается энергетически более выгодной чем захват двух носителей на разные центры. Оптимизация параметра W в шестимерном фазовом пространстве (координатном и импульсном) с использованием метода Лагранжа приводит к следующим результатам:

- фактор спинового вырождения g , входящий в распределение Ферми–Дирака, равен 1 при захвате одного носителя на примесный центр [1];
- g -фактор равен 2 при реализации центров с отрицательной энергией кулоновской корреляции.

Список литературы

- [1] Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников. — М.: Наука, 1977. — 672 с.

Научное издание

**XXI Конференция
«Сильно коррелированные электронные
системы и квантовые критические явления»**

ФИАН, г. Москва
23 мая 2024 г.

Сборник тезисов

Технический редактор А. В. Бакиев

Подписано в печать 11.05.2024. Формат 60×84¹/₁₆.
Усл. печ. л. 11,63. Уч.-изд. л. 12,17. Гарнитура «Таймс».
Бумага для цифровой печати. Печать цифровая. Заказ № 24-18.

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».
