

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

ФИАН, г. Москва
22 мая 2025 г.

СБОРНИК ТЕЗИСОВ



Москва ♦ Ижевск

2025

УДК 530.1(065)

ББК 22.31я43

XXII Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления»: сборник тезисов. — М.–Ижевск : Институт компьютерных исследований, 2025. — 198 с.

ISBN 978-5-4344-1076-2

Настоящий сборник содержит тезисы докладов, заявленных на XXII 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. Сверхпроводимость
3. 2D- и 1D-системы. Экситоны, поляритоны, ВЗП, и прочее
4. Топологически нетривиальные
5. Фазовые переходы, квантовые эффекты и прочие загадки
6. 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, 2025

ISBN 978-5-4344-1076-2

Программный комитет

- С.М. Стишов (ФИАН) — председатель
- В.М. Пудалов (ФИАН) — зам. председателя
- В.С. Кривобок (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)
- 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 XXII конференцию «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления», которая проводится в Физическом институте имени П. Н. Лебедева в Москве. Предыдущая XXI конференция, проведенная в ФИАНе в 2024 г., привлекла большое количество участников. Представленные тезисы были изданы и вручены всем авторам и участникам. Несмотря на некоторое падение научной активности, настоящая конференция также оказалась достаточно популярной, и организаторы надеются на ее успешное проведение.

Содержание

Предисловие	4
-------------------	---

Магнетизм

<i>M. A. Anisimov, A. V. Bokov, D. A. Salamatina, V. N. Krasnorussky, A. V. Semeno, N. M. Chtchelkatchev, M. V. Magnitskaya, V. A. Sidorov, A. V. Bogach, A. V. Tsvyashchenko</i> The study of heat capacity of Laves phase NdRh_2.....	14
<i>A. M. Белемук, С. М. Стишов</i> Термодинамика двумерного кирального магнетика	16
<i>B. H. Глазков, Я. В. Ребров, М. М. Маркина, А. Муртазов, П. С. Бердоносков, А. Н. Васильев</i> Особенности магнитного упорядочения в антиферромагнетиках с декорированной квадратной кагоме-решёткой из семейства набоконта	17
<i>М. М. Глазов, М. А. Семина, З. А. Яковлев</i> Экситоны, трионы и магноны в ван-дер-ваальсовом магнетике CrSBr: взаимодействие, поляронный эффект и взаимное увлечение.....	19
<i>С. К. Готовко, А. Г. Иванова, П. С. Кудимкина, М. Хеммида, Х.-А. Круг фон Нидда, Л. Е. Свистов</i> Электронный спиновый резонанс в LiCu_2O_3 — антиферромагнетике с сильно разбавленной квадратной решёткой. Псевдощель в спектре магнитного резонанса	21
<i>М. Р. Джамалудинов, К. Ш. Муртазаев, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. Р. Рамазанов, Д. Р. Курбанова</i> Четырёхвершинная модель Поттса на слоистой треугольной решетке в магнитном поле	24

В. Е. Дмитриенко, В. А. Чижиков

Кристалл RuO_2 — альтермагнетик, антиферромагнетик или парамагнетик?27

К. К. Кешарпу, П. А. Максимов

Эффект квантовой флуктуации на модель Китаева–Гейзенберга на треугольной решетке29

N. N. Kovaleva, T. N. Fursova, K. I. Kugel

Jahn-Teller excitations in manganites and cuprates30

*А. Н. Кульчу, Р. А. Халания, А. В. Миронов, С. М. Аксенов,
А. В. Богач, А. В. Шевельков*

Взаимодействие двух магнитных подрешеток в фазах $\text{RMn}_8(\text{Ga,Ge})_3$, где $\text{R} = \text{Sm, Gd-Dy}$ 32

И. В. Леонов

Электронная структура, орбитально-селективные перенормировки, и магнитные корреляции в фазах Раддлсдена–Поппера $\text{La}_{n+1}\text{Ni}_n\text{O}_{3n+1}$ $n = 2$ и 3 под давлением35

П. А. Максимов, S. Jiang, L. P. Regnault, А. Л. Чернышев

История $\text{BaCo}_2(\text{AsO}_4)_2$: 50 лет от БКТ до Китаева36

В. Н. Манцевич, Д. С. Смирнов

Ориентация электронного спина током в квантовой точке: эффект Кондо, спиновый эффект Нернста37

А. С. Москвин

Электронная и магнитная структура никелатов RNiO_3 за пределами модели Хаббарда и теории функционала плотности ...39

Д. Ю. Новосёлов

Магнетизм в монослойных электренах XF ($\text{X} = \text{Ca, Sr, Ba}$).....41

П. С. Савченков, В. Н. Лазуков, П. А. Алексеев

Нейтронный магнитный формфактор в исследованиях f-электронной нестабильности44

*Д. А. Саламатин, В. Н. Краснорусский, А. В. Семенов,
М. А. Анисимов, А. В. Цвященко*

Макромагнитные свойства и теплоемкость Лавеса фазы NdRh_2 45

<i>В. А. Сидоров, В. Н. Краснорусский, А. В. Боков, Д. О. Сканченко, А. В. Алтынбаев, И. Алферьев, Д. А. Саламатин, З. Н. Волкова, А. П. Геращенко, А. В. Семенов, В. В. Бражский, А. В. Цвяиценко</i> Влияние высокого давления на магнитные переходы в соединениях $Mn_{1-x}Rh_xSi$ с кубической нецентросимметричной структурой B20	47
<i>А. И. Смирнов, Т. А. Солдатов</i> Двухчастичное поглощение в спин-жидкостной и упорядоченной фазах цепочечного антиферромагнетика Cs_2CoCl_4	49
<i>Т. А. Солдатов, А. И. Смирнов</i> Антиферромагнитный резонанс в спин-цепочечном XXZ- антиферромагнетике Cs_2CoCl_4	52
<i>С. В. Стрельцов</i> 6H перовскиты — новый класс альтермагнетиков	55
<i>Т. Н. Тарасенко, Г. К. Волкова, Р. А. Сафонов, В. В. Бурховецкий, В. М. Ткаченко, О. Н. Потапская, Д. Е. Наймушина, А. В. Шевелёва, В. И. Михайлов</i> Влияние слабого легирования ионами Mn^{3+} на магнитные свойства $BiFe_{1-x}Mn_xO_3$ ($0.0 \leq x \leq 0.1$)	56
<i>Ф. В. Темников, Ю. Лун, Ц. Чжан, С. В. Стрельцов, В. Ю. Ирхин, З. В. Пчёлкина, А. В. Ушаков, Е. В. Комлева</i> Теоретическое исследование четверных перовскитов $ACu_3V_2Re_2O_{12}$	59
<i>Р. А. Халания, В. Ю. Верченко, А. В. Миронов, А. Н. Самарин, А. В. Богач, А. В. Шевельков</i> Спин-переориентация и магнитная фрустрация в интерметаллиде $Fe_{32+6}Ge_{35-x}Si_x$ с фрагментами сетки кагомэ	61
<i>В. А. Чижиков, В. Е. Дмитриенко</i> Температурная зависимость периода магнитных спиралей в кубических гелимагнетиках со спинами в неэквивалентных позициях	63
<i>Г. Д. Чичеватов, В. В. Стегайлов</i> Термохимия точечных дефектов в шпинелях $(Fe_xCr_{1-x})_3O_4$ в рамках DFT+U и анализа экспериментальных данных	67

В. Р. Шагинян

**Природа сильно коррелированной квантовой спиновой
жидкости в $\text{Sr}_3\text{CuNb}_2\text{O}_9$ 69**

*В. Н. Краснорусский, А. В. Боков, З. Н. Волкова, А. П. Геращенко,
Н. М. Щелкачев, М. В. Магнитская, Д. О. Скаченко,
Е. В. Алтынбаев, И. В. Алферьев, Д. А. Саламатин, В. А. Сидоров,
А. В. Семенов, В. В. Бражкин, А. В. Цвященко*

**Индукцированное беспорядком сосуществование зонного
низкоспинового и локализованного высокоспинового
состояний Mn в легированном RhMnSi 70**

Сверхпроводимость

А. Д. Божко, В. В. Глушков

**Особенности сверхпроводящего состояния в молибден-углеродных
наноккомпозитах в слабых магнитных полях72**

А. Н. Ионов, А. Н. Бугров

**Условия, необходимые для получения высокотемпературной
сверхпроводимости в углеродном материале при нормальном
внешнем давлении75**

*С. А. Кузьмичев, Т. Е. Кузьмичева, А. В. Муратов,
С. Ю. Гаврилкин, И. В. Морозов, А. И. Шилов, Е. О. Рахманов*

**Экспериментальное определение роли спиновых флуктуаций
в механизме сверхпроводимости пниктидов $\text{Na}(\text{Fe},\text{Co})\text{As}$ 78**

*Т. Е. Кузьмичева, С. А. Кузьмичев, А. Д. Ильина, И. А. Никитченков,
Е. О. Рахманов, А. И. Шилов, И. В. Морозов*

**Сравнение сверхпроводящих свойств ферроселенидов
с изовалентным замещением81**

А. П. Менушенков, М. Ю. Каган

**Формирование ферми-бозе смеси в допированном
висмутате бария BaBiO_3 84**

<i>И. А. Никитченков, С. А. Кузьмичев, К. С. Перваков, В. А. Власенко, И. В. Морозов, А. И. Шилов, Е. О. Рахманов, А. Д. Ильина, Т. Е. Кузьмичева</i>	
Туннельная спектроскопия пниктидов Na(Fe,Co)As и $\text{Ba(Fe,Ni)}_2\text{As}_2$ с вариацией степени допирования в нормальном состоянии	86
<i>В. Г. Орлов, Г. С. Сергеев</i>	
Дорожная карта поиска новых исходных соединений для изготовления высокотемпературных сверхпроводников	89
<i>Н. Т. Баграев, Л. Е. Клячкин, С. А. Кукушкин, А. М. Маляренко, А. В. Осипов, В. В. Романов, Н. И. Руль, К. Б. Таранец</i>	
Андреевские генераторы терагерцевого излучения	94
<i>Я. В. Туркин, Н. Г. Пугач</i>	
Влияние динамического эффекта близости на магнитную динамику в гибридной структуре сверхпроводник/ферромагнитный диэлектрик	96
<i>В. Р. Шагинян</i>	
Общие свойства обычных и высокотемпературных сверхпроводников	98
 2D- и 1D-системы. Экситоны, поляритоны, ВЗП и прочее	
<i>П. С. Алексеев, А. П. Дмитриев</i>	
Многочастичные сильно коррелированные квантовые состояния 2D-электронов в умеренном магнитном поле	99
<i>И. Г. Горлова, К. Н. Болдырев, Е. В. Мостовщикова, А. Н. Титов, В. Я. Покровский</i>	
Спектры пропускания и экситонные состояния в висках TiS_3	101
<i>П. Д. Григорьев, А. В. Цветкова, В. Д. Кочев, С. С. Сеидов, Я. И. Родионов</i>	
Конкуренция волны зарядовой плотности и сверхпроводимости	104
<i>И. В. Загороднев, Д. В. Понкратова</i>	
Интерфейсные электронные состояния на стыке атомных цепочек	107

С. Г. Зыбцев

Конверсия тока ВЗП на микроконтактах $\text{NbS}_3\text{--NbS}_3$ 110

Ю. А. Косевич

**Влияние симметрии системы на плазмон-поляритонные
и оптические свойства наноструктур с внедренным одно-
или двухслойным графеном, в том числе сверхпроводящим113**

Т. И. Могилюк, П. Д. Григорьев

**Проводимость слоистых квазидвумерных проводников
в магнитном поле.....115**

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

**Воздействие поверхностных акустических волн
на динамику волны зарядовой плотности.....118**

*В. Я. Покровский, В. П. Мартовицкий, А. Л. Васильев, А. Г. Иванова,
И. Н. Трунькин, Н. Б. Болотина, М. В. Никитин, С. Г. Зыбцев*

**Внутренние напряжения, спиноподальный распад
и чередование политипов в вискерах NbS_3 121**

Топологически нетривиальные

В. С. Захвалинский, А. В. Борисенко, А. В. Маширов

**Топологические свойства монокристаллов
твёрдых растворов на основе арсенида кадмия125**

*В. С. Журкин, А. Д. Божко, М. А. Анисимов, О. С. Кудрявцев,
Б. В. Андрюшечкин, В. М. Шевлюга, В. В. Глушков*

**Инверсия типа поверхностной проводимости
в коррелированном топологическом изоляторе SmB_6128**

П. М. Ковалева, К. А. Кузнецов, П. И. Кузнецов, Г. Х. Китаева

**Генерация терагерцового излучения в плазмонных
фотопроводящих антеннах на основе топологических
изоляторов.....132**

<i>Н. Н. Ковалева, А. В. Муратов, Т. Н. Фурсова, С. И. Божско, Ю. А. Алещенко, К. И. Кугель, Д. В. Ищенко, О. Е. Терещенко</i> Электронная зонная структура и взаимосвязь с допированием собственными дефектами в МВЕ пленках АФМ топологического изолятора $\text{MnTe} \cdot \text{Bi}_{(2-x)}\text{Te}_{3(1-x/2)}$: исследование методами эллипсометрии и ИК спектроскопии.....	134
<i>Э. Т. Кулатов, Ю. А. Успенский, К. И. Кугель</i> Нетривиальная эволюция дираковского конуса в соединении Cd_3As_2, легированном магнитными атомами.....	136
<i>В. Н. Меньшов, И. П. Русинов, Е. В. Чулков</i> Собственный аномальный эффект Холла на поверхности магнитного полупроводника с сильным эффектом Рашба	139
<i>А. Е. Петрова, С. Ю. Гаврилкин, С. С. Хасанов, В. А. Степанов¹, С. М. Стишов</i> Магнетосопротивление объемного образца FeSi.....	141
<i>Д. В. Фёдоров</i> Подход фазы Берри для сильно коррелированных электронных систем	146
 Фазовые переходы, квантовые эффекты и прочие загадки	
<i>М. Г. Васин, А. А. Елистратов, С. В. Ремизов</i> Критическая динамика спин-бозонной модели	149
<i>К. М. Булатов, Ф. С. Хоробрых, Д. Журавлев, И. Б. Кутуза, П. В. Зинин</i> Плавление алмаза и вольфрама и фазовые переходы под воздействием импульсного лазера при давлениях до 50 ГПа	150
<i>И. В. Ломоносов</i> Уравнения состояния металлов при высоких давлениях и температурах	151
<i>Г. Э. Норман, И. М. Саитов</i> О новом классе фазовых переходов первого рода	154

<i>Ю. С. Поносов, Xubin YE, Y. W. Long, С. В. Стрельцов</i> Рассеяние света электронами и структурный переход в Sr_2VO_4	156
<i>S. M. Stishov, A. E. Petrova, A. M. Belemuk</i> On the topological features of the helical phase transition in MnSi	158
<i>Д. П. Судас, Г. Г. Якушева, П. И. Кузнецов</i> Преобразование оксидов ванадия для оптимизации электронных свойств фазового перехода диэлектрик-металл	164
<i>А. А. Филаткин, И. М. Саитов, Г. Э. Норман</i> Возможность плазменного фазового перехода в плотном разогретом цезии	167
<i>Н. А. Фоминых, В. В. Стегайлов</i> Поляронный хоппинг и переход Вервея в магнетите	170

Разное

<i>Н. В. Валенко, Р. О. Маликов, С. Г. Тиходеев</i> Хиральная метамембрана для терагерцового диапазона на основе кремния	173
<i>С. А. Винокуров, Н. В. Классен, И. С. Цебрук</i> Электрокорреляции в системах «вода–водорастворимые соли–полистирол»	176
<i>В. В. Дмитриев, Д. В. Петрова, А. А. Солдатов, А. Н. Юдин</i> Наблюдение разных мод вибрирующего резонатора с образцом кремниевого аэрогеля в нормальном и сверхтекучем ^3He	179
<i>Ю. В. Кислинский, И. Е. Москаль, В. А. Байдикова, К. И. Константибян, Н. В. Дубицкий, А. М. Петржик, А. В. Шадрин, В. А. Шмаков, Г. А. Овсянников</i> Электронный транспорт в тонких пленках Sr_2IrO_4 и джозефсоновских переходах на их основе	181
<i>Н. И. Руль, К. Б. Таранец, Н. Т. Баграев, Л. Е. Клячкин, А. М. Маляренко, В. В. Романов</i> Оптическое детектирование квантового эффекта Холла в кремниевых наносандвич-структурах	185

Э. И. Хасанова, А. В. Кузьмин, С. С. Хасанов

**Органический проводник κ -(BEDT-TTF) $_2$ Cu(CN) $_3$: Cu $^{2+}$ примеси
в анионном слое и их влияние на электронную структуру187**

*С. Н. Чмырь, А. В. Галеева, Д. Е. Долженко, С. А. Дворецкий,
Н. Н. Михайлов, Д. Р. Хохлов*

Микроволновая фотопроводимость в Pb $_{1-x}$ Sn $_x$ Te(In)189

И. С. Цебрук, Н. В. Классен, В. В. Кедров, А. П. Киселев, А. Д. Орлов

**Корреляции вибронных возбуждений при рентгеновском
облучении кластерных композиций из полимерных люминофоров
и неорганических сцинтилляторов192**

А. Я. Шульман

**Корреляционная энергия с поправкой на самодействие
в функционале от плотности электронов и самосогласованного
потенциала195**

МАГНЕТИЗМ

The study of heat capacity of Laves phase NdRh₂

M. A. Anisimov^{1,2,*}, A. V. Bokov², D. A. Salamatin^{2,3}, V. N. Krasnorussky²,
A. V. Semeno^{1,2}, N. M. Chtchelkatchev², M. V. Magnitskaya², V. A. Sidorov²,
A. V. Bogach¹, A. V. Tsvyashchenko²

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

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

³*Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

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

Rare-earth (RE) transition metal (TM) compounds RETM₂ with a C15 cubic crystal structure (MgCu₂-type, sp. gr. *Fd-3m*, No. 227) have long-lasting history of investigation. These materials represent almost ideal model systems, due to their simple chemical composition, crystal structure and ease of production. The members of RETM₂ family also display a plethora of physical properties, including superconductivity, unusual magnetism, hydrogen absorption, as well as a giant magnetoresistance and substantial magnetocaloric effects [1–3], etc.

In current work we study zero-field heat capacity $C(T)$ of recently synthesized Laves phase NdRh₂. This object was successfully obtained using a toroid high-pressure cell under both high pressure ($P = 8$ GPa) and temperature ($T = 1500$ – 1700 K) conditions. Experiment has been performed on PPMS-9 setup at temperatures 2–300 K. The high quality of the sample and its chemical composition was controlled by X-ray methods as well as by additional measurements of magnetization, electron-spin resonance and charge transport characteristics [3].

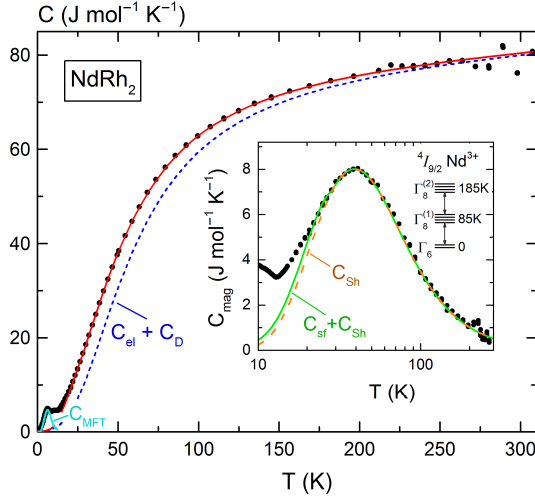


Fig. 1. Temperature evolution of zero-field heat capacity $C(T)$ of NdRh_2

The heat capacity was analyzed by original procedure, which takes into account along with electronic ($\gamma_0 = 25 \text{ mJ/mol K}^2$) and phononic [$\omega_D = 20.9 \text{ meV}$] contributions additional Schottky component (C_{Sh}), caused by crystalline-electric-field effect, (see the main panel and the inset of Fig. 1 and also [3]). It was established that Schottky anomaly emerges in paramagnetic state of NdRh_2 with the ground state of the multiplet $^4I_{9/2} (\text{Nd}^{3+})$ as a Γ_6 doublet. The excited states were fixed according to the splitting scheme depicted in the inset of Fig.1. The Schottky component was corrected by introduction of additional term resulting from the presence of spin-fluctuations [$C_{\text{sf}} = f(\theta_{\text{sf}})$] in the system. The spin-fluctuation temperature was estimated as $\theta_{\text{sf}} \approx 28.5 \text{ K}$. At low temperatures, where all above components may be neglected, a double-peak structure appears on experimental data, Fig.1. Among of them the first anomaly at $T_1 = 6.3 \text{ K}$ may be associated with the ferromagnetic transition of Nd magnetic subsystem. It was approximated by using mean-field theory (C_{MFT}), Fig.1. The satellite maximum at $T_2 = 10.8 \text{ K}$ also has magnetic nature. It was shown that in the range 8–50 K, magnetic properties of NdRh_2 are determined by the

ferrimagnetic Nd–Rh interaction, resulting in magnetic inhomogeneity and spin fluctuations. Details about the analysis are presented in [3].

This study funded by the Russian Science Foundation grant No. 22-12-00008 (<https://rscf.ru/project/22-12-00008/>).

References

- [1] W. Liu et al., *Appl. Mater. Today* **29**, 101624 (2022).
- [2] F. Greidanus et al., *Physica B+C* **119**, 228 (1983).
- [3] V. Krasnorussky et al., *JMMM* **610**, 172480 (2024).
DOI: 10.1016/j.jmmm.2024.172480

Термодинамика двумерного кирального магнетика

А. М. Белемук¹, С. М. Стишов²

¹*Институт физики высоких давлений РАН*

²*Физический институт академии наук*

Рассмотрено поведение термодинамических функций двумерного магнетика с дополнительным взаимодействием Дзялошинского–Мории. Вычисления проводятся на основе спин-решеточной XY-модели с помощью классического метода моделирования Монте-Карло. Характер эволюции кривой теплоемкости зависит от параметра эффективного спин-спинового взаимодействия. Анализ температурного поведения модуля жесткости свидетельствует о наличии перехода Березинского–Костерлица–Таулеса при любом значении величины взаимодействия Дзялошинского–Мории.

Особенности магнитного упорядочения в антиферромагнетиках с декорированной квадратной кагоме-решёткой из семейства набокоита

В. Н. Глазков^{1,*}, Я. В. Ребров^{1,2}, М. М. Маркина³, А. Муртазов³,
П. С. Бердонос³, А. Н. Васильев³

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

²НИУ ВШЭ, факультет физики

³Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

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

Двумерная квадратная кагоме-решётка, чередующая окруженные треугольниками четырёх- и восьми-угольники является примером решётки с сильной фрустрацией обменных связей (рис. 1). Для правильной (с одинаковыми обменными взаимодействиями на всех связях) квадратной кагоме-решётки теоретический анализ [1] предсказывает формирование спин-жидкостного состояния с щелевым спектром триплетных возбуждений.

В соединениях семейства набокоита $ACu_7(TeO_4)(SO_4)_5B$ ($A = Na, K, Cs, Rb$; $B = Cl, Br$) шесть ионов меди из семи формируют слои искаженной квадратной кагоме-решётки, а седьмой ион в межслоевых позициях «декорирует» эту структуру.

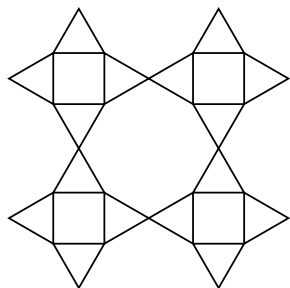


Рис. 1. Фрагмент правильной двумерной квадратной кагоме-решётки

В соединениях этого семейства температура Кюри–Вейса равна 100–200 К, но упорядочение возникает только при 3–5 К. Такое запаздывание упорядочения является типичной чертой фрустрированных магнетиков. Однако, проведенные ранее исследования [2] не позволяли достоверно определить, какая часть магнитных ионов соединений семейства набокоита участвует в формировании магнитного порядка.

Мы провели подробные исследования спектров магнитного резонанса в соединениях семейства $\text{ACu}_7(\text{TeO}_4)(\text{SO}_4)_3\text{B}$ при температурах от 1.7 до 200 К на частотах от 9 до 150 ГГц. Обнаружен сигнал резонансного поглощения как в парамагнитной, так и в антиферромагнитной фазе. Получены следующие основные результаты:

1. Удалось провести точную абсолютную калибровку сигнала поглощения в парамагнитной фазе, показывающую, что при температурах 70–100 К наблюдаемый сигнал парамагнитного резонанса соответствует по интенсивности примерно $1/7$ от ионов меди в исследуемом образце.
2. Показано, что при низких температурах ($T < 15$ К) наблюдаемая интенсивность ЭПР-поглощения практически полностью соответствует полной статической восприимчивости образца.
3. При охлаждении ниже температуры Нееля наблюдаемая парамагнитная линия преобразуется в сигнал антиферромагнитного резонанса (АФМР) с характерной нелинейной частотно-полевой зависимостью и щелевым спектром магнонов.

Полученные результаты являются прямым экспериментальным доказательством ранее высказанной [2] гипотезы о формировании магнитного порядка в подсистеме «декорирующих» ионов меди в межслоевых позициях. Проведенное спектроскопическое выделение вклада упорядочивающейся подсистемы магнитных ионов в полую магнитную восприимчивость образца позволяет разделить вклады слоёв квадратной кагоме решётки и «декорирующих» ионов и указывают на вымерзание восприимчивости двумерных слоёв с понижением температуры, соответствующее теоретическим предсказаниям [1]. Дополнительно, по анализу спектров АФМР удаётся определить щели в магнонном спектре и поля магнитных фазовых переходов в соединениях семейства набокоита.

Работа поддержана грантом РНФ 25-12-68027 (В. Н. Глазков, Я. В. Ребров, проведение ЭПР измерений).

Список литературы

- [1] J. Richter et al., Phys. Rev. B **105** (2022) 144427.
- [2] М. М. Markina et al., Materials Chemistry and Physics **319** (2024) 129348.

Экситоны, трионы и магноны в ван-дер-ваальсовом магнетике CrSBr: взаимодействие, поляронный эффект и взаимное увлечение

М. М. Глазов, М. А. Семина, З. А. Яковлев

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

Взаимодействие разного рода квазичастиц является одной из интереснейших и важнейших проблем современной физики конденсированных сред. Полупроводники и низкоразмерные системы на их основе открывают широкие возможности для изучения такого рода эффектов благодаря параметрически сильному кулоновскому взаимодействию и эффективной связи света с веществом.

Значительный интерес недавно вызвал ван-дер-ваальсов антиферромагнетик CrSBr. Это прямозонный полупроводник с шириной запрещенной зоны ~ 1.5 эВ, оптические свойства которого контролируются экситонами Ванье-Мотта с энергией связи превышающей 100 мэВ [1, 2]. Энергия связи заряженного экситона (триона) — комплекса из двух электронов и дырки составляет около 20 мэВ [3]. Монослой CrSBr является магнетиком типа «легкая плоскость», а слабое межслоевое взаимодействие в ван-дер-ваальсовом кристалле приводит к антиферромагнетизму [4]. Интересная особенность CrSBr, отличающая его от широко изучаемых ван-дер-ваальсовых дихалькогенидов переходных металлов, состоит в значительной анизотропии дисперсии электронов и дырок в плоскости слоев [5].

Нами построена теория кулоновских комплексов: экситонов и трионов в CrSBr. В рамках развитого нами вариационного метода выполнены расчеты энергий связи экситонов и трионов в бислоях CrSBr с учетом анизотропии энергетического спектра. Теоретически описан эффект перераспределения силы осциллятора между экситоном и трионом при легировании структуры [6]. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными [3].

Недавние экспериментальные исследования, выполненные в техническом университете Дрездена, показали, что распространение экситонов и магнонов в CrSBr взаимосвязаны: наблюдается увлечение экситонов магнонами, а при определенных условиях наблюдается сжатие экситонное пятна, вместо его диффузионного расплывания, т. е. наблюдается «отрицательная» диффузия экситонов.

Для объяснения этих результатов нами предложен новый — орбитальный — механизм взаимодействия носителей заряда и экситонов с магнонами. Наличие магнона приводит к «скашиванию» намагниченностей соседних слоев и открывает возможность квантовомеханического туннелирования носителей заряда между слоями, которое запрещено в равновесных условиях из-за антиферромагнитного порядка. В меру смешивания состояний в разных слоях вследствие туннелирования возникает взаимодействие электронных и магнитных возбуждений. Для построения количественной теории эффекта был выведен эффективный гамильтониан магнитной системы, включающий в себя короткодействующее обменное взаимодействие и дальнодействующее диполь-дипольное взаимодействие между спинами. Проведено вторичное квантование магнонов и определен их спектр, показано, что вблизи Γ -точки групповая скорость одной из магнонных веток отрицательна, т. е. противонаправлена волновому вектору. Выведен эффективный гамильтониан электрон- и экситон-магнонного взаимодействия, учитывающий межслоевое туннелирование и особенности магнонных состояний в рассматриваемой системе.

Изучены проявления этого взаимодействия: рассчитана энергия связи и эффективная масса экситон-магнонного полярона. Также в подходе, основанном на кинетическом уравнении, рассчитаны темпы экситон-магнонных столкновений и построена теория эффекта взаимного увлечения экситонов и магнонов. Показано, что «отрицательная диффузия», наблюдаемая в экспериментах, может быть следствием аномальной дисперсии магнонов, характеризующейся при малых волновых векторах отрицательной групповой скоростью.

Работа поддержана грантом РФФ 23-12-00142.

Список литературы

- [1] N. P. Wilson, et. al., Nature Materials **20**, 1657 (2021).
- [2] F. Dirnberger, et. al., Nature **620**, 533 (2023).
- [3] F. Tabataba-Vakili, et al., Nature Communications **15**, 4735 (2024).
- [4] Y. J. Bae, et. al., Nature **609**, 282 (2022).
- [5] J. Klein, et al., ACS Nano **17**, 5316 (2023).
- [6] M. A. Semina et al., arXiv:2411.15493 (2024).

Электронный спиновый резонанс в LiCu_3O_3 — антиферромагнетике с сильно разбавленной квадратной решёткой. Псевдощель в спектре магнитного резонанса

С. К. Готовко^{1,2,*}, А.Г. Иванова³, П. С. Кудимкина¹, М. Хеммида⁴,
Х.-А. Круг фон Нидда⁴, Л. Е. Свистов¹

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

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

³*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, г. Москва, Россия*

⁴*Experimental Physics V, Center for Electronic Correlations and Magnetism,
Institute of Physics, University of Augsburg, Augsburg, D-86135, Германия*

**E-mail: sofyaготовко@gmail.com*

LiCu_3O_3 является квазидвумерным антиферромагнетиком на квадратной решётке. Особенность этого соединения заключается в том, что его кристаллическая структура (см. рис. 1, левая панель) содержит два типа плоскостей магнитных ионов с высокой степенью замещения магнитных ионов Cu^{2+} немагнитными ионами Li^+ . Такое замещение является неотъемлемым свойством кристаллов LiCu_3O_3 . Один тип плоскостей содержит 20 % немагнитных ионов, а второй — 40 % [1], что критически близко к порогу протекания в квадратной решётке. Такие необычные об-

разцы стабильны при нормальных условиях и имеют воспроизводимые свойства. Взаимодействие между плоскостями предположительно слабое в силу конфигурации обменных взаимодействий, поэтому в слабо разбавленной плоскости можно ожидать установление магнитного порядка, в то время как в сильно разбавленных плоскостях может не возникать дальнего порядка.

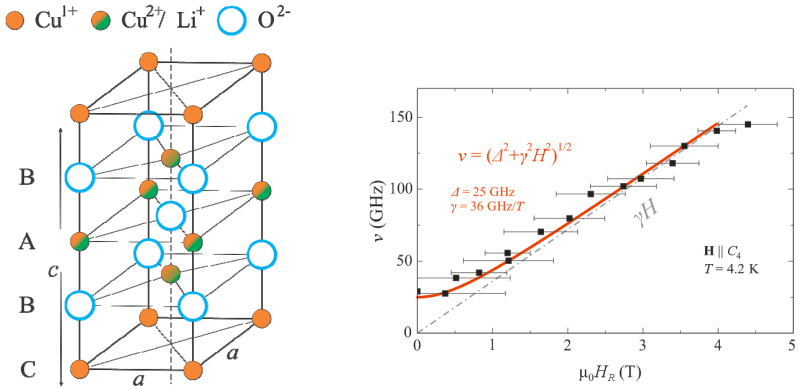


Рис. 1. Левая панель: кристаллографическая структура LiCu_3O_3 . Позиции различных ионов показаны разными цветами.

Правая панель: частотно-полевая зависимость спектра ЭСР при $T = 4.2 \text{ K} < T_{c2}$. $\mathbf{H} \parallel C_4$. Символы — резонансные поля на различных частотах, планками погрешностей показаны полуширины соответствующих линий поглощения на полувысоте сигнала. Штрихпунктирной прямой показана парамагнитная частотно-полевая зависимость $\nu = \gamma H$ ($\gamma = 36 \text{ ГГц/Тл}$), красной сплошной кривой показана квазипарамагнитная щелевая зависимость с параметрами, приведёнными на рисунке

Результаты предыдущих экспериментов ЯМР и экспериментов по измерению намагниченности [2], а также результаты экспериментов по упругому рассеянию нейтронов [3] показали, что при $T_{c1} = 123 \text{ K}$ происходит магнитное упорядочение, а при $T_{c2} \approx 30 \text{ K}$ происходит изменение

магнитного состояния. Широкие спектры ЯМР ниже T_{cl} отражают тот факт, что в кристалле устанавливается непрерывное распределение направлений или величин магнитных моментов, характерное для спиральных, спин-модулированных структур или структур с замороженным беспорядком.

В данном сообщении обсуждаются результаты исследований LiCu_3O_3 методами ЭПР и ЭСР. Соотношение значений интенсивности ЭПР подтвердили, что при $T_{cl}=123$ К действительно упорядочивается только часть магнитных ионов, в то время как другая остаётся в парамагнитном состоянии. При $T < T_{cl}$ наблюдается единственная ветвь парамагнитного резонанса (см. рис. 1, правая панель), которая приобретает щель при $T_{c2} \approx 30$ К, постепенно увеличивающуюся с понижением температуры. Однако поведение наблюдаемой щели в спектрах магнитного резонанса указывает на то, что эта щель, по сути, является псевдощелью обменного характера, связанной с размерным эффектом на кластерах магнитных ионов в сильно разбавленных магнитных плоскостях.

Результаты опубликованы в [4]. Работа была поддержана грантом РНФ 25-12-68027 (эксперименты по измерению ЭСР).

Список литературы

- [1] S. J. Hibble, J. Kohler, A. Simon, and S. Paider, LiCu_2O_2 and LiCu_3O_3 : New mixed valent copper oxides, *J. Solid State Chem.* 88, 534 (1990).
- [2] A. A. Bush, S. K. Gotovko, V. Yu. Ivanov, V. I. Kozlov, E. G. Nikolaev, and L. E. Svistov, Magnetic properties of LiCu_3O_3 : A quasi-two-dimensional antiferromagnet on a depleted square lattice, *Phys. Rev. B* 109, 115151 (2024).
- [3] A. Consiglio et al., Electron Glass Phase with Resilient Zhang-Rice Singlets in LiCu_3O_3 , *Phys. Rev. Lett.* 132, 126502, Supplemental Material (2024).
- [4] S. K. Gotovko, A. G. Ivanova, P. S. Kudimkina, A. A. Bush, V. I. Kozlov, M. Hemmida, H.-A. Krug von Nidda, and L. E. Svistov: Low-frequency dynamics of LiCu_3O_3 : An antiferromagnet on a strongly depleted square lattice, *Phys. Rev. B* 111, 064430 (2025).

Четырехвершинная модель Поттса на слоистой треугольной решетке в магнитном поле

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

*Институт физики Дагестанского федерального
исследовательского центра РАН, Россия*

В последнее время большое внимание привлекает задача исследования влияния различных внешних факторов таких как температура и магнитное поле на топологию основного состояния спиновых систем [1–5]. В данной работе исследуется модель Поттса с $q = 4$ на слоистой треугольной решетке.

Гамильтониан данной модели имеет следующий вид:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \cos \theta_{i,j} - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle} \cos \theta_{i,k} - h \sum_{\langle i,j \rangle} \cos \theta_i,$$
$$\cos \theta_{i,j} = \begin{cases} 1, & \theta_{i,j} = 0, \\ -\frac{1}{3}, & \theta_{i,j} = 109.47^\circ, \end{cases}$$

где J_1 — обменное взаимодействие между ближайшими соседями, J_2 — обменное взаимодействие спинов в соседних слоях, $\theta_{i,j}$ — угол между спинами.

В ходе исследования реплично-обменным алгоритмом метода Монте-Карло были найдены основные состояния и получены температурные зависимости теплоемкости и намагнитченности для значений $J_1 = -1$, $J_2 = 1$, в диапазоне полей $0 \leq h \leq 10$. На зависимости намагнитченности (рис. 1) от магнитного поля в основном состоянии обнаружены 3 плато приходящиеся на интервалы $0.5 \leq h \leq 2.0$ — область 1, $3.5 \leq h \leq 5.5$ — область 2 и $h \geq 6.5$. Каждое плато соответствует различным типам магнитного упорядочения.

Магнитные упорядочения основного состояния приведены на рис. 2.

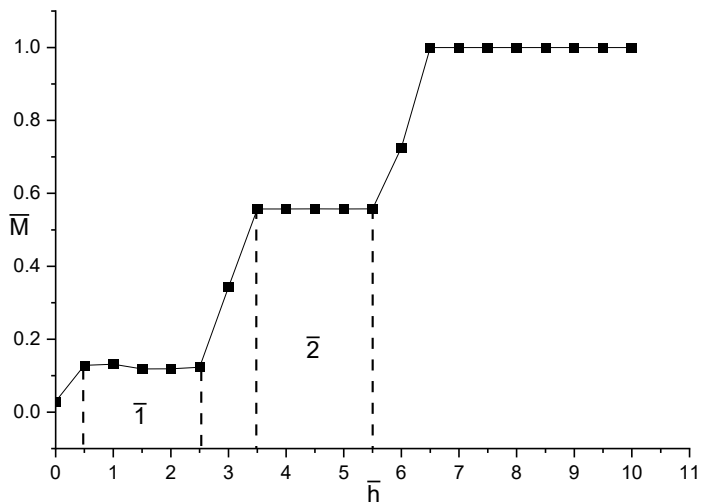


Рис. 1. Зависимость намагниченности $\bar{M}$ от магнитного поля $h/|J_1|$

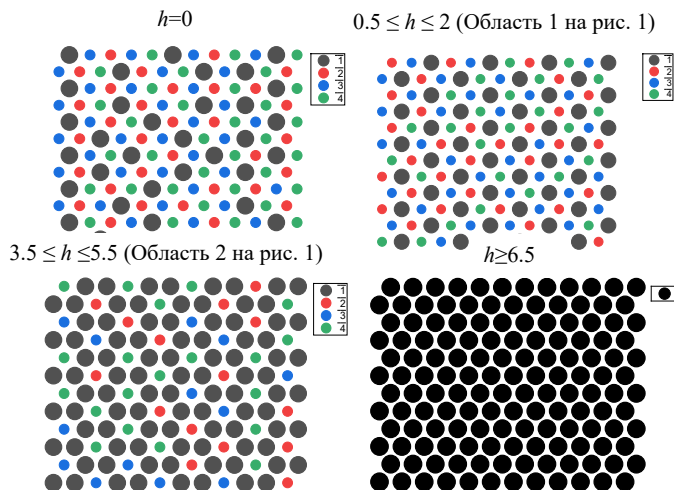


Рис. 2. Магнитные структуры основного состояния для разных значений магнитного поля

Черный цвет на рисунке 2 соответствует направлению спина направленной вдоль направления магнитного поля. Поведение системы при $h = 3$ и $h = 6$ требует более детального исследования. При данных значениях магнитного поля в системе нет какого-либо упорядочения и возможно наблюдаются фрустрации, о чем может свидетельствовать поведение теплоемкости, приведенное на рисунке 3.

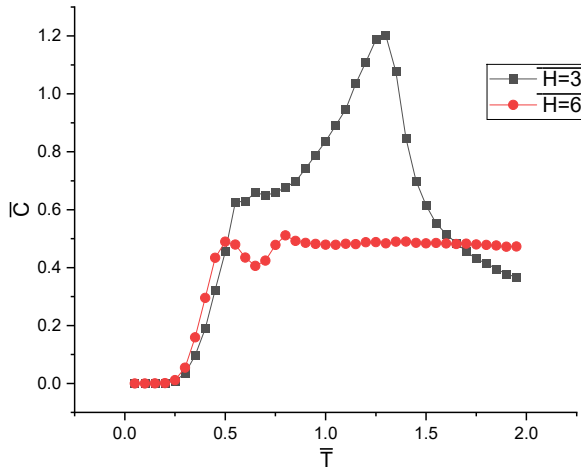


Рис. 3. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T/|J_I|$ для разных значений h

Список литературы

- [1] М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. К. Мазагаева. Письма в ЖЭТФ, Т. 114, вып. 11, С. 762 – 767. 2021.
- [2] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева, М.Р. Джамалудинов. Физика твердого тела, Т. 64, вып.2, 2022.
- [3] М. К. Бадиев, А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов. ЖЭТФ, Т. 161, вып. 5, С. 753–759, 2022.
- [4] J. Hagemeister, N. Romming, K. von Bergmann, et al. Nat Commun 6, 8455, 2015.
- [5] K.Binder. *J Stat Phys* 24, 69–86 1981.

Кристалл RuO_2 — альтермагнетик, антиферромагнетик или парамагнетик?

В. Е. Дмитриенко¹, В. А. Чижиков^{1,2}

¹*Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова*

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

²*МИРЭА — Российский технологический университет, г. Москва, Россия*

Тетрагональные кристаллы диоксида рутения RuO_2 долгое время считались обычными парамагнетиками без дальнего магнитного порядка, но потом в них при комнатной температуре был обнаружен антиферромагнетизм с помощью магнитной дифракции нейтронов [1] и резонансной рентгеновской дифракции рентгеновских лучей [2]. После этого появились десятки теоретических и экспериментальных работ по этому материалу, который был объявлен перспективным для будущей спинтроники и считался кандидатом в альтермагнетики. И работы по магнетизму RuO_2 продолжают активно появляться, хотя несколько тщательных исследований по дифракции нейтронов [3, 4] и мюонной спектроскопии [3, 5] не обнаружили в RuO_2 заметного магнетизма.

В настоящем докладе предлагается возможное разрешение этого противоречия. С помощью первопринципных расчётов (Quantum ESPRESSO) показано, что в RuO_2 может существовать неколлинеарный дальний магнитный порядок, симметрия которого совпадает с симметрией атомной структуры $P4_2/mnm$. Рассчитанное распределение намагниченности приведено на рисунке 1.

На рисунке показано распределение спиновой намагниченности в элементарной ячейке кристалла RuO_2 со структурой рутила в зеркальной плоскости, образованной направлениями $[110]$ и $[001]$. Намагниченность направлена перпендикулярно рисунку, а её локальная величина показана цветом (положительная от зелёной до красно-коричневой и отрицательная от зелёной до тёмно-синей). Атомы Ru находятся в углах прямоугольника и в центре, два атома кислорода по бокам от центрального атома Ru. Заметная доля намагниченности связана с атомами ки-

слорода, что не очень удивительно, так как, например, кристаллы твёрдого молекулярного кислорода магнитны. Но средняя намагниченность и рутения, и кислорода равна нулю (прямые линии соответствуют зеркальным плоскостям, которые меняют знак псевдовектора намагниченности).

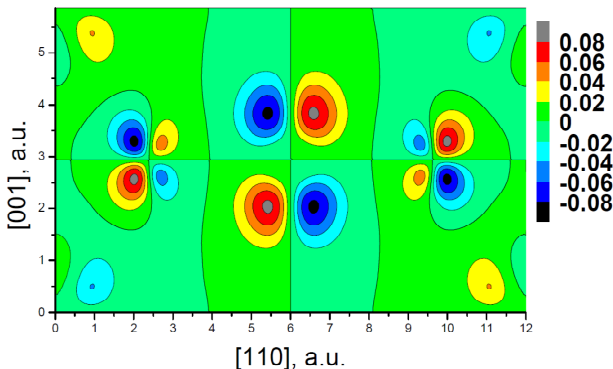


Рис. 1

Похожие магнитные структуры были нами ранее предложены для описания скрытого магнитного порядка в кристаллах URu_2Si_2 [6]. При таком упорядочении происходит только нарушение симметрии обращения времени, и, хотя усреднённые магнитные моменты элементарной ячейки и каждого атома рутения и кислорода равны нулю, в дифракции нейтронов должны наблюдаться чисто магнитные рефлексы $0kl$, $k+l = 2n+1$, подтверждающие такую экзотическую магнитную структуру.

Максимальный вклад в магнитные структурные амплитуды ($\sim 0.5 \mu_B$) получается по нашим расчётам для рефлексов 012 и 021, тогда как магнитный вклад в дифракцию нейтронов для такой структуры полностью отсутствует либо пренебрежимо мал как раз в тех рефлексах с высокой симметрией $h00$ и $00l$, которые были исследованы в [3,4], поэтому выводы этих работ об отсутствии магнетизма в RuO_2 нельзя считать решающими.

Список литературы

- [1] T. Berlijn et al. Itinerant antiferromagnetism in RuO_2 . Phys. Rev. Lett. **118**, 077201 (2017).
- [2] Z.H. Zhu et al. Anomalous antiferromagnetism in metallic RuO_2 determined by resonant x-ray scattering. Phys. Rev. Lett. **122**, 017202 (2019).
- [3] P. Keßler et al. Absence of magnetic order in RuO_2 : insights from μSR spectroscopy and neutron diffraction. npj Spintronics **2**, 50 (2024).
- [4] L. Kiefer et al. Crystal structure and absence of magnetic order in single-crystalline RuO_2 . J. Phys.: Condens. Matter **37**, 135801 (2025).
- [5] M. Hiraishi et al. Nonmagnetic ground state in RuO_2 revealed by muon spin rotation. Phys. Rev. Lett. **132**, 166702 (2024).
- [6] V.E. Dmitrienko and V.A. Chizhikov. Hidden order in URu_2Si_2 : Symmetry induced antitoroidal vortices. Phys. Rev. B **98**, 165118 (2018).

Эффект квантовой флуктуации на модель Китаева–Гейзенберга на треугольной решетке

К. К. Кешарпу^{1,*}, П. А. Максимов¹

¹Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова,
Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия

*E-mail: kesharpu@theor.jinr.ru

Явление «порядок через беспорядок», где флуктуация снимают случайное вырождение классического основного состояния, стабилизируя подмножество упорядоченных состояний, является важной темой в области фрустрированного магнетизма, где магнитные моменты подвержены конкурирующим взаимодействиям. Модель Китаева–Гейзенберга [1] является одной из таких моделей, которая не обладает требуемой симметрией, но основное состояние в значительной степени вырожденное.

дено [2, 3]. Это означает, что квантовые флуктуации необходимы для стабилизации упорядоченной основной фазы.

В связи с этим в этой работе исследуются магнитная фазовая диаграмма и спектр магнонов анизотропной модели Китаева–Гейзенберга с ферромагнитными взаимодействиями между ближайшими соседями, с использованием линейной и нелинейной теории спиновых волн. Обнаружено, что квантовые флуктуации несколько стабилизируют ферромагнитные фазы в разных диапазонах параметров. Более того, квантовые эффекты заметно выражены в магнитном спектре. Результаты подтверждаются численными расчетами DMRG.

Список литературы

- [1] Jackeli G., Khaliullin G. Mott Insulators in the Strong Spin-Orbit Coupling Limit: From Heisenberg to a Quantum Compass and Kitaev Models //Physical review letters. – 2009. – Vol. 102. – №. 1. – P. 017205.
- [2] Jackeli G., Avella A. Quantum order by disorder in the Kitaev model on a triangular lattice //Physical Review B. – 2015. – Vol. 92. – №. 18. – P. 184416.
- [3] Maksimov P. A. et al. Anisotropic-exchange magnets on a triangular lattice: spin waves, accidental degeneracies, and dual spin liquids //Physical Review X. – 2019. – Vol. 9. – №. 2. – C. 021017.

Jahn-Teller excitations in manganites and cuprates

N. N. Kovaleva^{1,*}, T. N. Fursova², K. I. Kugel³

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

²*Institute of Solid State Physics RAS, Chernogolovka, Russia*

³*Institute for Theoretical and Applied Electrodynamics RAS, Moscow, Russia*

**E-mail: kovalevann@lebedev.ru*

Magnetic compounds with Jahn-Teller (JT) ions, such as Cu^{2+} ($3d^9$) or Mn^{3+} ($3d^4$), display many outstanding properties, including HTSC in cuprates

and CMR effect in manganites. The physics of these compounds, possessing orbitally-degenerate electronic states is governed by the JT electron-lattice interaction [1–3] complemented by the entirely electronic superexchange (SE) interaction [4–6]. As a rule, the former interaction results in the high-temperature JT phase transition accompanied by removal of orbital degeneracy and structural symmetry breaking, associated with cooperative lattice distortions, while the latter paves the way for the long-range magnetic ordering, facilitating magnetic phase transitions, usually at much lower temperatures.

Such different temperature scales indicate that the JT interaction in an isolated octahedral complex CuO_6 or MnO_6 is much stronger than the SE coupling between them. In this case, the JT physics should determine the ground state of manganites and cuprates and show quantum rotor orbital-like excitations $\varepsilon = \alpha j^2$, which depend on the angular momentum quantum numbers j , where α is a parameter, characterizing the tunneling splitting. For example, the value of tunneling splitting $\alpha = 24 \text{ cm}^{-1}$ was estimated in manganites from our study of anomalous multi-order Raman scattering in LaMnO_3 [7]. The ground state of an isolated octahedral complex in the “Mexican hat” adiabatic potential is represented by the **E** symmetry level with the quantum number of angular momentum $j = \pm 1/2$. The excitations in the **E** state are characterized by the higher angular momentum quantum numbers, namely $j = -5/2, 7/2, -11/2, 13/2, \dots$ and $j = 5/2, -7/2, 11/2, -13/2, \dots$.

Earlier, we observed features originating from quantum rotor orbital excitations in the optical spectra of a host compound of CMR manganites LaMnO_3 using ellipsometry technique. These excitations appear as narrow sidebands accompanying the electron transition between the JT split orbitals at neighboring Mn^{3+} ions, displaying anomalous behavior at the Neel temperature T_N [6,8].

Here we report on the observation of the series of clearly pronounced in the IR spectra of manganites and cuprates quantum rotor orbital excitations with energies $\varepsilon = \alpha j^2$, quantized by the angular momentum numbers up to $j = -17/2$, on an example of their typical representatives, such as LaMnO_3 and La_2CuO_4 . Their role in the physics of CMR manganites and HTSC cuprates is discussed.

References

- [1] H. A. Jahn, E. Teller, Proc. Roy. Soc. London A **161**, 220 (1937).
- [2] U. Opik, M. H. L. Pryce, Proc. Roy. Soc. London A **238**, 425 (1957).
- [3] I. B. Bersuker, Sov. Phys. JETP **16**, 933 (1963).
- [4] K. I. Kugel, D. I. Khomskii, Sov. Phys. Usp. **25**, 231 (1982).
- [5] N. N. Kovaleva, A. V. Boris, et al., Phys. Rev. Lett. **93**, 147204 (2004).
- [6] N. N. Kovaleva, A. M. Oles, et al., Phys. Rev. B **81**, 235130 (2010).
- [7] N. N. Kovaleva, O. E. Kusmartseva, K. I. Kugel, et al., J. Phys.: Condens. Matter **25**, 155602 (2013).
- [8] N. N. Kovaleva, K. I. Kugel, et al., JETP **122**, 890 (2016).

Взаимодействие двух магнитных подрешеток в фазах $\text{RMn}_8(\text{Ga,Ge})_3$, где $\text{R} = \text{Sm, Gd-Dy}$

А. Н. Кульчу^{1,*}, Р. А. Халания¹, А. В. Миронов¹, С. М. Аксенов²,
А. В. Богач³, А. В. Шевельков¹

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

²*Кольский научный центр Российской академии наук, г. Апатиты, Россия.*

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

**E-mail: alex010396@bk.ru*

Фазы внедрения RT_8Ga_3 на основе кубической структуры RGa_3 (структурный тип AuCu_3) представляют уникальную возможность для исследования влияния гостевого атома (Т) как на кристаллическую структуру, так и на магнитное поведение интерметаллидов [1–3]. В данных фазах гостевые атомы переходных металлов могут заполнять до половины всех имеющихся октаэдрических пустот Ga_6 , что приводит к образованию тройных фаз RT_xGa_3 ($x < 0.25$), $\text{R}_4\text{TGa}_{12}$ и R_2TGa_6 [1–3].

В большинстве известных случаев переходной металл не вносят вклад в магнитное поведение фаз, и соединения являются антиферромагнетиками за счет упорядочения магнитных моментов атомов РЗЭ при низких температурах ($T_N = 10\text{--}20\text{ K}$) [1-3]. В ряду же $3d$ -металлов, известно, что только Mn может проявлять ферромагнитные свойства при относительно высоких температурах ($T_C = 150\text{--}225\text{ K}$) в $\text{Y}_4\text{Mn}_{1-x}\text{Ga}_{12-y}\text{Ge}_y$ [4]. Достаточно широкий диапазон температур Кюри можно добиться, не только варьируя содержания Mn в фазе, но и проводя частичное замещение Ga на Ge.

В данной работе в системах R-Mn-(Ga,Ge), где R = Sm, Gd-Dy были получены новые фазы RMn_xGa_3 (R = Tb, Dy), $\text{R}_4\text{Mn}_{1-x}\text{Ga}_{12-y}\text{Ge}_y$ (R = Gd-Dy) и $\text{Sm}_2\text{Mn}_{1-x}\text{Ga}_{6-y}\text{Ge}_y$, в которых было обнаружено взаимодействие двух магнитных подрешеток Mn и R, что как было упомянуто ранее редко встречается в семействе фаз RT_8Ga_3 . Согласно результатам рентгеноструктурного анализа структура фаз RMn_xGa_3 с малым содержанием Mn является производной от структуры перовскита, где Mn частично заселяет позицию В катиона. Частичное замещение Ga на Ge приводит к образованию сверхструктурных фаз с большим содержанием Mn $\text{R}_4\text{Mn}_{1-x}\text{Ga}_{12-y}\text{Ge}_y$ (R = Sm, Gd-Dy; $x = 0\text{--}0.25$, $y = 1.0\text{--}3.3$) структурного типа $\text{Y}_4\text{PdGa}_{12}$. В случае R = Sm добавление Ge в исходную смесь способствует получению еще одной сверхструктурной фазы с еще большим содержанием Mn $\text{Sm}_2\text{Mn}_{1-x}\text{Ga}_{6-y}\text{Ge}_y$ ($x = 0.1\text{--}0.3$, $y = 0.6\text{--}1.0$).

Измерения магнитных свойств показали, что все полученные соединения содержат две взаимодействующие магнитоактивные подрешетки: R и Mn. Подрешетка Mn упорядочивается ферромагнитно, причем наблюдается тенденция к увеличению T_C при переходе от неупорядоченных фаз с малым содержанием Mn к сверхструктурным фазам $\text{R}_4\text{Mn}_{1-x}\text{Ga}_{12-y}\text{Ge}_y$ и $\text{Sm}_2\text{Mn}_{1-x}\text{Ga}_{6-y}\text{Ge}_y$. В фазах с R = Gd-Dy подрешетка Mn заметно влияет на подрешетку R, вызывая ее частичное ферромагнитное упорядочение ниже T_C , а при низких температурах происходит антиферромагнитное упорядочение оставшейся части магнитного момента R. На примере фазы $\text{Gd}_4\text{MnGa}_{12-y}\text{Ge}_y$ было также показано, что магнитные характеристики (T_N , T_C , $\mu_{\text{нас}}$ и μ_0H_C) чувствительны к содер-

жанию Ge в фазе. Его увеличение приводит к незначительному снижению T_N и резкому падению T_C , а магнитный момент насыщения ($\mu_{\text{нас}}$) и коэрцитивная сила ($\mu_0 H_C$) имеют обратные друг другу зависимости с максимумом и минимумом, соответственно, при $y = 1.8$.

В фазах с Sm обе взаимодействующие подрешетки (Mn и Sm) демонстрируют ферромагнитный тип упорядочения; причем под воздействием Mn подрешетка Sm упорядочивается при достаточно высоких для нее температурах, и обе температуры Кюри значительно увеличиваются при переходе от $\text{Sm}_4\text{MnGa}_{8.6}\text{Ge}_{3.4}$ ($T_{C1} = 150$ К и $T_{C2} = 55$ К) к фазе $\text{Sm}_2\text{Mn}_{0.75}\text{Ga}_{5.1}\text{Ge}_{0.9}$ ($T_{C1} = 320$ К и $T_{C2} = 280$ К). Для $\text{Sm}_2\text{Mn}_{0.75}\text{Ga}_{5.1}\text{Ge}_{0.9}$, демонстрирующей ферромагнитные свойства при комнатной температуре, были проведены исследования магнетокалорических свойств. Были рассчитаны значения изменения магнитной энтропии (ΔS_M), максимальное значение которой составило ~ 0.3 Дж·кг⁻¹К⁻¹ при $T = 300$ К для магнитного поля $\mu_0 H = 5$ Тл. Также была рассчитана относительная охлаждающая способность (RCP), которая составила около 36 Дж·кг⁻¹.

Работа выполнена при поддержки Российского научного фонда, проект № 22-13-00006.

Список литературы

- [1] K. A. Benavides, L. J. Treadwell, G. D. Campbell, R. N. McDougald, G. T. McCandless, J. Y., *Polyhedron*, 114(2016), 56–61.
- [2] B. L. Drake, F. Grandjean, M. J. Kangas, E. K. Okudzetso, A. B. Karki, M. T. Sougrati, D. P. Young, G. J. Long, J. Y. Chan., *Inorg. Chem.*, 42(2009), 445–456.
- [3] B. R. Slater, H. Bie, S. S. Stoyko, E. D. Bauer. Thompson, J. D.; Mar, A., *J. Solid State Chem.*, 196 (2012), 409–415.
- [4] Francisco M. C., Malliakas C. D., Piccoli P. M. B., *J. American Chem. Soc.* 132(2010), 8998-9006.

Электронная структура, орбитально-селективные перенормировки, и магнитные корреляции в фазах Раддлсдена–Поппера $\text{La}_{n+1}\text{Ni}_n\text{O}_{3n+1}$ $n=2$ и 3 под давлением

И. В. Леонов

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

Открытие высокотемпературной сверхпроводимости в соединениях никелатов — в дырочнодопированных бесконечно-слоистых пленках RNiO_2 ($R = \text{Pr, La, Sr..}$) [1,2] и в моно- и поликристаллических образцах слоистых структурных фаз Раддлсдена–Поппера $\text{La}_{n+1}\text{Ni}_n\text{O}_{3n+1}$ с $n = 2, 3$ [3] вызвало огромный всплеск интереса к свойствам данных соединений. В данном докладе будут представлены обзор экспериментальных и теоретических исследований по данной тематике. В частности, будут представлены результаты численных расчетов в рамках метода DFT+DMFT (DMFT — теория динамического среднего поля) электронного строения, поверхности Ферми и магнитных свойств парамагнитных фаз данных соединений [4-6]. Для обоих случаев была получена существенная орбитально-зависимая перенормировка $\text{Ni } x^2-y^2$ и $3z^2-r^2$ состояний, связанная с орбитально-селективной локализацией $\text{Ni } 3d$ состояний. Расчет статической магнитной восприимчивости $\chi(\mathbf{q})$ в DFT+DMFT свидетельствует о конкуренции различных магнитных состояний. Результаты расчетов показывают возможное формирование волн зарядовой и спиновой плотности в нормальных фазах данных систем. Высказано предположение о важности спиновых флуктуаций для объяснения сверхпроводимости в данном классе соединениях.

Работа выполнена в рамках гос. задания Минобрнауки РФ (тема «Квант», № 122021000038-7).

Список литературы

- [1] Li D., Lee K., Wang B. Y., Osada M., Crossley S. *et al.*, Nature (London) **572**, 624 (2019).

- [2] Osada M., Wang B. Y., Goodge B. H., Harvey S. P., Lee K., Li D., Kourkoutis L. F., Hwang H. Y., Adv. Mater. **33**, 2104083 (2021).
- [3] Sun H., Huo M., Hu X., Li J., Liu Z *et al.*, Nature **621**, 493 (2023).
- [4] Leonov I., Skornyakov S. L., Savrasov S. Y., Phys. Rev. B **101**, 241108(R) (2020).
- [5] Slobodchikov K. G., Leonov I. V., Phys. Rev. B **106**, 165110 (2022).
- [6] Shilenko D. A., Leonov I. V., Phys. Rev. B **108**, 125105 (2023).

История $\text{BaCo}_2(\text{AsO}_4)_2$: 50 лет от БКТ до Китаева

П. А. Максимов^{1,2}, S. Jiang^{3,4}, L.P. Regnault^{5,6}, А.Л. Чернышев³

¹*Лаборатория теоретической физики им. Боголюбова,
Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия*

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

³*Department of Physics and Astronomy, University of California,
Irvine, California 92697, USA*

⁴*Stanford Institute for Materials and Energy Sciences, SLAC National Accelerator
Laboratory and Stanford University, Menlo Park, California 94025, USA*

⁵*Institut Laue Langevin, 71 avenue des Martyrs, CS 20156,
38042 Grenoble cedex 9, France*

⁶*Laboratoire de Magnétisme et Diffraction Neutronique,
CEA-Grenoble, 17 rue des Martyrs, 38054 Grenoble cedex 9, France*

Используя неупругое нейтронное рассеяние в поляризованной фазе и спин-волновую теорию, мы смогли определить обменные параметры $\text{BaCo}_2(\text{AsO}_4)_2$. Этот материал содержит гексагональную решетку ионов кобальта со спином $\frac{1}{2}$ и является кандидатом для реализации модели Китаева, которая имеет точное решение в качестве спиновой жидкости [1, 2]. С помощью численных расчетов методом DMRG для полученного набора параметров было подтверждено также основное состояние материала с уникальной конфигурацией «двойной зигзаг» [3].

Список литературы

- [1] A. Kitaev, Ann. Phys. 321, 2 (2006), january Special Issue.
- [2] G. Jackeli and G. Khaliullin, Phys. Rev. Lett. 102, 017205 (2009).
- [3] L.-P. Regnault, C. Boullier, and J. E. Lorenzo, Polarized-neutron investigation of magnetic ordering and spin dynamics in BaCo₂ (AsO₄)₂ frustrated honeycomb-lattice magnet, Heliyon 4, e00507 (2018).

Ориентация электронного спина током в квантовой точке: эффект Кондо, спиновый эффект Нернста

В. Н. Манцевич¹, Д. С. Смирнов^{2,*}

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

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

*E-mail: vmantsev@gmail.com

Спины локализованных носителей заряда можно эффективно ориентировать в магнитных структурах при приложении сильных магнитных полей, либо в результате внешнего воздействия оптическими методами. Дополнительную возможность ориентации спинов в результате протекания электрического тока в немагнитных структурах открывает наличие спин-орбитального взаимодействия [1]. При этом для свободных носителей заряда степень спиновой поляризации не превышает нескольких процентов [2]. Малость индуцированной током спиновой поляризации в наиболее распространённых структурах с квантовыми ямами обуславливается относительной слабостью спин-орбитального взаимодействия и малой величиной соотношения скорости дрейфа и скорости Ферми.

Нами продемонстрирована возможность получения 100 % спиновой поляризации в квантовой точке, туннельно связанной с квантовым

проводом, по которому течет ток [3]. Накопление спина в квантовой точке возникает из-за спин-зависимого туннелирования между точкой и проводом, вызванного спин-орбитальным взаимодействием. В работе показано, что многочастичные корреляции между квантовой точкой и квантовым проводом могут увеличить спиновую поляризацию в квантовой точке при низких температурах почти на два порядка [3]. Увеличение спиновой поляризации связано с образованием пика Кондо в плотности состояний и спиновой нестабильностью из-за сильного кулоновского взаимодействия. Предложенный эффект может быть реализован в современных наноструктурах с двумерным электронным или дырочным газом [4] и использоваться для эффективного манипулирования локализованными электронными спинами в квантовых точках.

Также показано, что в рассматриваемой структуре квантовая точка – квантовый провод спин-орбитальное взаимодействие может приводить к спиновому эффекту Нернста [5]. Тепловой поток вдоль квантового провода создает спиновую поляризацию локализованного в квантовой точке электрона из-за спин-зависимого туннелирования в отсутствии магнитного поля. Являясь немонотонной функцией энергии Ферми и температуры, спиновая поляризация достигает наибольших значений, когда энергия Ферми и температура становятся по порядку величины сравнимы со скоростью туннелирования между квантовой точкой и квантовым проводом.

Список литературы

- [1] Е. Л. Ивченко и Г. Е. Пикус // Письма в ЖЭТФ **27**, 640 (1978).
- [2] S. D. Ganichev, M. Trushin and J. Schliemann, Book «Spin Transport and Magnetism» (2012).
- [3] V. N. Mantsevich and D. S. Smirnov // Phys. Rev. B **108**, 035409 (2023).
- [4] L. W. Smith, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **128**, 027701 (2022).
- [5] V. N. Mantsevich and D. S. Smirnov, Phys. Rev. B **110**, 035306 (2024).

Электронная и магнитная структура никелатов RNiO_3 за пределами модели Хаббарда и теории функционала плотности

А. С. Москвин^{1,2}

¹Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

²Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Переход изолятор–квази-металл (bad metal), наблюдаемый в ортоникелатах RNiO_3 (R = редкая земля или иттрий Y), считается каноническим примером перехода Мотта [1], традиционно описываемого в рамках U - t -модели Хаббарда и теории функционала плотности (DFT). Однако реальная диэлектрическая фаза этих сильнокоррелированных ян-теллеровских магнетиков является результатом «анти-ян-теллеровского» зарядового диспропорционирования (CD) с образованием системы «больших» (Ni_L) спин-триплетных ($S = 1$) электронных NiO_6^{10-} и «малых» (Ni_S) бесспиновых ($S = 0$) дырочных NiO_6^{8-} кластерных центров, эквивалентной системе эффективных спин-триплетных композитных бозонов, движущихся в немагнитной решетке [2–4], которая не может быть адекватно описана в рамках модели Хаббарда и DFT-методов (LDA, LDA+U,...) [3, 4]. Высокотемпературная квазиметаллическая NO фаза никелатов представляет собой неупорядоченную систему смешанной валентности, результат своеобразного «плавления» CD-фазы. Для описания электронной и магнитной структуры никелатов нами предложен подход, типичный для относительно простых спин-магнитных систем с единственной спиновой степенью свободы, в которых выделяется локальный (on-site) спиновый мультиплет (например секстет, соответствующий $S = 5/2$ в ферритах), на основе которого строится эффективный спин-гамильтониан. Локальный «рабочий мультиплет» для ян-теллеровских магнетиков никелатов, неустойчивых относительно переноса заряда, включает триплет зарядовых центров $\text{NiO}_6^{8-,9-,10-}$, который с учетом орби-

тальной и спиновой структуры этих центров, преобразуется в зарядово-орбитально-спиновый октет [3, 4].

Последовательно учитывая зарядовую степень свободы, локальные (U) и нелокальные (V) корреляции, двухчастичный (бозонный) транспорт (t_b), ферромагнитный бозонный двойной обмен (double exchange), сверхобменное спин-спиновое взаимодействие в рамках типичного для описания спиновых систем приближения эффективного поля, мы разрабатываем новую минимальную U - V - t_b - J -модель электронной и магнитной структуры никелатов. Даже простейший атомный предел модели (U - V -модель) с учетом уменьшения параметра нелокальных корреляций при переходе от LuNiO_3 к LaNiO_3 позволяет дать разумное объяснение экспериментальной зависимости температуры перехода квази-металл – изолятор (T_{MIT}) в ряду никелатов [4, 5]. Диэлектрическая фаза в этой модели соответствует классическому диспропорционированию (CO-фаза) с зарядовым упорядочением G-типа спин-триплетных электронных и бесспиновых дырочных центров и «выключением» потенциально сильного np -сверхобмена ближайших соседей Ni^{2+} - Ni^{2+} (Ni_I - Ni_I). В отличие от наблюдаемого в никелатах низкотемпературного неколлинеарного антиферромагнитного упорядочения с $\mathbf{k} = (1/2, 0, 1/2)$ сверхобмен вторых и третьих соседей в атомном пределе может определять только коллинеарный вариант такой необычной магнитной структуры.

Учет парного переноса, или кинетической энергии эффективных композитных бозонов (U - V - t_b -модель) приводит к формированию низкотемпературной квантовой ферромагнитной CDq-фазы с переносом зарядовой и спиновой плотности между электронными и дырочными центрами, «неопределенной валентностью» и значением спина для центров NiO_6 . В рамках этой модели фазовый переход изолятор – квази-металл в никелатах реализуется путем двух последовательных переходов первого рода $\text{CDq} \rightarrow \text{CO}$ и $\text{CO} \rightarrow \text{NO}$ с развитыми эффектами фазового расслоения. Модельная T_{MIT} -R-фазовая диаграмма хорошо воспроизводит основные черты экспериментальной фазовой диаграммы для ортоникелатов RNiO_3 [4], что позволило дать надежную оценку параметров модели. Необычная неколлинеарная антиферромагнитная структура ортоникелатов

с $\mathbf{k} = (1/2, 0, 1/2)$ и «ортогональной» ориентацией магнитных моментов Ni_L - и Ni_S -центров определяется в рамках более сложной U - V - t_b - J -модели с учетом как сверхобменного ppn - и $pppp$ -взаимодействия Ni_L -центров, так и биквадратичного обмена Ni_L - и Ni_S -центров.

Развиваемая модель позволяет дать оптимальное описание влияния электрон-решеточного взаимодействия с активной в никелатах полно-симметричной «дыхательной» (breathing) модой смещений ионов кислорода, а таким образом и эффектов давления, и изотоп-эффекта. Уникальной особенностью квантовой CDq-фазы никелатов является возможность формирования как волн спин-зарядовой плотности, так и необычной спин-триплетной сверхпроводимости.

Работа выполнена при поддержке проекта FEUZ-2023-0017 Министерства образования и науки Российской Федерации.

Список литературы

- [1] M. Imada et al., *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1039 (1998).
- [2] A. Moskvina, *Magnetochemistry* **9**, 224 (2023).
- [3] А.С. Москвин, *ЖЭТФ* **167**, 412-429 (2025).
- [4] А.С. Москвин, *Письма в ЖЭТФ* **121**, 431-440 (2025).
- [5] D.J. Gawrylyuk et al., *Phys. Rev. B.* **100**, 205137 (2019).

Магнетизм в монослойных электренах XF (X = Ca, Sr, Ba)

Д. Ю. Новосёлов¹

¹*Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН,
ул. С. Ковалевской, 18, г. Екатеринбург, Россия*

Магнетизм упорядоченных электронов, не связанных с атомами, остаётся фундаментальной и актуальной задачей со времён предсказания вигнеровского кристалла [1] электронной системы, в которой кулоновское отталкивание между электронами преобладает над их кинетической энергией, что приводит к образованию пространственно упорядоченной структуры с периодическим расположением электронов. Появление

класса материалов, электридов, с квантово-ограниченными электронами, отделёнными от исходных атомов и локализованными в кристаллических пустотах (Interstitial Anionic Electrons — IAE) [2–6], создало прекрасную платформу для изучения явлений, связанных с магнетизмом почти свободных электронов. В данной работе с помощью *ab initio* подхода изучается возможность перехода межузельных электронов из немагнитного в магнитное состояние в монослойных электренах, спроектированных на основе двумерных электридов CaF, SrF и BaF.

Полученные результаты свидетельствуют о формировании квазидвумерной ферромагнитной фазы в монослойном электрена BaF (рис. 1), в то время как в изоэлектронных и изоструктурных SrF и CaF-электренах такого явления не обнаруживается.

Количественный анализ обменных взаимодействий, выполненный методом Лихтенштейна [7], позволил определить значения параметров обменного взаимодействия в монослое BaF. Обмен в плоскости *ab* вдоль ортогональных осей составил 15.4 мэВ (178 K), диагональный обмен в плоскости *ab* 9.7 мэВ (112 K), обмен между электридными состояниями на разных сторонах слоя –2.9 мэВ (–34 K). Значение момента каждого межузельного квази-атома составило около 0.7 магнетона Бора.

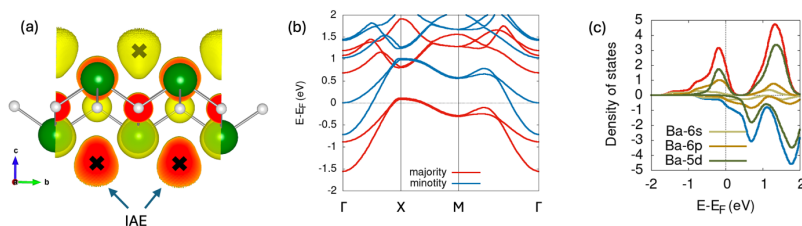


Рис. 1. (a) Кристаллическая структура монослоя BaF с изоповерхностью функции локализации электронов ELF=0.85 (в жёлтом цвете). Зелёные сферы соответствуют атомам Ва, светло-серые – атомам Ф. Крестиком обозначены центры локализации межузельной зарядовой плотности. (b) Зонная структура ФМ фазы монослоя BaF для двух направления спина. (c) Полная и парциальная плотности состояний электрена BaF

Для оценки электронных корреляций в системе было вычислено значение параметра Хаббарда U методом Constrained Random-Phase Approximation (CRPA) [8,9]. Полученное значение $U = 2.9$ эВ оказалось сопоставимым с шириной электридной зоны, что указывает на значимую роль электронных корреляций в исследуемой системе.

Для определения характера наблюдаемого магнетизма с учётом многочастичного межэлектронного взаимодействия был использован метод теории динамического среднего поля (DMFT) [10, 11]. Поведение спин-спиновых корреляционных функций показало, что магнетизм в электроне BaF характеризуется высокой степенью локализации межузельных магнитных моментов.

Таким образом, монослойный электрен BaF представляет собой уникальный пример коррелированной электронной фазы, в которой возникает внутренний магнетизм электронной подсистемы, слабо связанной с остальной частью электронной структуры материала. Обнаруженные особенности открывают новые возможности для проектирования низкоразмерных магнитных систем на основе электридов.

Автор работы благодарит за поддержку Российский научный фонд (грант РНФ № 25-23-000341).

Список литературы

- [1] E. Wigner, Phys. Rev. 46, 1002 (1934).
- [2] J. L. Dye, Accounts of Chemical Research, 42(10) (2009) 1564–1572.
- [3] P. P. Edwards, Science, 333 (2011) 49–50.
- [4] C. Liu et al., Journal of Materials Chemistry C, 8(31) (2020) 10551–10567.
- [5] D. Y. Novoselov et al., Physical Chemistry Chemical Physics, 25 (2023) 30960–30965
- [6] D. Y. Novoselov et al., The Journal of Physical Chemistry Letters, 13 (2022) 7155–7160.
- [7] A. Liechtenstein et al., Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 67, 65–74 (1987).
- [8] M. Springer and F. Aryasetiawan, Physical Review B, 57 (1998) 4364–4368.
- [9] T. Kotani, Journal of Physics: Condensed Matter, 12 (2000) 2413–2422.
- [10] K. Held et al., Phys. Status Solidi B 243 (2006) 2599–2631.
- [11] <http://www.amulet-code.org>.

Нейтронный магнитный формфактор в исследованиях f-электронной неустойчивости

П. С. Савченков^{1,2}, В. Н. Лазуков¹, П. А. Алексеев^{1,2}

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

²НИЯУ «МИФИ», г. Москва, Россия

*E-mail: savch92@gmail.com

Нейтронные исследования в целом (дифракция и спектроскопия) являются весьма результативным методом исследования, применительно к системам с сильными электронными корреляциями. Это обусловлено, в частности, эффективным взаимодействием нейтронов с магнитной подсистемой исследуемых объектов. Магнитный формфактор (МФФ) входит во все измеряемые величины, содержащие зависимость от передачи импульса в процессе рассеяния нейтронов. Он определяет характер этой зависимости, являясь результатом интерференции нейтронной волны на пространственном распределении орбитального и спинового магнитных моментов незаполненных (f- или d-) электронных оболочек.

В докладе обсуждаются основные результаты измерений нейтронных магнитных формфакторов для редкоземельных систем с сильными электронными корреляциями. Показано, что в ряде случаев, за счет использования методов нейтронной спектроскопии, удастся получить уникальную, с точки зрения развития адекватных физических представлений, информацию о состоянии валентной неустойчивости в f-электронной системе. Детально обсуждаются исследования магнитного формфактора для промежуточновалентных систем на основе Sm (SmB₆, SmS) и Eu (типа EuCu₂Si₂) и их значение для развития реалистичных представлений о природе промежуточновалентного состояния.

Список литературы

- [1] Алексеев П. А., Лазуков В. Н., Савченков П. С. Нейтронный магнитный формфактор в исследованиях f-электронной неустойчивости // УФН, 2025, принята к публикации.

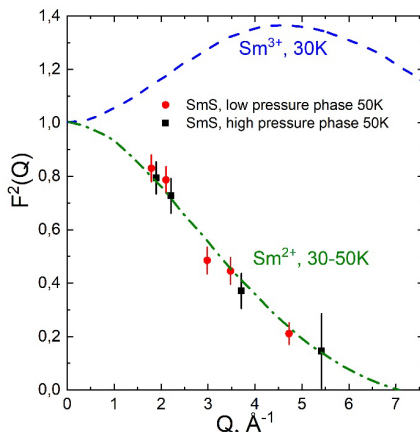


Рис. 1. Наведенный магнитный формфактор $F^2(Q)$ Sm, измеренный в дифракционном нейтронном эксперименте с поляризационным анализом при $T = 30$ К. Красные кружки отвечают давлению $P = 0$ и валентности Sm $\nu = 2.0$, чёрные квадраты $P = 0.6$ ГПа, $\nu \sim 2.5$. Линии соответствуют расчетным значениям МФФ для Sm^{2+} (штрих-пунктир) и Sm^{3+} (пунктир). Несмотря на значительную нецелочисленность валентности Sm в случае $P = 0.6$ ГПа вклад от трёхвалентного Sm в МФФ отсутствует

Макромагнитные свойства и теплоемкость Лавес фазы NdRh_2

Д. А. Саламатин¹, В. Н. Краснорусский¹, А. В. Семенов^{2,1},
М. А. Анисимов^{2,1}, 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

С помощью синтеза при высоком давлении и температуре нами были получены однофазные образцы соединения NdRh_2 , которое кристаллизовалось в кубической фазе Лавеса (C15).

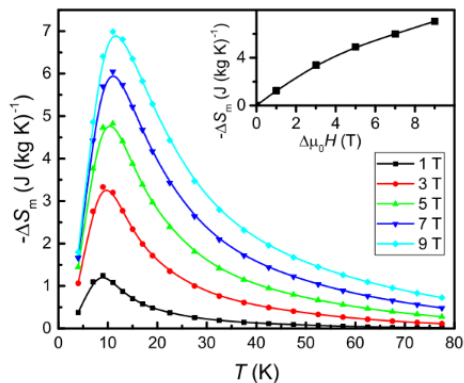


Рис. 1. Температурная зависимость магнитокалорического эффекта для соединения NdRh₂ при различном изменении внешнего магнитного поля (от 0 Т). Вставка: максимум магнитокалорического эффекта

С помощью измерений изотермической намагниченности и магнитной восприимчивости показано, что магнитные свойства полученного соединения определяются не только магнитной подрешёткой редкоземельных ионов Nd, но имеется спиновый вклад от $4d$ электронов Rh. Это приводит к сложному магнетизму со спиновыми флуктуациями ниже температуры 50 К и магнетизмом Nd подрешётки ниже 7 К. Была определена величина магнитокалорического эффекта (см. рис. 1) при изменении внешнего магнитного поля в диапазоне 0-9 Т, которая составила $\Delta S_m = -7.0 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$ [1].

На магнитной части теплоемкости обнаружен горб, который был связан с эффектами кристаллического поля, что позволило определить структуру расщепления кристаллического поля для терма $^4I_{9/2}$ иона Nd³⁺ [1].

Исследование было выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-12-00008, <https://rscf.ru/project/22-12-00008/>.

Список литературы

- [1] V.N. Krasnorussky, A.V. Semeno, M.A. Anisimov, D.A. Salamatin *et al.* J. Magn. Magn. Mat. **610**, 172480 (2024). DOI: 10.1016/j.jmmm.2024.172480

Влияние высокого давления на магнитные переходы в соединениях $\text{Mn}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Si}$ с кубической нецентросимметричной структурой B20

В. А. Сидоров¹, В. Н. Краснорусский¹, А. В. Боков¹, Д. О. Сканченко^{1,2},
А. В. Алтынбаев^{1,2,3}, И. Алферьев³, Д. А. Саламатин¹, З. Н. Волкова^{1,4},
А. П. Геращенко^{1,4}, А. В. Семенов^{1,5}, В. В. Бражкин¹, А. В. Цвященко¹

¹*Институт физики высоких давлений РАН, Россия*

²*Петербургский институт ядерной физики*

НИИ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

³*Санкт-Петербургский государственный университет,*

г. Санкт-Петербург, Россия

⁴*Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН,*

г. Екатеринбург, Россия

⁵*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, г. Москва, Россия*

Соединение MnSi кубической нецентросимметричной структурой B20 в течение многих лет является объектом многочисленных исследований и проявляет массу интересных свойств. Около $T_c \sim 30$ К в нём происходит магнитный переход с образованием геликоидальной магнитной структуры. В определённой области магнитных полей и температур геликоид трансформируется в скирмионную магнитную структуру (А-фаза). Допирование 3d-металлами Co, Fe и высокое давление приводят к быстрому подавлению геликоидальной фазы. При высоком давлении 8 ГПа и высокой температуре были синтезированы образцы $\text{Mn}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Si}$ вплоть до $x = 0.95$, которые имеют кубическую структуру B20 и изучены их транспортные и магнитные свойства, а также проведены измерения спектров ЯМР и малоуглового рассеяния нейтронов [1]. Было обнаружено, что замещение Mn ионами Rh с 4d незаполненной зоной, в отличие от допирования 3d и/или 5d металлами, приводит к образованию высокоспиновых состояний ионов марганца с температурой

магнитного упорядочения $T_m \sim 200\text{--}250\text{ К}$ для составов начиная с $x \geq 0.025$. Данная высокотемпературное состояние характеризуется наличием высокочастотного ЯМР сигнала на ядрах ^{55}Mn с частотами ~ 180 и 310 МГц , что соответствует магнитному моменту ~ 1.3 и $2.2\text{ }\mu_B/\text{Mn}$. Отметим, что этот высокочастотный сигнал является дополнительным к основному низкочастотному, характерному для геликоидальной структуры и наблюдавшемуся прежде в MnSi . Для состава $x = 0.0125$ он виден при $\sim 50\text{ МГц}$, что соответствует $\sim 0.31\text{ }\mu_B/\text{Mn}$. Высокое гидростатическое давление до 5.5 ГПа при температурах $2\text{--}300\text{ К}$ с использованием миниатюрной камеры тороид было применено для исследования магнитной восприимчивости соединений с содержанием родия $x = 0.02, 0.025, 0.15, 0.5$ и 0.7 . По данным магнитных измерений были построены магнитные $P\text{--}T$ диаграммы этих соединений. Было обнаружено, что магнитная геликоидальная фаза в допированном родием MnSi обладает на $P\text{--}T$ диаграмме значительно большей областью стабильности, чем эта фаза в MnSi . Высокотемпературная магнитная фаза обладает большой областью стабильности, вплоть до $5\text{--}6\text{ ГПа}$ для составов $x = 0.15$ и 0.5 .

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ 22-12-00008.

Список литературы

- [1] V. N. Krasnorussky, A. V. Bokov, Z. N. Volkova, A. P. Gerashchenko, N. M. Chtchelkatchev, M. V. Magnitskaya, D. O. Skanchenko, E. V. Altynbaev, I. V. Alferev, D. A. Salamatina, V. A. Sidorov, A. V. Semenov, V. V. Brazhkin, and A. V. Tsvyashchenko. Disorder-induced coexistence of itinerant low-spin and localized high-spin states of Mn in Rh-doped MnSi // *Phys. Rev. Mater.* **8**, 124405 (2024).
- [2] A. E. Petrova, V. A. Sidorov, S. M. Stishov. High-pressure helium gas apparatus and hydrostatic toroid cell for low-temperatures applications // *Physica B*, **359-361**, 1463 (2005).

Двухчастичное поглощение в спин-жидкостной и упорядоченной фазах цепочечного антиферромагнетика Cs_2CoCl_4

А. И. Смирнов*, Т. А. Солдатов

Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН

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

Магнитная структура кристаллов Cs_2CoCl_4 образована цепочками ионов Co^{2+} ($S=3/2$) в слоистой треугольной структуре. Энергия обменного взаимодействия вдоль цепочки составляет 0.74 К, а междоцепочечный обмен в 20 раз меньше [1]. Одноионная анизотропия ионов Co^{2+} имеет энергию 7 К, вследствие этого верхний спиновый дублет лежит значительно выше нижнего. Поэтому при низких температурах можно рассматривать спиновую систему как совокупность цепочек псевдоспинов $s = 1/2$ с анизотропным обменом [2]. Модель сильно анизотропной цепочки спинов $S = 1/2$ (XXZ цепочка) представляет самостоятельный интерес как макроскопическая квантовая система, промежуточная между квантово-разупорядоченной гейзенберговской цепочкой и изинговской цепочкой, имеющей упорядоченное основное состояние. XXZ-цепочка в нулевом поле имеет основное состояние в виде квантово-критической спиновой жидкости, аналогично гейзенберговской цепочке, однако в магнитном поле она демонстрирует дальний антиферромагнитный порядок с сильно редуцированной упорядоченной компонентой спина. В полях несколько ниже насыщения теория предсказывает возврат спин-жидкостной фазы [3].

Реальные кристаллы Cs_2CoCl_4 демонстрируют несколько температурных режимов — при понижении температуры ниже 1 К возникают внутрицепочечные корреляции, но цепочки остаются независимыми друг от друга. При дальнейшем понижении температуры ниже 0.2 К наступает трехмерное упорядочение под действием слабого междоцепочечного взаимодействия. Как в фазе независимых коррелированных цепочек, так

и в упорядоченном состоянии, спектр возбуждений близок к теоретическому спектру изолированных XXZ-цепочек [3]. В упорядоченной фазе наряду с основной модой возбуждений XXZ-цепочки наблюдаются слабые спутники [4], в соответствии с переходом в многоподрешеточное упорядоченное состояние [1].

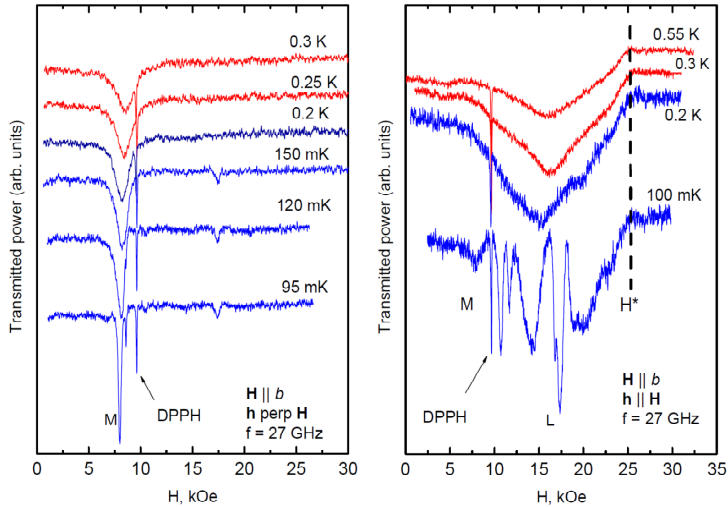


Рис. 1. Записи линий

В данной работе мы обнаруживаем поглощение электромагнитных волн микроволнового диапазона, обусловленное расходом одного фотона на две квазичастицы XXZ-цепочек. Обнаруженный эффект двухчастичного поглощения дает независимое подтверждение существования квазичастиц «спионного» типа в антиферромагнитных XXZ-цепочках спинов $S = 1/2$. В эксперименте двухчастичное поглощение проявляет себя в виде широкой полосы поглощения электромагнитного излучения с поляризацией, параллельной внешнему магнитному полю. Рис. 1 показывает кардинальное отличие поглощения в режимах с параллельной и перпендикулярной поляризациями. На левой панели изображены линии поглощения при перпендикулярной поляризации, типичной для обычного

электронного спинового резонанса. Видно, что при переходе от режима коррелированных ХХЗ-цепочек к упорядоченной фазе основная линия остается на том же значении магнитного поля, испытывая сильное сужение, сопровождающееся появлением слабых сателлитов. При параллельной ориентации микроволнового поля резонансные линии практически не видны (правая панель), однако отчетливо проявляется широкая полоса поглощения, развивающаяся в температурной области возникновения корреляций в ХХЗ-цепочках, и сохраняющаяся в низкотемпературной упорядоченной фазе.

Правая граница области полей, в которой заметно это поглощение, обозначена на рис. 1 как H^* , а ее зависимость от частоты изображена на рис. 2 вместе с частотно-полевой зависимостью основной моды M магнитного резонанса. Для проверки двухчастичной природы наблюдаемой

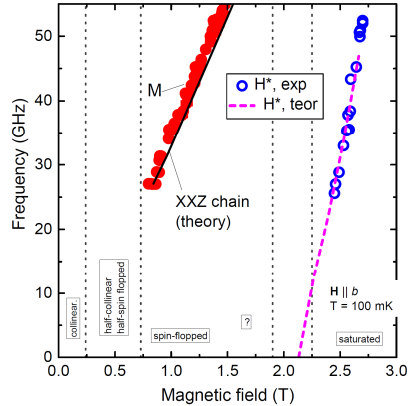


Рис. 2

полосы поглощения мы рассчитываем поле H^* из правила отбора для двухчастичного поглощения $\omega(q) = \omega(k) + \omega(-k)$, здесь $\omega(q)$ — частота микроволновой накачки, $\omega(k)$ — закон дисперсии квазичастиц. Используя зависимости $\omega(k)$ для конкретных значений магнитного поля [3], были получены теоретические значения граничных полей.

На рис. 2 теоретические значения H^* представлены наклонной пунктирной линией и хорошо совпадают с экспериментальными значениями. Таким образом, мы убеждаемся, что широкая полоса поглощения действительно обусловлена двухчастичным поглощением в ХХЗ-цепочках, а при низких температурах — двухмагнонным поглощением упорядоченной фазы.

Работа поддержана грантом РФФ 25-12-68027.

Список литературы

- [1] M Kenzelmann et al, Phys. Rev. B **65**, 144432 (2002)
- [2] O. Breunig et al , Phys. Rev. Lett. **111**, 187202 (2013) .
- [3] P. Laurell, et al, Phys. Rev. Lett. **127**, 037201 (2021) and Supplement
- [4] T. A. Soldatov, V. S. Edelman, A. I.Smirnov, Appl. Magn. Res. **55**, 1137 (2024).

Антиферромагнитный резонанс в спин-цепочечном XXZ- антиферромагнетике Cs_2CoCl_4

Т. А. Солдатов^{*}, А. И. Смирнов

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

**E-mail: tim-sold@yandex.ru*

Cs_2CoCl_4 является фрустрированным антиферромагнетиком со слоистой магнитной структурой. Магнитные ионы Co^{2+} со спином $S = 3/2$ расположены в слоях на искаженной треугольной решетке и связаны антиферромагнитным обменным взаимодействием. Основной обмен $J = 0.74$ К действует вдоль оснований треугольников, обмены J' вдоль боковых сторон равнобедренных треугольников оказываются на порядок слабее [1,2]. Поскольку $J' \ll J$, то магнитную систему Cs_2CoCl_4 можно представить в виде множества слабо взаимодействующих между собой спиновых цепочек, ориентированных вдоль оснований треугольников. Ионы Co^{2+} имеют сильную одноионную локальную анизотропию $D = 7$ К легкоплоскостного типа. Упорядочение спинов в кристалле наступает при температурах ниже температуры Нееля $T_N = 0.22$ К [1].

Вследствие сильной одноионной анизотропии поведение магнитной системы в Cs_2CoCl_4 при низких температурах определяется только нижним дублетом ионов Co^{2+} , поэтому целесообразно ввести представление псевдоспинов $s = 1/2$. В этом представлении естественным образом

возникает сильная легкоплоскостная анизотропия главного обмена и перенормировка g -фактора [3]. Таким образом, в первом приближении спиновая система Cs_2CoCl_4 может рассматриваться как набор из слабо связанных антиферромагнитных XXZ-цепочек спинов $s = 1/2$. В данном веществе кристаллографическая ось b совпадает с направлением цепочек и лежит в легкой плоскости для всех четырех цепочек, пересекающих примитивную ячейку кристалла. Кристаллы Cs_2CoCl_4 представляют собой удобный модельный объект для изучения квантовых свойств XXZ-цепочки спинов $s = 1/2$ в поперечном магнитном поле при приложении поля $\mathbf{H} \parallel b$.

В нашей работе мы изучили спектры магнитного резонанса в Cs_2CoCl_4 в широком диапазоне частот 25–120 ГГц при температурах 0.1–7 К и в магнитных полях $\mathbf{H} \parallel b$ и $\mathbf{H} \parallel a$ (направление a составляет угол примерно 45° с плоскостью анизотропии для всех цепочек). Эксперименты выполнены с использованием спектрометрической вставки с рефрижератором растворения [4]. В результате измерений установлено, что в упорядоченной фазе в поле $\mathbf{H} \parallel b$ спектр антиферромагнитного резонанса состоит из основной интенсивной линии М и семи слабых сателлитов s_1 – s_7 (см. рис. 1). Суммарная интенсивность сателлитов мала по сравнению с интенсивностью моды М. Анализ показывает, что резонансная частота главной линии М хорошо соответствует нижнему максимуму в спектре поглощения XXZ-цепочки для нулевого волнового вектора [5] (см. черную сплошную кривую).

Таким образом, спектр возбуждений в упорядоченной фазе в целом соответствует возбуждениям XXZ-цепочки и лишь слегка модифицирован за счет слабого межцепочечного обмена и диполь-дипольного взаимодействия. Модификация проявляется в виде образования слабых сателлитов при температурах ниже точки Нееля. Спектр одиночной цепочки превращается в спектр 8-подрешеточной антиферромагнитной структуры. Наличие 8 подрешеток зафиксировано в нейтронной работе [1]. В то же время, несмотря на многомодовый характер спектра, модификация является слабой, поскольку основная часть спектрального веса остается вблизи положения, характерного для одиночной цепочки.

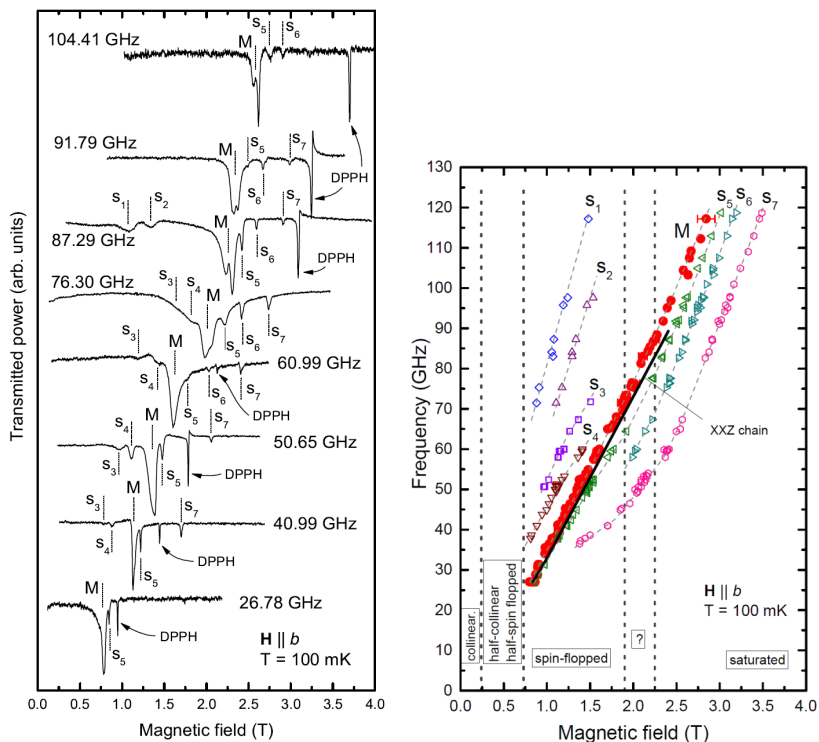


Рис. 1. Набор ЭСР линий (левая панель) и частотно-полевая зависимость (правая панель) для $H \parallel b$ и $T = 100$ mK

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 25-12-68027.

Список литературы

- [1] M. Kenzelmann et al., *Phys. Rev. B* **65**, 144432 (2002).
- [2] H. Yoshizawa et al., *Phys. Rev. B* **28**, 3904 (1983).
- [3] O. Breunig et al., *Phys. Rev. Lett.* **111**, 187202 (2013).
- [4] A. Smirnov et al., *Instruments and Experimental Techniques* **65**, 668 (2022).
- [5] P. Laurell et al., *Phys. Rev. Lett.* **127**, 037201 (2021) and Supplement.

6H перовкиты — новый класс альтермагнетиков

С. В. Стрельцов

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

Последние несколько лет изучение альтермагнетиков является одной «горячих» тем в физике конденсированного состояния [1,2]. В данной работе был проведен анализ магнитной симметрии различных соединений, имеющих кристаллическую структуру так называемых 6H (гексоганальных) перовскитов [3], и показано, что часть из них являются альтермагнетиками.

Для нескольких 6H перовскитов были дополнительно выполнены расчеты в рамках теории функционала плотности (DFT+U и DFT + U + SOC), которые продемонстрировали наличие соответствующих спиновых расщеплений в зонной структуре соединений $\text{Ba}_3\text{CoIr}_2\text{O}_9$ и $\text{Ba}_3\text{NiRu}_2\text{O}_9$. Кроме того, было показано, что альтермагнетизм приводит к магнито-оптическому эффекту в $\text{Ba}_3\text{CoIr}_2\text{O}_9$ и гигантскому пьезомагнитному эффекту в $\text{Ba}_3\text{NiRu}_2\text{O}_9$ [4].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект РНФ 23-12-00159.

Список литературы

- [1] L. Smejkal, J. Sinova, and T. Jungwirth Phys. Rev. X **12**, 040501 (2022).
- [2] C. Song, H. Bai, Z. Zhou, L. Han, H. Reichlova, J. H. Dil, J. Liu, X. Chen, F. Pan // Nature Review Materials (2025).
- [3] L. T. Nguyen, R. J. Cava, Hexagonal Perovskites as Quantum Materials // Chem. Rev. **121**, 2935 (2021).
- [4] S. V. Streltsov, unpublished.

Влияние слабого легирования ионами Mn^{3+} на магнитные свойства $\text{BiFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ ($0.0 \leq x \leq 0.1$)

Т. Н. Тарасенко, Г. К. Волкова, Р. А. Сафонов, В. В. Бурховецкий,
В. М. Ткаченко, О. Н. Потапская, Д. Е. Наймушина, А. В. Шевелёва,
В. И. Михайлов

*ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина»,
г. Донецк, Россия
E-mail: t.n.tarasenko@mail.ru*

Магнитные и электрические свойства сложных оксидов Bi(Fe,Mn)O_3 как сильно коррелированных систем зависят от особенностей обменных взаимодействий в связях Mn-O-Mn , Fe-O-Fe и Mn-O-Fe , которые связаны с локальной структурой октаэдров Fe/MnO_6 .

Крайние составы этой системы — BiFeO_3 и BiMnO_3 являются мультиферроиками, с сегнетоэлектрическим и магнитным упорядочением, но в магнитном отношении они резко отличаются: BiFeO_3 является антиферромагнетиком (АФМ), а BiMnO_3 — ферромагнетиком (ФМ) с температурой Кюри $T_C = 105$ К [1]. Оба соединения имеют искаженную структуру перовскита: BiFeO_3 — ромбоэдрически искаженную структуру (пр. гр. $R\bar{3}c$), а BiMnO_3 — моноклинно искаженную структуру (пр. гр. $C2$). Присутствие Mn должно способствовать ФМ упорядочению в твердых растворах $\text{BiFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$. Однако в образцах, полученных методом твердофазного синтеза, замещение ионов Fe^{3+} ионами Mn^{3+} не приводит к проявлению ФМ свойств. Образцы остаются АФМ-ми для всех составов $\text{BiFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ ($0.0 \leq x \leq 0.4$) [2]. Но для образцов BiFeO_3 , слабелегированных ионами марганца Mn^{3+} , полученных золь-гель синтезом [3], показано, что в диапазоне концентраций ($0.0 < x < 0.03$) наблюдается возрастание остаточной намагниченности M_r . После достижения максимального значения при $x = 0.03$ дальнейшее увеличение x приводит к спаду M_r до уровня BiFeO_3 .

В данной работе изучены структурные и магнитные характеристики системы твердых растворов $\text{BiFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ ($0.0 \leq x \leq 0.1$), синтезированных золь-гель методом. Для всех составов кристаллическая структура определена как ромбоэдрическая (пр. гр. $R3c$), на рентгенодифракто-

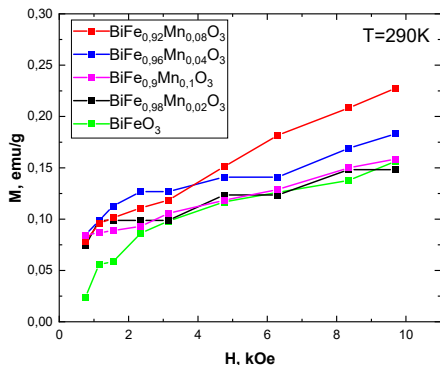


Рис. 1. Кривые намагничивания $M(H)$ $\text{BiFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ ($0.0 \leq x \leq 0.1$)

граммах имеется несколько малоинтенсивных рефлексов примесных фаз. Измерения удельной намагниченности $M(H)$ проводились с помощью магнитных весов Доменикали. На рис. 1 показаны кривые намагничивания всех составов $\text{BiFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ при комнатной температуре. В поле 9,7 кОе кривые $M(H)$ еще не выходят на насыщение, но значения уд. намагниченности значительно превышают значения, полученные в [3].

На рис. 2 представлена концентрационная зависимость уд. намагниченности $M(x)$ для этой системы при комнатной температуре. С увеличением концентрации марганца зависимость $M(x)$ для $\text{BiFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ монотонно возрастает и достигает максимума при критическом значении $x_{кр.}=0.08$, затем резко уменьшается при $x = 0.1$ практически до уровня «чистого» BiFeO_3 . Такое поведение удельной намагниченности $M(x)$ может свидетельствовать о наличии в структуре дополнительной (орторомбической) перовскитной фазы $Pbnm$ [3,4], остаточная намагниченность которой довольно мала [3]. Возрастание намагниченности $M(x)$ при небольшой концентрации ионов Mn^{3+} ($x \leq x_{кр.}$) обусловлено усилением янтеллеровских искажений кислородного октаэдра $(\text{Fe/Mn})\text{O}_6$ при замещении Fe^{3+} на Mn^{3+} .

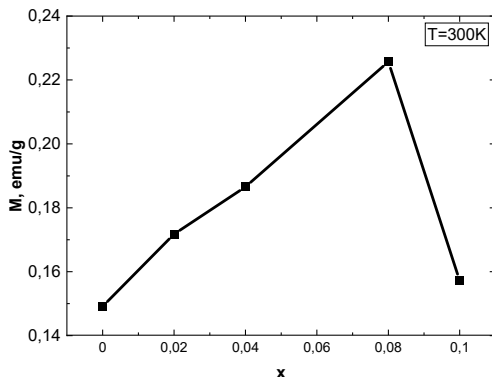


Рис. 2. Концентрационная зависимость уд. намагниченности $M(x)$ $\text{BiFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ ($0,0 \leq x \leq 0,1$) в поле $H = 9,7$ кОе

системе $\text{BiFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ для $x=0,05$ и $0,15$ [5], где значение уд. намагниченности $M(x=0,05)$ было значительно больше, чем $M(x = 0,15)$.

Поскольку магнитные свойства данных систем определяются ионами Fe^{3+} и Mn^{3+} , а ион Mn^{3+} является ян-теллеровским ионом, снятие вырождения происходит за счет двух возможных типов искажений кислородных октаэдров [4]. Это, в свою очередь, приводит к понижению симметрии при увеличении содержания Mn^{3+} в феррите висмута с замещениями Fe^{3+} на Mn^{3+} [3]. В $\text{BiFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ наблюдается сосуществование двух кристаллографических фаз – $R3c$ и $Pbnm$ в диапазоне замещений $0,03 < x < 0,2$, каждая из которых имеет разные по величине значения намагниченности насыщения M_s , при этом $M_s(R3c) > M_s(Pbnm)$ [3]. С ростом содержания марганца происходит перераспределение объемов этих фаз: $V(R3c)$ уменьшается, а $V(Pbnm)$ увеличивается. Поэтому суммарный магнитный момент при критической концентрации $x = x_{кр.}$ ионов Mn^{3+} , достигает максимума, а при дальнейшем увеличении x начинает уменьшаться.

Появление максимума на концентрационных зависимостях $M(x)$ отмечено во многих исследованиях слаболегированных манганитов и на-

Однако для $x > x_{кр.}$ намагниченность уже представляет собой наложение двух фаз, при этом объем фазы $R3c$ с высокой удельной намагниченностью уменьшается, в то время как объем фазы $Pbnm$ с низкой удельной намагниченностью увеличивается, а значит, суммарное значение $M(x)$ уменьшается. Подобное поведение $M(x)$ наблюдалось нами в такой же сис-

блюдается также при легировании феррита висмута редкоземельными ионами, что связано с формированием второй кристаллографической фазы (чаще всего орторомбической). Значение критической концентрации $x_{кр.}$, при которой наблюдается максимум $M(x)$ зависит от исходных компонентов и условий синтеза замещенных составов.

Список литературы

- [1] Chi Z.H., Yang H., Feng S.M., et al. // JMMM, **310**, P.358–360 (2007).
- [2] Ianculescu A., Gheorghiu F.P., Postolache P. et al. // J. All.Comp., **504**, P.420-426 (2010).
- [3] Chen L., Zheng L., He Y., et al. // J. All.Comp., **633**, P.216-219 (2015).
- [4] Martín-Carrón L., de Andrés A., et al. // Phys. Rev., **B66**, 174303 (2002)
- [5] Тарасенко Т. Н., Михайлов В. И. и др. // Изв. РАН. Сер. физ., Т.87, №3, С.412-416 (2023).

Теоретическое исследование четверных перовскитов



Ф. В. Темников^{1,*}, Ю. Лун^{2,3,4}, Ц. Чжан^{2,3}, С. В. Стрельцов¹,
В. Ю. Ирхин¹, З.В. Пчёлкина¹, А.В. Ушаков¹, Е.В. Комлева¹

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

²Пекинская национальная лаборатория физики конденсированного состояния,
институт физики, Китайская академия наук, г. Пекин, Китай

³Школа физических наук, Университет Китайской академии наук,
г. Пекин, Китай

⁴Лаборатория материалов озера Соншань, Дунгуань, г. Гуандун, Китай
*E-mail: temnikov.fedor.v@gmail.com

Перовскиты (химическая формула ABO_3 , где А — редкоземельный, щелочной или щёлочноземельный металл, В — переходный металл) уже давно вызывают большой интерес исследователей благодаря обилию

различных физических свойств, таких как сверхпроводимость (например, [1]) или сегнетоэлектричество (например, [2]). Усложнение структуры перовскитов позволяет получить ещё большее разнообразие нетривиальных состояний. Одной из модификаций «обычных» перовскитов являются четверные перовскиты вида $AA_3'B_2B_2'O_{12}$. В данной работе исследуется ряд четверных перовскитов с медью на месте A' и рением на месте B' ($NaCu_3Fe_2Re_2O_{12}$, $LaCu_3Fe_2Re_2O_{12}$, $DyCu_3Fe_2Re_2O_{12}$, $LaCu_3Ni_2Re_2O_{12}$).

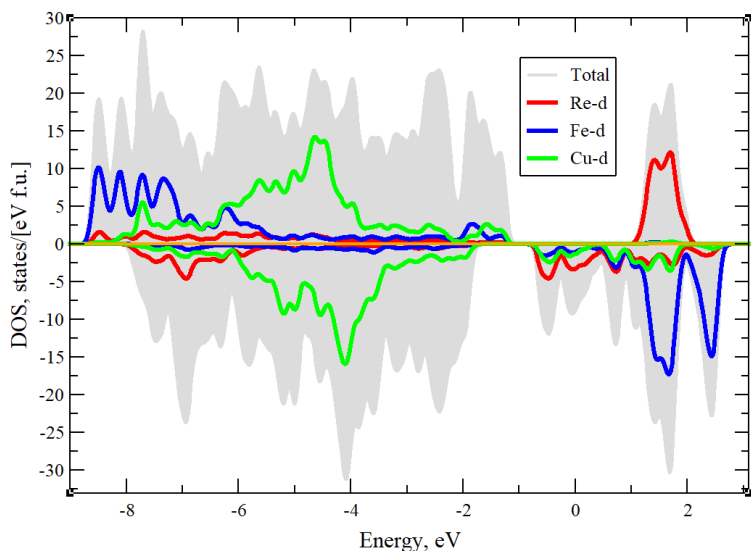


Рис. 1. Плотность состояний $NaCu_3Fe_2Re_2O_{12}$. Уровень Ферми установлен в нуле

Построенные плотности состояний представленных в работе соединений свидетельствуют о том, что все они являются полуметаллическими ферромагнетиками — для одного спинового канала есть ненулевая плотность состояний на уровне Ферми, когда как для противоположного спина наблюдается щель вблизи уровня Ферми. На рис. 1 приведён пример плотности состояний для $NaCu_3Fe_2Re_2O_{12}$ [3]. Для каждого соединения

были рассчитаны обменные параметры взаимодействия. Моделирование методом классического Монте-Карло позволяет оценить температуру перехода из ферромагнитной в парамагнитную фазу. Для соединения $\text{DyCu}_3\text{Fe}_2\text{Re}_2\text{O}_{12}$ было получено теоретическое значение $T_C = 580$ К, что неплохо согласуется с экспериментальным значением $T_C^{\text{exp}} = 650$ К [4].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ 23-42-00069.

Список литературы

- [1] Cava, R. J. et al. *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1676 (1987).
- [2] Cohen, R. E. *Nature* **358**, 136 (1992).
- [3] Zhang, J. et al. *Inorganic Chemistry*, **58**, 19 (2025).
- [4] Liu, Z. et al. *Fundamental Research* (2024).

Спин-переориентация и магнитная фрустрация в интерметаллиде $\text{Fe}_{32+\delta}\text{Ge}_{35-x}\text{Si}_x$ с фрагментами сетки кагомэ

Р. А. Халания^{1,*}, В. Ю. Верченко¹, А. В. Миронов¹, А. Н. Самарин²,
А. В. Богач^{1,2}, А. В. Шевельков¹

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

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

*E-mail: khalaniya@inorg.chem.msu.ru

Последние исследования металлических соединений, содержащих сетки кагомэ показали наличия у них нетривиальных магнитных и транспортных свойств, таких как скирмионное упорядочение и аномальный эффект Холла [1]. В неорганических соединениях также реализуются различные модификации сетки кагомэ, которые имеют несколько иную геометрию, но сохраняют фрустрированные тригональные фраг-

менты. При этом некоторые свойства, присущие сетке кагомэ, также могут сохраняться и при ее модификации. Ранее нами был показан новый способ модификации сетки кагомэ, который, реализуется в тройных соединениях $\text{Fe}_{32+\delta}\text{Ge}_{35-x}\text{E}_x$ ($\text{E} = \text{As}, \text{P}$) [2–4], – путем дробления решетки кагомэ в слабо связанные фрагменты в виде гексаграмм. Несмотря на такую модификацию сетки кагомэ, $\text{Fe}_{32+\delta}\text{Ge}_{35-x}\text{E}_x$ ($\text{E} = \text{As}, \text{P}$) демонстрируют высокую степень магнитной фрустрации $|\theta_W|/T_N > 3$.

В настоящей работе получили аналог данных фаз в системе Fe-Ge-Si – $\text{Fe}_{32+\delta}\text{Ge}_{35-x}\text{Si}_x$. Поликристаллические образцы были получены с помощью твердофазной реакции между FeGe , FeGe_2 и Fe_5Si_3 . Рост монокристаллов проводили методом химических транспортных реакций из простых веществ с использованием иода в качестве транспортного агента. Уточнение кристаллической структуры показало, что полученная фаза $\text{Fe}_{32+\delta}\text{Ge}_{35-x}\text{Si}_x$ является изоструктурной фазам $\text{Fe}_{32+\delta}\text{Ge}_{35-x}\text{E}_x$ ($\text{E} = \text{As}, \text{P}$), при этом замещение Ge на Si ограничено только одной из кристаллографических позиций внутри блока типа MgFe_6Ge_6 . Исследование магнитных свойств $\text{Fe}_{32+\delta}\text{Ge}_{35-x}\text{Si}_x$ показало, что полученная фаза проявляет антиферромагнитное упорядочение при температуре около 160 К, в то время как температура Вейса составляет примерно –500 К, что указывает на высокую степень магнитной фрустрации. Конкуренция магнитных взаимодействий также приводит к переориентации магнитных моментов, которая может быть вызвана как изменением температуры, так и приложением внешнего магнитного поля.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 24-73-00024.

Список литературы

- [1] Yin J. X., Lian B., Hasan M. Z. *Nature*. **612** (2022) 647-657.
- [2] Khalaniya R. A. Mironov A. V., Verchenko V. Y., Jesche A., Tsirlin A. A., Shevelkov, A. V. *Inorg. Chem.* **55** (2016) 12953-12961.
- [3] Khalaniya R. A., Verchenko V. Y., Wei Z., Dikarev E. V., Heinmaa I., Stern, R., Jesche A., Tsirlin A. A., Shevelkov, A. V. *J. Alloys Compd.* **779** (2019) 229-236.

- [4] Khalaniya R. A., Sobolev A. V., Verchenko V. Y., Tsirlin A. A., Senyshyn A., Damay, F., Presniakov I. A., Shevelkov A. V. *Dalton Trans.* **50** (2021) 2210-2220.

Температурная зависимость периода магнитных спиралей в кубических гелимагнетиках со спинами в неэквивалентных позициях

В. А. Чижиков^{1,2}, В. Е. Дмитриенко¹

¹*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова*

НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия

²*МИРЭА — Российский технологический университет, г. Москва, Россия*

Среди перспективных материалов для спинтроники большое внимание привлекают мультиферроики, такие как кристалл Cu_2OSeO_3 , в котором могут возникать магнитные скирмионы [1]. В мультиферроиках II типа магнетизм и сегнетоэлектричество взаимодействуют друг с другом, позволяя управлять магнитными свойствами кристалла при помощи электрического поля. Подобные материалы могут стать основой для памяти и логических устройств нового поколения. Кристалл Cu_2OSeO_3 относится к кубическим гелимагнетикам, то есть его магнитная структура геликоидально закручена вследствие структурной хиральности (пространственная группа симметрии $P2_13$). Скирмионная решётка, также называемая А-фазой, возникает в данном кристалле вблизи температуры перехода из парамагнитной в закрученную ферримагнитную фазу и обладает термодинамической устойчивостью благодаря внешнему магнитному полю и, по-видимому, флуктуациям параметра порядка (намагниченности) [2,3].

Определяющим параметром магнитной структуры гелимагнетика является волновое число k , связанное с периодом магнитного геликоида

$p = 2\pi / k$. Как правило, $k \ll a^{-1}$, где a — параметр кристаллической решётки, и шаг магнитной спирали во много раз превосходит размер элементарной ячейки. В рамках общепринятой физической модели волновое число равно отношению параметра Дзялошинского–Мории $\mathcal{D}$, отвечающего за закрутку, к ориентационной жёсткости магнитной структуры $\mathcal{J}$. Поскольку оба эти параметра, входящие в выражение для плотности упругой энергии магнитной структуры [4,5]

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \mathcal{J} \frac{\partial \mu_\alpha}{\partial x_\beta} \frac{\partial \mu_\alpha}{\partial x_\beta} + \mathcal{D} \boldsymbol{\mu} \operatorname{rot} \boldsymbol{\mu} - M \mathbf{H} \boldsymbol{\mu},$$

меняются пропорционально квадрату намагничённости M^2 , то обычно предполагается, что волновое число k слабо зависит от температуры ($\boldsymbol{\mu} = \mathbf{M}/M$ — единичный вектор, направленный по полю намагничённости). Однако, как показано в этом докладе, может возникать существенная температурная зависимость k , если магнитные атомы в кристалле занимают две или более неэквивалентные позиции, как в случае Cu_2OSeO_3 .

Шестнадцать магнитных атомов (меди) в элементарной ячейке Cu_2OSeO_3 распределены по двум неэквивалентным позициям $4a$ (Cu-I) и $12b$ (Cu-II). При этом четыре спина атомов Cu-I направлены почти противоположно двенадцати спинам атомов Cu-II, оставляя полный магнитный момент ячейки не скомпенсированным (все атомные моменты ещё и слегка скошены друг от друга). Таким образом, в магнитном плане данный кристалл представляет собой ферромагнетик с геликоидальной закруткой, связанной с хиральностью атомной структуры и взаимодействием Дзялошинского–Мории. Используя приближение среднего поля Вейса для классических спинов, можно вычислить средний спин магнитного атома, находящегося в i -й позиции как

$$\boldsymbol{\sigma}_i = \langle \mathbf{s}_i \rangle = \frac{\int \mathbf{s}_i \exp(\mathbf{h}_i \mathbf{s}_i / k_B T) d\Omega}{\int \exp(\mathbf{h}_i \mathbf{s}_i / k_B T) d\Omega},$$

где $\mathbf{h}_i = \sum_j J_{ij} \boldsymbol{\sigma}_j$ — среднее эффективное поле обменного взаимодействия с соседними спинами, и усреднение ведётся по сферическим углам.

Тогда средние спины в двух неэквивалентных позициях можно найти, решив систему уравнений

$$\begin{cases} \sigma_1 = L[(J_{11}\sigma_1 + J_{12}\sigma_2)/k_B T], \\ \sigma_2 = L[(J_{21}\sigma_1 + J_{22}\sigma_2)/k_B T], \end{cases}$$

где функция Ланжевена $L(x) = \text{cth } x - 1/x$. Элементы матрицы

$$\hat{J} = \begin{pmatrix} J_{11} & J_{12} \\ J_{21} & J_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 25.254 \\ 8.418 & 9.65 \end{pmatrix} \text{ мЭВ}$$

были выведены нами из обменных констант связей, вычисленных из первых принципов в работе [6], в соответствии с локальным окружением атомов Cu-I и Cu-II. Расчёт даёт значение критической температуры $T_c = 78.1$ К, несколько отличное от экспериментального значения $T_c = 58.8$ К. Температурная зависимость средних спинов ниже точки перехода приведена на рисунке слева. Вблизи T_c отношение $\sigma_2 / \sigma_1 = 0.7992$. Модуль намагниченности определяется формулой $M = g_{\text{Cu}} \mu_B (12\sigma_2 - 4\sigma_1)$, где g_{Cu} – g-фактор меди.

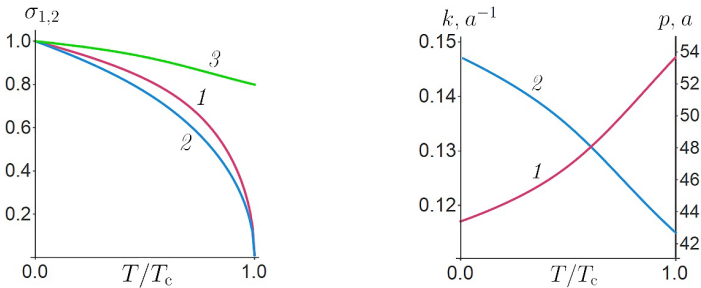


Рис. 1. Слева: температурная зависимость средних спинов атомов меди в двух неэквивалентных позициях в кристалле Cu_2OSeO_3 , вычисленная в модели среднего поля: 1 — средний спин σ_1 атомов Cu-I, 2 — средний спин σ_2 атомов Cu-II, 3 — отношение σ_2 / σ_1 . Справа: температурные зависимости волнового числа k (1) и шага $p = 2\pi/k$ (2) магнитных геликоидов (в параметрах элементарной ячейки)

Изменение соотношения средних спинов вблизи критической температуры должно отразиться на упругих модулях J и $\mathcal{D}$ магнитной энергии и, как следствие, на волновом числе $k = \mathcal{D} / J$ и шаге магнитного геликоида $p = 2\pi J / \mathcal{D}$. Так, согласно нашим расчётам, шаг геликоида меняется от $54a$ вблизи абсолютного нуля до приблизительно $43a$ вблизи критической температуры (см. рисунок справа). Заметим, что экспериментально наблюдавшееся значение шага спирали — около 71.4 параметров кристаллической решётки. Причиной расхождения могут быть завышенные значения векторов Дзялошинского–Мории, взятые нами из работы [6].

Вышеприведённый теоретический анализ показывает, что возможной причиной возникновения температурной зависимости шага магнитного геликоида в критической переходной области мультиферроика II типа Cu_2OSeO_3 является наличие в нём двух неэквивалентных позиций магнитных атомов меди, имеющих разные магнитные моменты с разным температурным поведением. Можно ожидать, что описанный нами температурный эффект повлияет также и на сегнетоэлектрические свойства данного кристалла [7].

Список литературы

- [1] M. Mostovoy, npj Spintronics **2**, 18 (2024).
- [2] S. Seki, X. Z. Yu, S. Ishiwata, and Y. Tokura, Science **336**, 198 (2012).
- [3] T. Adams, A. Chacon, M. Wagner et al., Phys. Rev. Lett. **108**, 237204 (2012).
- [4] P. Bak, M.H. Jensen, J. Phys. C: Solid State Phys. **13**, L881 (1980).
- [5] O. Nakanishi, A. Yanase et al., Solid State Commun. **35**, 995 (1980).
- [6] J. H. Yang, Z. L. Li, X. Z. Lu et al., Phys. Rev. Lett. **109**, 107203 (2012).
- [7] V. A. Chizhikov and V. E. Dmitrienko, J. Phys.: Condens. Matter **29**, 155601 (2017).

Термохимия точечных дефектов в шпинелях $(\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x})_3\text{O}_4$ в рамках DFT+U и анализа экспериментальных данных

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

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

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

Процесс коррозии нержавеющей сталей в контакте с тяжелым жидкометаллическим теплоносителем в последние десятилетия стал предметом разносторонних комбинированных исследований [1]. Наиболее современные многомасштабные модели, обеспечивающие описание макроскопических процессов диффузии на базе данных атомистического моделирования, могут интегрировать результаты первопринципных расчетов в существующие модели точечных дефектов в магнетите Fe_3O_4 и железохромистых шпинелях $(\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x})_3\text{O}_4$ и таким образом предсказывать кинетику роста пленок [2,3]. Более того, сами модели точечных дефектов, наоборот, могут быть экстраполированы к более широким диапазонам температур на основании экспериментальных данных в процессе оптимизации параметров этих моделей [4].

Ранее, на основании некоторых [5,6] хорошо зарекомендовавших себя подходов к описанию Fe_3O_4 и FeCr_2O_4 в рамках метода DFT+U [7] с параметрами $U = 3.5$ и 2.0 эВ для Fe и Cr соответственно нами были рассчитаны энергии образования всевозможных катионных и кислородных вакансий и междоузлий в кубических фазах этих шпинелей [8]. Результаты оказались в хорошем качественном и количественном согласии с экспериментальными данными Dieckmann et al. [9]; были разрешены некоторые противоречия с более современными экспериментами [10].

Концентрации точечных дефектов в оксидах, однако, являются функциями температуры и парциального давления кислорода. Таковыми являются и свободные энергии Гиббса их образования в силу зависимости их от химических потенциалов элементов. Существует неоднозначность выбора диапазона изменения этих химпотенциалов, что затрудняет

воспроизведение экспериментальных концентраций или предсказание их из расчета.

В настоящей работе на основании наших предшествующих результатов и расчетно-теоретической модели [4], дополняющей модель Dieckmann et al. в области существенно более низких температур функционирования теплоносителя, произведена попытка воспроизвести профили концентраций катионных точечных дефектов как функции активности кислорода и экстраполировать результаты к промежуточным составам железохромистых шпинелей. Методика сравнена с предложенными другими авторами экстраполяциями [1,11]. Продemonстрировано количественное согласие расчетной энергии связывания в катионной паре Френкеля в Fe_3O_4 с найденной по данным Dieckmann et al. для нескоррелированной пары [9] и независимым данным Elnaggar et al. [10], из которых предварительно была извлечена энергия Гиббса образования скоррелированной пары.

Список литературы

- [1] *Martinelli L.* [et al.]. Oxidation mechanism of a Fe-9Cr-1Mo steel by liquid Pb–Bi eutectic alloy (Part III) // *Corros. Sci.* 2008. V. 50(9). P. 2549–2559.
- [2] *Kolotinskii D. A.* [et al.]. Point Defect Model for the kinetics of oxide film growth on the surface of T91 steel in contact with lead–bismuth eutectic // *Corros. Sci.* 2023. V. 211. P. 110829.
- [3] *Kolotinskii D. A., Nikolaev V. S.* Formation and dissolution of porous magnetite layer in contact with lead-bismuth eutectic: Locally equilibrium thermodynamic model // *Corros. Sci.* 2024. V. 239. P. 112394.
- [4] *Zhang W.* [et al.]. A Mechanistic Model for Oxidation of Fe-Cr steels in Liquid Lead-Bismuth Eutectic (LBE) // *SSRN preprint*. [2024]. SSRN: /10.2139/ssrn.4892815.
- [5] *Shutikova M. I., Stegailov V. V.* Frenkel pair formation energy for cubic Fe_3O_4 in DFT+U calculations // *J. Phys. Condens. Matter.* 2022. V. 34(47). P. 475701.
- [6] *Фоминых Н. А., Стегайлов В. В.* Поляроны и перенос заряда в хромите FeCr_2O_4 в рамках DFT + U // *Письма в ЖЭТФ.* 2023. Т. 117. № 11. С. 857–862.

- [7] *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.
- [8] *Чичеватов Г. Д., Стегайлов В. В.* Точечные дефекты в шпинелях FeMe_2O_4 (Me = Fe, Cr): исследование в рамках метода DFT+U // *ЖЭТФ.* 2024. Т. 166. № 3. С. 347–373.
- [9] *Dieckmann R., Schmalzried H.* Defects and Cation Diffusion in Magnetite (VI): Point Defect Relaxation and Correlation in Cation Tracer Diffusion // *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* 1986. V. 90(7). P. 564–575.
- [10] *Elnaggar H.* [et al.]. Temperature-Driven Self-Doping in Magnetite // *Phys. Rev. Lett.* 2021. V. 127(18). P. 186402.
- [11] *Sievwright R. H.* [et al.]. Diffusion and partition coefficients of minor and trace elements in magnetite as a function of oxygen fugacity at 1150 °C // *Contrib. Mineral. Petrol.* 2020. V. 175(5). P. 40–60.

Природа сильно коррелированной квантовой спиновой жидкости в $\text{Sr}_3\text{CuNb}_2\text{O}_9$

В. Р. Шагинян

ПИЯФ НИЦ КИ

Квантовые спиновые жидкости фрустрированных магнетиков являются одними из самых привлекательных и основных систем в физике. Фрустрированные магнетики проявляют исключительные свойства как изоляторы и металлы. Поэтому надежная теория, описывающая эти материалы, имеет большое значение. Теория конденсации фермионов дает аналитическое описание различных фрустрированных квантовых спиновых жидкостей и способна описывать термодинамические и транспортные свойства магнетиков на основе идеи спинонов, представленных беззарядными фермионами, заполняющими сферу Ферми до импульса Ферми. Мы показываем, что низкотемпературная термодинамика $\text{Sr}_3\text{CuNb}_2\text{O}_9$ в магнитных полях определяется сильно коррелированной квантовой спиновой жидкостью. Наши расчеты ее термодинамических свойств хорошо согласуются с недавними экспериментальными фактами и позво-

ляют нам выявить их поведение, которое очень похоже на наблюдаемое как в металлах с тяжелыми фермионами, так и во фрустрированных магнетиках или изоляторах. Мы впервые демонстрируем, что $\text{Sr}_3\text{CuNb}_2\text{O}_9$ принадлежит к семейству сильно коррелированных ферми-систем, которые образуют новое состояние вещества [1].

Список литературы

- [1] V.R. Shaginyan, A.Z. Msezane, S.A. Artamonov, Y.S. Leevik. Advanced Materials: Nature of Strongly Correlated Quantum Spin Liquid in $\text{Sr}_3\text{CuNb}_2\text{O}_9$. Advanced Materials & Sustainable Manufacturing 2025, 2, 10001. <https://doi.org/10.70322/amsm.2025.10001>

Индукционное беспорядком сосуществование зонного низкоспинового и локализованного высокоспинового состояний Mn в легированном RhMnSi

В. Н. Краснорусский¹, А. В. Боков¹, З. Н. Волкова^{1,2}, А. П. Герашенко^{1,2},
Н. М. Щелкачев¹, М. В. Магнитская¹, Д. О. Скаченко^{1,3}
Е. В. Алтынбаев^{1,3}, И. В. Алферьев⁴, Д. А. Саламатин¹, В. А. Сидоров¹,
А. В. Семенов^{1,5}, В. В. Бражкин¹ и А. В. Цвященко¹

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

²Институт физики металлов им. В.И. Михеева РАН, г. Екатеринбург, Россия

³Национальный исследовательский центр «Петербургский институт ядерной физики» «Курчатовский институт», Гатчина, г. Санкт-Петербург, Россия

⁴Физический факультет Санкт-Петербургского государственного университета, г. Санкт-Петербург, Россия

⁵Институт общей физики им. Прохорова РАН, г. Москва, Россия

Несмотря на 60-летнюю историю исследований зонного магнетизма в MnSi , эта область остается актуальной для изучения. Интерес к ней сохраняется, хотя физика слабого зонного магнетизма осложнена малыми магнитными моментами и неоднозначной ролью локальных взаимодействий.

В данной работе исследуются легированные Rh соединения MnSi, в которых методом ядерного магнитного резонанса (ЯМР) ^{55}Mn был обнаружен высокоспиновый (HS) состояние магнитных моментов Mn. Легирование MnSi родием приводит к переходу в HS-состояние для $\text{Mn}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Si}$ при $x = x_c \approx 0.025$, где возникают два магнитных момента Mn ≈ 1.3 и $2.2 \mu\text{B}$, упорядочивающихся ниже 200 К. Однако этот переход затрагивает лишь часть атомов Mn, тогда как остальные сохраняют низкоспиновое (LS) состояние. При этом взаимодействие Дзялошинского–Мории (DM) для LS-спиральных состояний моментов Mn сохраняется вплоть до $x \approx 0.13$.

Кроме того, изменение концентрации Rh приводит к заметным изменениям в фазовых диаграммах «магнитное поле – температура». В частности, обнаружено, что температурный интервал существования А-фазы, отвечающей за скирмионную решетку исходного соединения, значительно расширяется при легировании Rh вплоть до $x = 0.025$. Метод малоуглового нейтронного рассеяния подтвердил наличие скирмионной решетки в геликоидальной магнитной фазе $\text{Mn}_{0.98}\text{Rh}_{0.02}\text{Si}$. Таким образом, легированный Rh MnSi демонстрирует сосуществование HS- и LS-состояний Mn.

Наши расчеты в рамках теории функционала плотности (DFT) показали, что такое поведение возможно только в случае, когда Rh занимает не только позиции Mn, но и Si в структуре MnSi. Кроме того, установлено, что легирование MnSi иридием (Ir) не приводит к образованию высокотемпературной фазы, а скорее подавляет DM-взаимодействие. Несмотря на принадлежность Rh и Ir к одной группе, их влияние на MnSi при легировании оказывается принципиально различным [1].

Список литературы

- [1] V. N. Krasnorussky, A. V. Bokov, Z. N. Volkova, A. P. Gerashchenko, N. M. Chtchelkatchev, M. V. Magnitskaya, D. O. Skanchenko, E. V. Altynbaev, I. V. Alferev, D. A. Salamatina, V. A. Sidorov, A. V. Semenov, V. V. Brazhkin, A. V. Tsveyashchenko, Disorder-induced coexistence of itinerant low-spin and localized high-spin states of Mn in Rh-doped MnSi // Phys. Rev. Mater. 8 (2024) 124405.

СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ

Особенности сверхпроводящего состояния в молибден-углеродных нанокompозитах в слабых магнитных полях

А. Д. Божко*, В. В. Глушков

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

**E-mail: bozhko@lt.gpi.ru*

Металл-диэлектрические нанокompозиты являются материалами с высоким потенциалом практического использования в качестве функциональных слоев в сенсорах различных типов. Список возможных применений включает в себя датчики температуры, деформации, газового состава, влажности и др. [1–4]. Кроме того, металл-диэлектрические нанокompозиты могут служить модельными объектами неупорядоченных гранулированных сред, в которых конкуренция между зарядовыми эффектами и квантовым конфайнментом электронов на гранулах, кулоновским отталкиванием электронов и межгранульным туннелированием носителей заряда через неупорядоченную диэлектрическую матрицу определяет механизмы электронного транспорта и параметры сверхпроводимости [5].

В докладе представлены результаты исследования свойств сверхпроводящего состояния в молибден-углеродных нанокompозитах в диапазоне концентраций молибдена 0.16–0.3. Аморфные пленки молибден-углеродных нанокompозитов толщиной около 1 мкм осаждались на полированные диэлектрические подложки посредством разложения паров кремний-органического полимера в плазме газового разряда в гибридном технологическом процессе [6]. Металл вводился в растущую пленку магнетронным распылением молибденовой мишени. Осажденные нанокompозиты представляют собой аморфную углеродсодержащую матрицу,

в которой случайным образом распределены проводящие гранулы с характерным размером 1.1 ± 0.5 нм, демонстрирующие выраженную тенденцию к росту при увеличении концентрации молибдена [7].

В исследованном диапазоне концентраций молибдена молибден-углеродные нанокомпозиты являются сверхпроводниками с температурой перехода в сверхпроводящее состояние до 4.7 К, величина которой возрастает с увеличением концентрации молибдена.

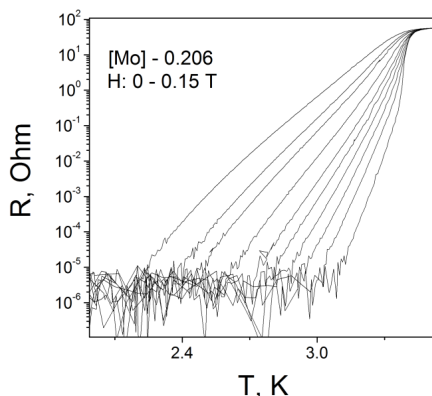


Рис. 1. Резистивный сверхпроводящий переход в молибден-углеродных нанокомпозитах с концентрацией молибдена 0.206 в магнитных полях до 0.15 Тл в полулогарифмических координатах

В перпендикулярном плоскости пленки магнитном поле напряженностью до 500 Э, резистивные переходы в сверхпроводящее состояние характеризуются наличием в полулогарифмических координатах протяженных линейных участков, коэффициент наклона которых зависит от магнитного поля (рис. 1). Показано, что в слабых магнитных полях зависимость сопротивления пленок молибден-углеродных нанокомпозитов от температуры имеет вид $R \sim R_0 \exp\left(\frac{T-T_1}{T_0}\right)$, где температура T_1 близка к критической температуре перехода пленки нанокомпозита в сверхпроводящее состояние, а T_0 — некоторая характеристическая энергия, величина которой возрастает при увеличении магнитного поля. Зависимость

T_0 от концентрации молибдена имеет немонотонный вид, изменяется в пределах 34 ± 2 – 45 ± 2 мК и характеризуется наличием минимума при концентрации молибдена 0.195.

При увеличении концентрации молибдена линейность обсуждаемых участков нарушается и на зависимостях $R(T)$ появляются линейные участки в активационных координатах (рис. 2) определяющие энергию активации крипа магнитного потока. Энергия активации уменьшается при увеличении магнитного поля пропорционально H^a , где показатель степени a находится в интервале 0.3–0.4.

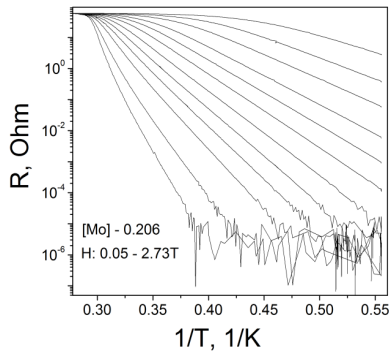


Рис. 2. Резистивный сверхпроводящий переход в молибден-углеродных нанокompозитах с концентрацией молибдена 0.206 в магнитных полях 0.05–2.73 Тл в активационных координатах

Нетривиальный характер сверхпроводящего перехода в сверхмалых магнитных полях может указывать на определяющее влияние перколяционной природы сверхпроводящего состояния в молибден-углеродных нанокompозитах и их наногранулированной структуры на особенности формирования и динамику вихревой системы, что проявляется в экспоненциальной температурной зависимости сопротивления, с одной стороны, и в переходе, при увеличении магнитного поля, к классическим активационным зависимостям сопротивления от температуры, обусловленных термическим крипом магнитного потока, с другой.

Список литературы

- [1] N. Neella, V. Gaddam, M.M. Nayak et al. // *Sensors and Actuators* **A268** (2017) 173-182.
- [2] S. Guo, L. Guo, X. Chang et al. // *J. of Material Science* **54** (2019) 7048-7061.
- [3] D. Zhang, J. Wu, Y. Cao // *Journal of Alloys and Compounds* **777** (2019) 443-453.
- [4] W.-D. Lin, T.-C. Chang, R.-J. Wu // *Sensors and Materials* **30** (2018) 1297-1306.
- [5] I.S. Beloborodov, A.V. Lopatin, V.V. Vinokur et al. // *Rev. Mod. Phys.* **79** (2007) 469-518.
- [6] B.F. Dorfman // *Thin Solid Films* **330** (1998) 76-82.
- [7] A.D. Bozhko // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics* **7(1)**, (2016) 169-174.

Условия, необходимые для получения высокотемпературной сверхпроводимости в углеродном материале при нормальном внешнем давлении

А. Н. Ионов¹, А. Н. Бугров^{2,3}

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

²Филиал НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ – ИВС,
г. Санкт-Петербург, Россия

³Санкт-Петербургский государственный электротехнический
университет «ЛЭТИ», г. Санкт-Петербург, Россия

Получение сверхпроводящих материалов при нормальном внешнем давлении, обладающих высокой, комнатной, критической температурой (T_c) перехода в сверхпроводящее состояние, когда в проводнике полностью исчезает электрическое сопротивление, является приоритетным направлением в физике твердого тела. Первая такая работа о на-

блюдении при комнатной температуре вольт-амперной характеристики (ВАХ) джозефсоновского вида в структуре алюминий–углерод–алюминий была опубликована в 1974 году [1]. Однако эта работа не получила дальнейшего развития у научной общественности. После достаточно долгого временного интервала, эффект комнатой сверхпроводимости был обнаружен в отдельных, случайных образцах, высоко ориентированного, поликристаллического графита (ВОПГ) [2–4]. Среди работ по исследованию комнатной сверхпроводимости в образцах ВОПГ необходимо отметить работу по наблюдению незатухающего в течение 50 дней тока в кольцеобразном контейнере заполненными графитовыми чешуйками толщиной ~ 0.01 мм, предварительно смоченных в алканах [3]. Согласно модели автора, эффект комнатной сверхпроводимости возникал в чешуйках ВОПГ и в графене [5] в результате их допирования носителями тока при контакте алканов с их поверхностями. Экспериментальные результаты, опубликованные в [3,5] не были ни подтверждены, ни опровергнуты. Однако большие сомнения вызывает модель возникновения комнатной сверхпроводимости в результате допирования графена алканами. Дело в том, что согласно классической теории сверхпроводимости Бардина–Купера–Шриффера (БКШ), критическая температура перехода в сверхпроводящее состояние должна экспоненциально зависеть от плотности электронных состояний на уровне Ферми. Однако, как известно, у графена зависимость плотности состояний от энергии для проводящей и валентной зон имеет вид конусов, касающихся друг друга своими вершинами. Поскольку валентная зона полностью заполнена, а проводящая пуста, то из этого следует, что плотность состояний на уровне Ферми равна нулю. Следовательно, в рамках теории БКШ сверхпроводимость в графене без существенной перестройки ее плотности состояний от энергии должна отсутствовать. Случайное, неконтролируемое возникновение эффекта сверхпроводимости в образцах ВОПГ из-за отсутствия технологического процесса их получения, вызвала скепсис в целесообразности его изучения и даже порождала сомнения в достоверности полученных результатов.

Прогресс в технологии получения образцов с воспроизводимым эффектом сверхпроводимости произошел при синтезе гибридных композитов на основе полистирола и многослойного восстановленного оксида графена. В композите макромолекулы полистирола были ковалентно связаны с атомами углерода, создавая в графеновых слоях механические деформации [6]. Согласно современным теоретическим моделям, флуктуирующее деформационное поле может создавать в плотности состояний графена плоские зоны, аналогичные уровням Ландау [7, 8]. При этом T_c должна зависеть от величины деформационного поля и степени заполнения уровней Ландау носителями тока [9]. В нашем случае допирование носителями тока гибридных композитов происходило при их контакте с растворителем ароматической природы [6].

В настоящей работе были исследованы ВАХ частиц графена, гибридных частиц на основе полистирола и многослойного восстановленного оксида графена, а также графена, нанесенного на различные подложки. Показано, что необходимыми и достаточными условиями для наблюдения ВАХ джозефсоновского типа при комнатной температуре и нормальном внешнем давлении являются: 1) создание в углеродном материале флуктуирующего деформационного поля; 2) допирование носителями тока углеродного материала при выдерживании его в ароматических углеводородах.

Список литературы

- [1] K. Antonowicz, Possible superconductivity at room temperature // *Nature*, 247, 358 (1974).
- [2] Y. Kopelevich, P. Esquinazi, J.H.S. Torres, S. Moehlecke, Ferromagnetic and superconducting-like behavior of graphite // *J. Low Temp. Phys.*, 119(5-6), 691 (2000).
- [3] Y. Kawashima, Possible room temperature superconductivity in conductors obtained by bringing alkanes into contact with a graphite surface // *AIP Adv.* 3, 052132-7 (2013).
- [4] M. Saad, I.F. Gilmudtinov, A.G. Kiiamov, D.A. Tayurskii, S.I. Nikitin, R.V. Yusupov, Observation of persistent currents in finely dispersed pyrolytic graphite // *JETP Lett.*, 107(1), 37 (2018).

- [5] United States US 2011 0130292A1 (12) Patent Application Publication (10) Pub. No.: US 2011/0130292 A1 Kawashima (43) Pub. Date: Jun. 2, 2011.
- [6] А.Н. Ионов, А.В. Анкудинов, М.Н. Николаева, А.Н. Бугров. Джозефсоновский вид вольт-амперных характеристик химически модифицированного графита при комнатной температуре и нормальном давлении // Письма в ЖТФ, 50, 11 (2024).
- [7] G.E. Volovik, Graphite, graphene, and the flat band superconductivity // JETP Lett. 107, 516 (2018).
- [8] М.А.Н. Vozmediano, М.І. Katsnelson, F. Guinea, Gauge fields in graphene // Phys. Rep., 496, 109 (2010).
- [9] B. Uchoa, Y. Barlas, Superconducting states in pseudo-landau-levels of strained graphene // Phys. Rev. Lett., 111, 046604 (2013).

Экспериментальное определение роли спиновых флуктуаций в механизме сверхпроводимости пниктидов Na(Fe,Co)As

С. А. Кузьмичев^{1,2,*}, Т. Е. Кузьмичева², А. В. Муратов²,
С. Ю. Гаврилкин², И. В. Морозов³, А. И. Шилов², Е. О. Рахманов^{3,2}

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

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

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

^{*}*E-mail: kuzmichev@lt.phys.msu.ru*

Методами спектроскопии эффекта некогерентных многократных андреевских отражений [1] на планарных контактах, полученных техникой «break-junction» [2], исследована структура сверхпроводящего (СП) параметра порядка монокристаллов пниктидов $\text{NaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$ (семейство 111) недо- и передопированных составов с $x = 0.02\text{--}0.05$ и диапазоном критических температур $T_c \approx 18\text{--}21$ К (также см. миниобзор [3]). Ниже T_c в объеме образцов обнаружено сосуществование двух СП-конденсатов. Показана анизотропия в k -пространстве большой СП-щели Δ_L (расши-

ренный s -волновой тип симметрии без точек нулей) и напрямую определены ее экстремумы: минимальная Δ_L^{in} и максимальная Δ_L^{out} энергии связи куперовских пар в зависимости от направления импульса в $k_x k_y$ -плоскости. Для малой СП-щели анизотропия не наблюдалась, и определено ее характеристические отношения $2\Delta_S(0)/k_B T_c \approx 1.5\text{--}2.0$, оказывающееся меньше БКШ-предела слабой связи 3.53.

Напрямую измерены температурные зависимости $\Delta_i(T)$, показана реализация умеренного межзонного взаимодействия (рис. 1). Зависимости экстремумов большой СП-щели $\Delta_L^{\text{in}}(T)$ и $\Delta_L^{\text{out}}(T)$ имеют схожее температурное поведение: степень анизотропии в импульсном пространстве $A_L \equiv 100\% \cdot [1 - \Delta_L^{\text{in}}/\Delta_L^{\text{out}}]$ остается практически постоянной во всем температурном диапазоне, как показано на вставках к рис. 1. Малая СП-щель $\Delta_S(T)$ закрывается с температурой чуть быстрее.

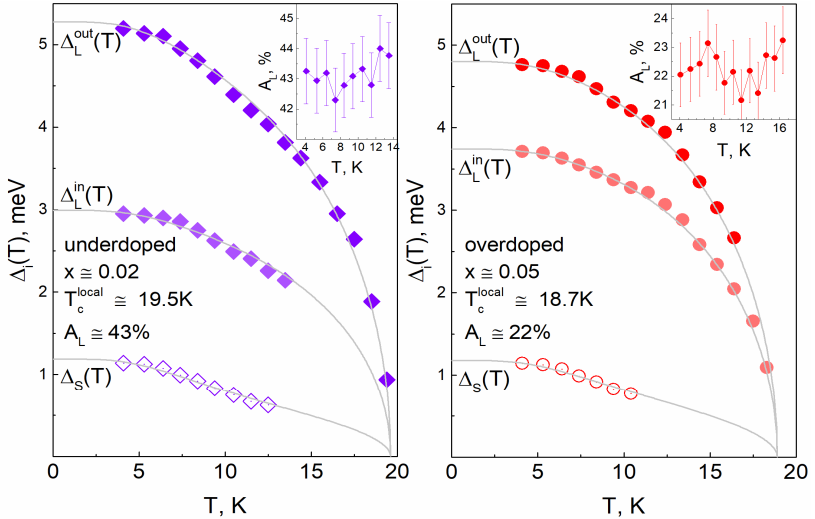


Рис. 1. Температурные зависимости СП-параметров порядка в недо- (слева) и передопированном (справа) $\text{Na}(\text{Fe},\text{Co})\text{As}$ с близкими T_c . На вставках показана зависимость анизотропии большой СП-щели от T , сплошные линии — аппроксимация многозонной моделью

Нами наблюдалось заметное изменение степени анизотропии большой СП-щели с допированием [4, 5]. Характеристическое отношение $2\Delta_L^{\text{out}}(0)/k_B T_c \approx 5.9$ оставалось примерно постоянным в исследованном диапазоне электронного допирования $x = 0.02\text{--}0.05$, при этом характеристическое отношение для СП-параметра порядка Δ_L^{in} примерно линейно увеличивалось от $2\Delta_L^{\text{in}}(0)/k_B T_c \approx 3.6$ в недодопированных составах до $2\Delta_L^{\text{in}}(0)/k_B T_c \approx 4.4$ в передопированных составах [4], что соответствовало уменьшению анизотропии от в среднем 40% до 25% (рис. 2). Линейная экстраполяция полученной зависимости $A_L(x)$ предсказывает изотропизацию большой СП-щели в сильно передопированных составах $\text{NaFe}_{0.91}\text{Co}_{0.09}\text{As}$ с $T_c \approx 8$ К и, напротив, появление нулей углового распределения $\Delta_L(\theta)$ вблизи стехиометрического состава NaFeAs [5].

Наблюдаемое усиление анизотропии СП-щели в k -пространстве в недодопированных составах при приближении к антиферромагнитной фазе (область голубого цвета на рис. 2) однозначно указывает на сильное влияние спиновых флуктуаций на свойства СП-подсистемы пниктидов $\text{NaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$, в частности, на важность учета спин-флуктуационного канала в процессе образования куперовских пар.

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

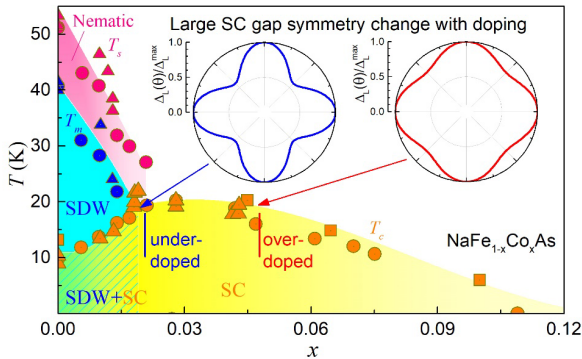


Рис. 2. Схематическое изменение типа симметрии СП-щели $\Delta_L(\theta)$ вдоль фазовой диаграммы допирования $\text{Na}(\text{Fe},\text{Co})\text{As}$. Стрелками показаны исследованные составы

Список литературы

- [1] Kümme R., Günsenheimer U., Nikolsky R. // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 3992.
- [2] Кузьмичев С.А., Кузьмичева Т.Е. // ФНТ. 2016. № 11. С. 1284–1310.
- [3] Kuzmicheva T. E., Kuzmichev S. A. // JETP Lett. 2021. V. 114. P. 630.
- [4] S. Kuzmichev, A. Muratov, S. Gavrilkin, I. Morozov [и др.]. // Eur. Phys. J. Plus. 2024. V. 139. No. 1. P. 74. DOI: 10.1140/epjp/s13360-024-04879-9
- [5] Kuzmichev S. A., Morozov I. V., Shilov A. I., Rakhmanov Ye. O., Kuzmicheva T. E. // JETP Lett. 2024. V. 120. No. 2. P. 125. DOI: 10.1134/S0021364024602008

Сравнение сверхпроводящих свойств ферроселенидов с изовалентным замещением

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

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

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

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

*E-mail: kuzmichevate@lebedev.ru

Селениды $A_xFe_{2-y}Se_2$ (т.н. семейство 122-Se) представляют собой естественные композиты, содержащие не менее двух сосуществующих фаз: около 80% объема кристалла занимают кристаллы антиферромагнитной диэлектрической фазы $A_{0.8}Fe_{1.6}Se_2$, на границах которых растут кристаллиты сверхпроводящей (СП) фазы $A_{0.3}Fe_2Se_2$ [1]. Известно, что различный тип изовалентного замещения по-разному влияет на критическую температуру T_c : так, даже малое замещение щелочного металла вызывает скачкообразное изменение T_c [2], при этом при замещении (Se,S) T_c плавно снижается, образуя «полуколокол» [3]. Из-за естественного фазового расслоения и быстрой деградации свойств на открытом воздухе (в течение нескольких минут) селениды $A_xFe_{2-y}Se_2$ по сей

день остаются одними из наиболее плохо изученных представителей железосодержащих сверхпроводников. В частности, для рассматриваемых в работе составов топология поверхности Ферми остается неизученной, также отсутствуют данные других групп о количестве СП-конденсатов, образующихся ниже T_c .

Методом «раствор в расплаве» мы вырастили крупные (до 8–10 мм) кристаллы с двумя типами изовалентного замещения: $K_{0.8}Fe_{1.7}(Se_{0.73}S_{0.27})_2$ (далее KFSS) с $T_c \approx 26$ К и $(K_{0.8}Na_{0.2})_{0.8}Fe_{1.7}Se_2$ (KNFS) с $T_c \approx 30$ К [4,5].

С помощью техники планарного механически регулируемого создания контактов на микротрещине «break-junction» [6] в кристаллах были созданы различные типы туннельных структур: андреевские SnS-контакты и туннельные ScS-контакты (где S — сверхпроводник, с — сужение, n — тонкий нормальный металл).

Методом спектроскопии эффекта некогерентных многократных андреевских отражений (ЭНМАО) SnS-контактов напрямую [7] определена величина СП-щели и ее характеристическое отношение $2\Delta(0)/k_B T_c \approx 4.1\text{--}4.6 > 3.5$ (что указывает на сильную связь в электронных зонах), а также БКШ-образная температурная зависимость (рис. 1). Показана объемная природа наблюдаемой СП-щели, воспроизводимость ее амплитуды и независимость от геометрических параметров SnS-контакта. Полученные температурные зависимости избыточного андреевского тока $I_{\text{exc}}(T) \equiv I(T, \text{eV}) - I(T_c, \text{eV}) \propto \Delta(T)$, взятого при постоянном смещении $\text{eV} \gg 2\Delta$, хорошо описываются однозонной БКШ-образной зависимостью, что согласуется с теоретическими предсказаниями [7] для ЭНМАО-режима.

С помощью туннельной спектроскопии ScS-контактов получена температурная зависимость сверхтока $I_c(T)$, соответствующая в первом приближении зависимости концентрации куперовских пар от температуры. Показано, что экспериментальные данные могут быть описаны формулой Амбегаокара-Баратова $I_c(T) \propto \Delta(T) \cdot \tanh[\Delta(T)/2k_B T]$ с использованием зависимости $\Delta(T)$, полученной напрямую методом ЭНМАО-спектроскопии.

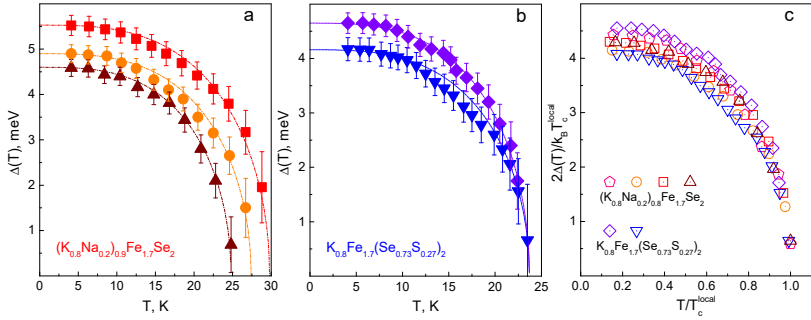


Рис. 1. Температурная зависимость единственной СП-щели в KNFS (a) и KFSS (b) по данным ЭНМАО-спектроскопии SnS-контактов с различными локальными T_c . (c) Нормированные зависимости $2\Delta(T)/k_B T_c^{\text{local}}$ от T/T_c^{local} по данным (a, b)

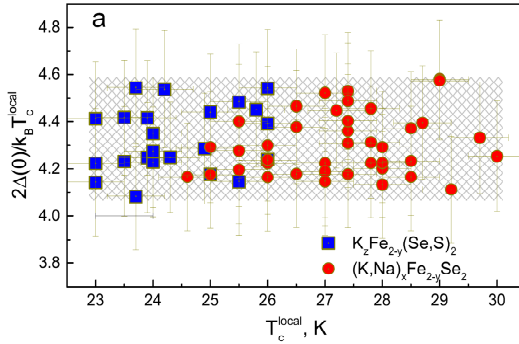


Рис. 2. Зависимость характеристического отношения $2\Delta(T)/k_B T_c^{\text{local}}$ от критической температуры T_c^{local} для KNFS (красные кружки) и KFSS (синие квадраты)

Полученные тремя способами данные ($\Delta(T)$, $I_{\text{exc}}(T)$, $I_c(T)$) говорят о согласованности результатов использованных спектроскопических методов и однозначно указывают на реализацию однощелевой сверхпроводимости исследованных ферроселенидов. Сходство СП-щелевой структуры и величины характеристического отношения позволяет сде-

лать вывод о реализации аналогичного механизма куперовского спаривания в исследованных материалах. Наблюдаемое постоянство характеристического отношения $2\Delta(0)/k_B T_c^{\text{local}}$, т.е. скейлинг $2\Delta(0)$ и T_c (рис. 2) указывает на единую эволюцию свойств СП-подсистемы селенидов KNFS и KFSS с критической температурой.

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

Список литературы

- [1] J. Guo, et al. // Phys. Rev. B **82**, 180520(R) (2010).
- [2] A. Krzton-Maziopa // Front. Chem. **9**, 640361 (2021).
- [3] P. Mangelis, et al. // Phys. Rev. B **100**, 094108 (2019).
- [4] Т.Е. Кузьмичева, et al. // J. Supercond. Novel. Magn. [принято в печать].
- [5] Т.Е. Кузьмичева и др. // Письма в ЖЭТФ [принято в печать].
- [6] С.А. Кузьмичев, Т.Е. Кузьмичев // Физ. низк. темп. **11**, 1284 (2016).
- [7] R. K  mmel, et al. // Phys. Rev. B **42**, 3992 (1990).

Формирование ферми-бозе смеси в допированном висмутате бария ВаВіО₃

А. П. Менушенков¹, М. Ю. Каган^{2,3}

¹*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,
г. Москва, Россия*

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

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

Результаты недавно проведенного нами эксперимента на Европейском рентгеновском лазере на свободных электронах EuXFEL по рентгеновской спектроскопии поглощения с временным разрешением на K -

крае поглощения кислорода в висмутате бария BaBiO_3 [1] не только дали прямое доказательство существования локального спаривания носителей заряда в основном состоянии BaBiO_3 , но также внесли новый импульс в развитие предложенной нами ранее модели образования пространственно-разделенной ферми-бозе смеси [2–4] при допировании BaBiO_3 как калием, так и свинцом. На основе анализа состояния локальной электронной структуры BaBiO_3 , возникающего при возбуждении резонансным лазерным импульсом через оптическую щель в конце первой пикосекунды на конечной стадии возбуждения [1] построена схема механизма диспропорционирования $\text{Bi}6s\text{--}O2p_{\sigma^*}$ -связи в гипотетическом соединении $\text{BaBi}^{4+}\text{O}_3$, реализуемого исключительно благодаря локальному спариванию электронов и дырок на верхней антисвязывающей $\text{Bi}6s\text{--}O2p_{\sigma^*}$ -орбитали соседних октаэдрических комплексов [5]. Показано, что именно спаривание носителей заряда является первопричиной совокупности аномальных свойств семейства висмутатов. Обсуждены свойства новых состояний системы в виде бозонного полупроводника и бозонного металла, в зависимости от степени допирования. Объяснена природа диэлектрического состояния и двух щелей — оптической и транспортной в висмутате бария BaBiO_3 и металлического состояния в плюмбате бария BaPbO_3 [5]. Рассмотрена возможность реализации как фононного (биполяронного), так и электронного механизма спаривания носителей заряда в висмутатах. Проведена аналогия с купратными ВТСП.

Список литературы

- [1] A.P. Menushenkov, A. Ivanov, V. Neverov, et al. // Phys. Rev. Research **6**, 023307 (2024).
- [2] A. P. Menushenkov, K. V. Klementev, A. V. Kuznetsov, and M. Y. Kagan // ЖЭТФ **120**, 700 (2001).
- [3] A. P. Menushenkov, K. V. Klementev, A. V. Kuznetsov, and M. Yu. Kagan // Physica B **312-313**, 31 (2002).
- [4] A. P. Menushenkov, A. V. Kuznetsov, K. V. Klementiev, and M. Y. Kagan // J. Supercond. Novel Magn. **29**, 701 (2016).
- [5] А.П. Менушенков // Письма в ЖЭТФ 2025, принята к публикации.

Туннельная спектроскопия пниктидов $\text{Na}(\text{Fe},\text{Co})\text{As}$ и $\text{Ba}(\text{Fe},\text{Ni})_2\text{As}_2$ с вариацией степени допирования в нормальном состоянии

И. А. Никитченков^{1,2}, С. А. Кузьмичев^{1,2}, К. С. Перваков²,
В. А. Власенко², И. В. Морозов⁴, А. И. Шилов², Е. О. Рахманов^{4,2},
А. Д. Ильина^{2,3}, Т. Е. Кузьмичева²

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

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

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

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

Соединения $\text{Ba}(\text{Fe},\text{Ni})_2\text{As}_2$ (структурного семейства 122) и $\text{Na}(\text{Fe},\text{Co})\text{As}$ (семейство 111) имеют схожую слоистую кристаллическую структуру, в которой сверхпроводящие (СП) блоки FeAs чередуются с плоскостями Ba или Na в c -направлении. В стехиометрическом составе оба соединения имеют дальний антиферромагнитный порядок. При электронном допировании антиферромагнетизм постепенно подавляется и возникает сверхпроводящая фаза, образующая «колокол», с максимальной критической температурой $T_c \approx 21$ К и 22 К для $\text{Ba}(\text{Fe},\text{Ni})_2\text{As}_2$ и $\text{Na}(\text{Fe},\text{Co})\text{As}$ соответственно [1, 8]. В отличие от структурного семейства 122, в 111-пниктидах сверхпроводимость с малой T_c обнаруживается уже для стехиометрического состава NaFeAs . На поверхности Ферми обоих соединений присутствуют дырочные зоны около Γ -точки зоны Бриллюэна и электронные цилиндры около M -точки; последние часто рассматривают как единую эффективную электронную зону.

Мы исследовали монокристаллы $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ недо- и передопированных составов с $x = 0.06\text{--}0.14$ и T_c в диапазоне 12–21 К, а также монокристаллы номинального недодопированного состава $\text{NaFe}_{0.979}\text{Co}_{0.021}\text{As}$ с $T_c \approx 22$ К. В образцах при $T = 4.2$ К с помощью техники «break-junction» [2] создавались контакты на микротрещине типа сверхпроводник-барьер-сверхпроводник (ScS) с режимом пролета квазичастиц, близком

к баллистическому. Целью работы являлось исследование особенностей вольтамперных характеристик (ВАХ) и спектров динамической проводимости $dI(V)/dV$ контактов в сверхпроводящем и нормальном состоянии.

Ниже T_c наблюдался эффект некогерентных многократных андреевских отражений (IMARE), вызывающий избыточный ток при любых смещениях eV , а также появление повышенной андреевской проводимости при нулевом смещении и щелевых минимумов при любых температурах вплоть до T_c [3]. При этом на ВАХ и $dI(V)/dV$ наблюдалась не относящаяся к эффекту IMARE нелинейность, проявляющаяся как в СП, так и в нормальном состоянии.

В $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$ типичная форма нелинейности $dI(V)/dV$ приведена на рис. 1а. Положения особенностей и форма нелинейности $dI(V)/dV$ -спектров практически не зависят от температуры в диапазоне 4.3–50 К. Формы особенностей схожи при различной степени электронного допирования и T_c . Однако, при движении вдоль фазовой диаграммы меняются энергетические положения особенностей нелинейности на $dI(V)/dV$. В передопированных составах (при удалении от АФМ и нематической фазы) положения V_{max} , V_{min} уменьшаются, при этом линейная экстраполяция в сторону увеличения степени замещения x предсказывает исчезновение данных особенностей и линеаризацию $dI(V)/dV$ -спектра туннельного контакта в сильно передопированном несверхпроводящем составе при $x \approx 0.22$ [4]. Учитывая, что согласно нашим данным отношение $2\Delta_L^{out}(0)/kT_c \approx 6$ сохраняется в исследуемой области допирования примерно постоянным, поведение особенностей нормального состояния оказывается не связанным напрямую со сверхпроводящими свойствами исследуемого соединения.

На $dI(V)/dV$ -спектрах нормального состояния в $NaFe_{0.979}Co_{0.021}As$ наблюдаются минимумы при смещении $V_1^* \approx 26.6$ мВ, $V_2^* \approx 21.2$ мВ, обозначенные на рис. 1б стрелками. В отличие от $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$, нелинейность в 111-пниктиде содержит пик $dI(V)/dV$ при малых смещениях eV . Для соединений $Na(Fe,Co)As$ передопированного состава нелинейность спектров не наблюдалась.

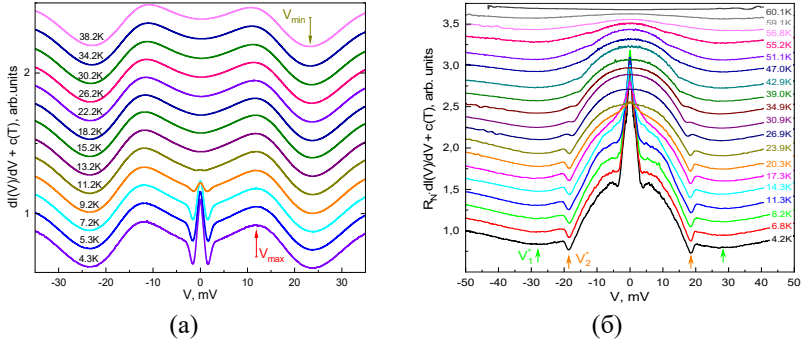


Рис. 1. а) Спектр динамической проводимости SNS-контакта в образце $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ номинального состава $x = 0.14$, измеренный при температурах $4.3 \text{ K} \leq T \leq 38.2 \text{ K}$. Локальная критическая температура контакта $T_c^{\text{local}} \approx 13.2 \text{ K}$ б) $dI(V)/dV$ -спектр SNS-контакта $\text{NaFe}_{0.979}\text{Co}_{0.021}\text{As}$, измеренный при температурах $4.2 \text{ K} \leq T \leq 60.1 \text{ K}$ в сверхпроводящем и нормальном состоянии. Локальная критическая температура контакта $T_c^{\text{local}} \approx 22 \text{ K}$. Спектры (a,b) вручную сдвинуты по вертикали для удобства. Стрелками отмечено положение характерных особенностей остаточной нелинейности $dI(V)/dV$ -спектра, не связанной напрямую со СП-свойствами: максимума $V_{\text{max}} \approx 12.0 \text{ mV}$ и минимума $V_{\text{min}} \approx 23.6 \text{ mV}$ для $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ (a); минимумов $V_1^* \approx 28.8 \text{ mV}$, $V_2^* \approx 18.8 \text{ mV}$ в случае $\text{NaFe}_{0.979}\text{Co}_{0.021}\text{As}$ (b)

Данные особенности нормального состояния воспроизводятся для всех исследованных контактов различного нормального сопротивления R_n и не могут быть объяснены перегревом контактной области при протекании измерительного тока. Нами показано, что нелинейная форма $dI(V)/dV$ -спектров не может быть вызвана геометрическими резонансами или структурой конкретного монокристалла (например, образованием двойников), а имеет, напротив, объемную природу, обусловленную внутренними свойствами материала [4].

Известно, что спектр туннельного NcN-контакта (N – нормальный металл) определяется плотностью электронных состояний $N(E)$ вблизи уровня Ферми [5]. Наблюдаемый эффект может быть обусловлен особенностями плотности электронных состояний $N(E_F) \neq \text{const}$ вблизи уровня Ферми вследствие топологии зонной структуры в 122-/111-

пниктидах, наличия нематических флуктуаций и связанного с этим энергетического расщепления зон, образованных d_{xz}/d_{yz} -орбиталями железа [6], или перенормировки $N(E)$ на взаимодействие с характерными бозонными модами [7].

Работа выполнена в рамках проекта РНФ 22-72-10082.

Список литературы

- [1] Xingye Lu. Phase Diagram and Magnetic Excitations of $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$: A Neutron Scattering Study.— Springer Theses, 2017.
- [2] Кузьмичев С.А., Кузьмичева Т.Е. // Физика низких температур. 2016. Т. 42. № 11. С. 1284–1310.
- [3] Kuemmel R. [et al.] // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 42. P. 3992.
- [4] И.А. Никитченков, С.А. Кузьмичев, А.Д. Ильина [et al.] // ЖЭТФ. 2024. Т. 166. С. 834.
- [5] Giaever I., Megerle K. // Phys. Rev. 1961. Vol. 112. P. 1101.
- [6] T. Shimojima, T. Sonobe, W. Malaeb, [et al.] // Phys. Rev. B. 2014. V. 89, P. 045101.
- [7] Свистунов В. М., Белоголовский М. А., Черняк О. И. // Успехи физических наук. 1987. Т. 151. С. 31.
- [8] Кузьмичева Т. Е., Кузьмичев С. А. // Письма в ЖЭТФ. 2021. Т. 114, С. 685.

Дорожная карта поиска новых исходных соединений для изготовления высокотемпературных сверхпроводников

В. Г. Орлов^{1,2}, Г. С. Сергеев¹

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

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

Несмотря на 39-летний срок, прошедший со времени открытия высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) [1], вопрос о механизме

ее возникновения по-прежнему является дискуссионным [2]. Наличие магнитных атомов в ВТСП, а также близость кристаллической структуры ВТСП к перовскитной позволили делать предположения о связи сверхпроводимости с антиферромагнетизмом [3] и сегнетоэлектричеством [4]. Тем самым, вопрос о специфических физических свойствах исходных для получения ВТСП соединений имеет существенное значение для выяснения механизма возникновения ВТСП.

В наших работах [5–7] на примерах соединений $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$, La_2CuO_4 и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ были выявлены два общих физических свойства, которые могут стимулировать появление сверхпроводимости при фазовом переходе полупроводник-металл, происходящем в результате допирования ($\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$, $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{BiO}_3$) или формирования соединения типа $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$.

В качестве первого свойства можно назвать специфический механизм химической связи, который присутствует не только в исходных соединениях, но и в самих ВТСП [5–7]. Данный механизм характеризуется количеством критических точек типа bond (bond critical points (BCPs)) [8–10] в распределении зарядовой плотности, приходящихся на неэквивалентные атомы в элементарной ячейке соединения, которое значительно превышает число валентных электронов в атомах. При этом Лапласиан зарядовой плотности $\nabla^2\rho_b$ для всех BCPs имеет положительный знак, свидетельствующий об отсутствии ковалентной связи и о выталкивании зарядовой плотности из областей вблизи BCPs [8–10]. Имеется еще один параметр, определяющий тип химической связи – параметр пологости $f = \rho_c^{\min} / \rho_b^{\max}$, равный отношению зарядовой плотности в критической точке типа cage [8–10] с наименьшей зарядовой плотностью к зарядовой плотности в BCP с ее максимальным значением. Параметр f , выраженный в %, характеризует степень однородности распределения зарядовой плотности в кристалле. Для $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$, La_2CuO_4 и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ значения f равны нескольким % [5–7], в то время как у щелочных металлов величина f близка к 100% [8–10]. В работе [7] для сравнения с параметрами BCPs соединения $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ были приведены вычисленные нами параметры BCPs, как для известных сверхпроводников Nb и Nb_3Sn , исполь-

зуемых в технической сверхпроводимости, так и для сверхпроводников с высокими значениями температур сверхпроводящего перехода MgB_2 и H_3S , которые считаются обычными («conventional») сверхпроводниками. Оказалось, что у Nb тип химической связи близок к металлическому (параметр $f = 70.4\%$). Степень металличности типа химической связи у Nb_3Sn меньше ($f = 40\%$), чем у Nb. У MgB_2 и H_3S , наряду с BCPs, имеющими частично металлический тип химической связи, имеются также BCPs с сильно выраженным ковалентным типом химической связи между атомами B-B и S-H, соответственно. Тем самым, было показано, что у исходных для получения ВТСП соединений и у самих ВТСП тип химической связи действительно специфический. Следует отметить также обнаруженную нами [5] корреляцию между величиной Лапласиана зарядовой плотности в BCP с наибольшим значением ρ_b и критической температурой T_c ВТСП.

В качестве второго, общего для $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$, La_2CuO_4 и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ свойства, можно назвать особенность симметрии их кристаллической структуры, выражающуюся в существовании магнитных кристаллических классов, допускающих наличие у соединений линейного магнитоэлектрического эффекта (ЛМЭЭ) [11]. Обнаружение ЛМЭЭ в $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$, а также парамагнетизма, зависящего от магнитной предыстории образца [12], было интерпретировано в [12] 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. В работе [12] для моноклинной симметрии $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$ (пространственная группа $P2_1/c$, C_{2h}^5 № 14 [13]) были найдены магнитные кристаллические классы $C_{2h}(C_2)$ и $C_{2h}(C_s)$ [11], допускающие наличие ЛМЭЭ в оксиде висмута. В работе [7] для орторомбического La_2CuO_4 (пространственная группа $Cmce$, D_{2h}^{18} №64 [13]) и тетрагонального $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ (пространственная группа $P4/mmm$, D_{4h}^1 № 123 [13]) были определены магнитные кристаллические классы, допускающие наличие ЛМЭЭ [11], соответственно, $D_{2h}(D_2)$, $D_{2h}(C_{2v})$ для La_2CuO_4 и $D_{4h}(D_{2d})$, $D_{4h}(D_4)$, $D_{4h}(C_{4v})$ для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$. К сожалению, в научной литературе отсутствуют экспериментальные данные измерений магнитоэлектрических

свойств у образцов соединений La_2CuO_4 и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ со стехиометрическими составами. Однако, имеется ряд экспериментальных свидетельств наличия магнитоэлектрических явлений в близких к стехиометрическим образцах. Например, у соединений $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ был обнаружен [14, 15] пирозлектрический эффект: кратковременное нагревание монокристалла лазерным излучением вызывало появление переходной разности потенциалов V_p при включении и выключении лазера. Существенно, что при охлаждении образца $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.9}$ от комнатной температуры, пирозлектрический эффект несколько раз менял знак и исчезал при температурах ниже температуры сверхпроводящего перехода $T_c \sim 90$ К.

В работе [7] было высказано предположение о возможной термодинамической невыгодности одновременного существования локальных магнитных полей и электрической поляризации в исходных для получения ВТСП образцах полупроводниковых соединений с разрешенным ЛМЭЭ. При допировании исходного соединения и реализации фазового перехода полупроводник-металл в металлической фазе может возникнуть сверхпроводящее состояние, в результате чего магнитный поток вытолкнется из образца, а электрическая поляризация станет равной нулю.

На основе анализа свойств соединений $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$, La_2CuO_4 и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ в [7] была предложена последовательность действий (дорожная карта) поиска новых исходных соединений для получения ВТСП:

1. Провести поиск полупроводников со значениями полупроводниковой щели, не превосходящими 2–3 эВ, таких, которые или содержат магнитные атомы, или имеют диэлектрические аномалии в области температур значительно выше комнатной температуры.

2. Отобрать те из них, у которых имеются магнитные кристаллические классы, допускающие наличие ЛМЭЭ в них [11].

3. Провести расчеты электронной зонной структуры для отобранных соединений и найти распределение зарядовой плотности в них.

4. Найти ВСПs в распределении зарядовой плотности в элементарной ячейке кристаллов, найти их параметры и определить тип химической связи в исследованных соединениях.

5. Если тип химической связи в веществе аналогичен тому, который выявлен у известных исходных для получения ВТСП соединений, и значение Лапласиана зарядовой плотности в ВСП с наибольшим значением зарядовой плотности достаточно велико, то для данного вещества необходимо, либо подобрать допирующие атомы *n*- или *p*- типа для осуществления перехода полупроводник-металл, либо на основе исходного соединения синтезировать новое соединение, обладающее металлическими свойствами. Желательно при этом не допустить изменения симметрии конечного соединения, нарушающего условия существования ЛМЭЭ в нем.

6. Провести измерение температурной зависимости электрической проводимости или магнитной восприимчивости полученного образца с металлическими свойствами для выявления наличия у него сверхпроводимости.

В качестве класса веществ, перспективного для поиска новых исходных для получения ВТСП соединений, в [7] были названы вещества с гигантским ЛМЭЭ типа TbPO_4 [16], для которых максимальные значения тензора магнитоэлектрической связи α_{ij} значительно превышают соответствующие значения для классического магнитоэлектрика Cr_2O_3 [17].

Список литературы

- [1] J.G. Bednorz, K.A. Müller. Z. Phys. B 64, 180 (1986).
- [2] X. Zhou, W.-S. Lee, M. Imada, N. Trivedi, P. Phillips, H.-Y. Kee, P. Törmä, M. Eremets. Nat. Rev. Phys. 3, 462 (2021).
- [3] S. A. Kivelson, G. Aeppli, V.J. Emery. PNAS 98, 11903 (2001).
- [4] A. Bussmann-Holder, A. Simon, H. Büttner. Phys. Rev. B 39, 207 (1989).
- [5] V.G. Orlov, G.S. Sergeev. Physica B 536, 839 (2018).
- [6] В.Г. Орлов, Г.С. Сергеев. ЖЭТФ 164, 107 (2023).
- [7] V.G. Orlov, G.S. Sergeev. J. Supercond. Nov. Magn. 38, 61 (2025).
- [8] R. F. W. Bader, Atoms in Molecules: A Quantum Theory. International Series of Monographs on Chemistry 22. Oxford Science Publications, Oxford (1990).
- [9] C. Gatti. Z. Kristallogr. 220, 399 (2005).

- [10] Ed. By C.F. Matta, R.J. Royd. The Quantum Theory of Atoms in Molecules. From Solid State to DNA and Drug Design. WILEY-VCH, Verlag GmbH&Co. KGaA, Weinheim (2007).
- [11] A.S. Borovik-Romanov, H. Grimmer. Chapter 1.5. Magnetic properties, p. 105, International Tables for Crystallography, Vol. D. International Union of Crystallography (2006).
- [12] V.I. Nizhankovskii, A.I. Kharkovskii, V.G. Orlov. Ferroelectrics 279, 157 (2002).
- [13] Ed. T. Hahn. International Tables for Crystallography. Volume A: Space-Group Symmetry (2005).
- [14] D. Mihailović, I. Poberaj. Physica C 185-189, 781 (1991).
- [15] D. Mihailović, I. Poberaj, A. Mertelj. Phys. Rev. B 48, 16634 (1993).
- [16] G.T. Rado, J.M. Ferrari, W.G. Maisch. Phys. Rev. B 29, 4041 (1984).
- [17] Д.Н. Астров. ЖЭТФ 11, 708 (1960).

Андреевские генераторы терагерцевого излучения

Н. Т. Баграев¹, Л. Е. Клячкин¹, С. А. Кукушкин², А. М. Маляренко¹,
А. В. Осипов², В. В. Романов³, Н. И. Руль¹, К. Б. Таранец^{1,3}

¹*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,*

г. Санкт-Петербург, Россия

²*Институт проблем машиноведения РАН, г. Санкт-Петербург, Россия*

³*Санкт-Петербургский политехнический университет им. Петра Великого,*

г. Санкт-Петербург, Россия

Последние несколько лет интенсивно обсуждаются способы создания и исследования Андреевских молекулярных состояний. Андреевская молекула (АМ) представляет собой связанные состояния двух джозефсоновских барьеров, обеспечивающих, в свою очередь, создание Андреевских граничных состояний за счет многократного Андреевского отражения (МАО). В таком случае, спектр АМ меняется в зависимости от объекта исследования, сохраняя некоторые общие черты. Хотя Андреевское граничное состояние, возникающее в джозефсоновском переходе за счет

МАО, обусловлено наличием слева и справа сверхпроводящей щели, тем не менее функцию барьера, аналогичную сверхпроводящей щели, может выполнять не только сверхпроводник, но и любой потенциальный барьер, существующий в исследуемой структуре. Ключевая особенность такого состояния заключается в необходимости наличия связи двух барьеров, ограничивающих области квантовой интерференции одиночных носителей вследствие МАО. Более того, подавление электрон-электронного взаимодействия, которое способствует наблюдению интерференции носителей, является исключительно важным требованием, необходимым для наблюдения спектра АМ на вольт-амперных характеристиках (ВАХ) исследуемых образцов, что в настоящей работе достигается созданием оболочек АМ, состоящих из дипольных центров с отрицательной корреляционной энергией.

В работе впервые представлены оптические спектры МАО трех сэндвич структур – фторида кадмия, карбида кремния и кремния с краевыми каналами, ограниченными дипольными центрами бора с отрицательной корреляционной энергией [1]. Исследование ВАХ МАО и полевых зависимостей магнитной восприимчивости показали, что в краевых каналах образуется

система последовательных областей, «пиксел», с одиночными носителями, которые представляют собой разные версии АМ. На рисунке 1 представлен ИК-фурье спектр электролюминесценции (ЭЛ), позиции пиков которого взаимосвязаны с характеристиками МАО ($2\Delta/n$, где 2Δ — значение критической щели, определенное из ВАХ МАО 44 meV [1], и n — номер пика МАО). Спектры ЭЛ содержат расщепление Раби и гигагерцевые модуляции, обусловленные наличием микрорезонаторов, встроен-

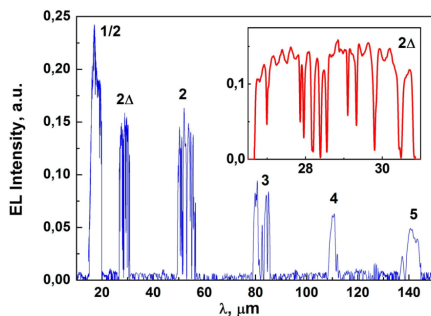


Рис. 1. Спектр электролюминесценции, индуцированной МАО из краевых каналов кремниевой наносандвич структуры

ных в краевые каналы. Таким образом, впервые демонстрируется экспериментальная версия Андреевского генератора многомодового терагерцевого излучения, которая не ограничивается параметрами зонной структуры материала.

Список литературы

- [1] N. T. Bagraev et al., Low Temperature Physics, **43**(1), 110-119 (2017).

Влияние динамического эффекта близости на магнитную динамику в гибридной структуре сверхпроводник / ферромагнитный диэлектрик

Я. В. Туркин¹, Н. Г. Пугач¹

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

Эффект близости со сверхпроводящим конденсатом способен оказывать значительное влияние на магнитную восприимчивость многослойных систем, состоящих из чередующихся слоев ферромагнитных диэлектриков и сверхпроводников, создавая неоднородную магнитную среду и изменяя спектр возбуждений намагниченности [1]. Возможность инжектирования бездиссипативных триплетных спиновых токов в сверхпроводниках и, наоборот, возможность управления возбуждениями намагниченности в ферромагнитных материалах при помощи сверхпроводящих спиновых токов, делает такие гибридные структуры перспективными кандидатами для создания элементной базы сверхпроводящей спинтроники и магноники. В данной работе исследуется влияние сверхпроводящего слоя на спектр магнитных возбуждений в соседнем слое ферромагнитного диэлектрика, показана зависимость магнитной восприимчивости двухслойной гибридной структуры от толщин сверхпроводящего и магнитного слоев, а также от силы эффекта близости и обменного взаимодействия

внутри магнетика. Показано появление дополнительных особенностей в спектре ФМР, а также исследована зависимость положения этих особенностей от вышеперечисленных параметров.

Для описания магнитной динамики в двухслойной гибридной структуре используется линеаризованное уравнение Ландау–Лифшица–Гильберта в частотной области. Влияние близости сверхпроводника на движение намагниченности учитывается при помощи граничных условий [2], описывающих обменное взаимодействие магнитных ионов ферромагнитного изолятора и спин-поляризованных электронов проводимости сверхпроводника на интерфейсе. Спиновый отклик сверхпроводника вычислен в рамках линеаризованного уравнения Узалея [3] с известными граничными условиями, соответствующими малому эффекту близости с ферромагнитным изолятором [4]. Полученные результаты могут быть использованы для оценки параметров наноструктур, планируемых к использованию в сверхпроводящей магнотонике [5].

Работа выполнена при поддержке проекта «Зеркальные лаборатории» НИУ ВШЭ и Башкирского государственного педагогического университета им. М. Акмуллы «Квантовые эффекты в низкоразмерных гибридных наноструктурах».

Список литературы

- [1] Turkin Y.V. Spin dynamics in superconductor/ferromagnetic insulator hybrid structures with precessing magnetization / Y.V. Turkin, N. Pugach // Beilstein J. Nanotechnol. 2023. 14. P. 233–239.
- [2] Гуревич А. Г., Мелков Г. А. Магнитные колебания и волны. — М.: Физматлит, 1994. — 432 с.
- [3] Brinkman, A., et al. Microscopic nonequilibrium theory of double-barrier Josephson junctions // Phys. Rev. B, 2003, v. 68, Iss. 22, p. 224513.
- [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.
- [5] Bobkova, I. V., et al. Magnon-cooperons in magnet-superconductor hybrids // Comm. Mat., 2022, 3, № 1.

Общие свойства обычных и высокотемпературных сверхпроводников

В. Р. Шагинян

ПИЯФ НИЦ КИ

Мы проанализировали общее поведение нетрадиционных сверхпроводников и обычных сверхпроводников и продемонстрировали, что как универсальное масштабирование энергии конденсации, так и модель квазичастиц одинаково применимы к обоим типам сверхпроводимости. Наше объяснение основано на общих свойствах сверхпроводников: квазичастицы Боголюбова действуют в обычных и нетрадиционных сверхпроводниках, в то время как соответствующая плоская зона высокотемпературного сверхпроводника только деформируется нетрадиционным сверхпроводящим состоянием, делая эффективную массу конечной. В результате нетрадиционное сверхпроводящее состояние становится традиционному сверхпроводящему состоянию (БКШ-подобным). Эти наблюдения предполагают, что в некоторых случаях нетрадиционное сверхпроводящее состояние можно считать аналогом состояния БКШ, как было предсказано в 2001 году. Отметим, что в нормальном состоянии нетрадиционные сверхпроводники демонстрируют поведение сопротивления пропорционально температуре T , в то время как традиционные имеют пропорциональность T^2 . Мы также рассмотрели сверхпроводящую электронную плотность обоих сверхпроводников и другие их особенности. Наши теоретические наблюдения хорошо согласуются с экспериментальными фактами, демонстрируя существование квазичастиц Боголюбова и универсальное поведение масштабированной энергии конденсации [1].

Список литературы

- [1] V. R. Shaginyan, A. Z. Msezane, and S.A. Artamonov, “General Properties of Conventional and High-Temperature Superconductors”. Crystals, **14**(9), 826 (2024). <https://doi.org/10.3390/cryst14090826>

2D- И 1D-СИСТЕМЫ. ЭКСИТОНЫ, ПОЛЯРИТОНЫ, ВЗП И ПРОЧЕЕ

Многочастичные сильно коррелированные квантовые состояния 2D-электронов в умеренном магнитном поле

П. С. Алексеев*, А. П. Дмитриев

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

**E-mail: pavel.alekseev@mail.ioffe.ru*

В последние годы интенсивно изучается гидродинамический режим транспорта 2D-электронов в сверхчистых наноструктурах на основе графена, квантовых ям и других материалов. Несмотря на успехи феноменологических теорий на основе уравнений Навье–Стокса для описания эффектов гидродинамического транспорта, остаются открытыми вопросы о микроскопической структуре 2D-электронной жидкости, о причинах её формирования, особенно, в пределе низких температур, когда её рассеяние подавлено.

Мы выполнили микроскопическое построение многочастичных коррелированных состояний 2D-электронов в умеренном магнитном поле B в пределе нулевой температуры. В качестве базисных функций невзаимодействующих электронов взяты одночастичные функции Ландау на верхнем, частично заполненном, уровне Ландау с номером n_F , $n_F \gg 1$, а также, на двух примыкающих к нему уровнях, $n_F \pm 1$, полностью пустом и полностью заполненном. Рассчитаны матричные элементы оператора ee -взаимодействия; они оказались осциллирующими и знакопеременными функциями 1D канонических импульсов k взаимодействующих электронов. Построено преобразование Боголюбова исходных одночастичных состояний, диагонализующее гамильтониан: многочастичные со-

стояния есть линейные комбинации пар одночастичных состояний с фиксированным суммарным каноническим импульсом k_1+k_2 . Полученные состояния отчасти похожи на многочастичные состояния электронов в модели сверхпроводника БКШ-Боголюбова, где фиксируется суммарный импульс пар скоррелированных электронов. Составлены и решены уравнения на параметры преобразования и на химический потенциал, который здесь критически зависит от силы взаимодействия и фактора n_F заполнения уровня n_F . Квазичастичные возбуждения одного типа ($\alpha > 1$) имеют энергии $\mathcal{E}_{\alpha k}$, близкие к циклотронной энергии $\hbar\omega_c$, при этом разброс этих энергий в зависимости от k мал, порядка произведения $r_s\hbar\omega_c$ параметра межэлектронного взаимодействия r_s , $r_s \ll 1$, на $\hbar\omega_c$ (рассматриваются умеренные B , когда $n_F r_s \gg 1$). Квазичастицы другого типа ($\alpha = 1$) имеют малые величины как щели (минимальные величины $\mathcal{E}_{\alpha k}$), так и разброса $\mathcal{E}_{\alpha k}$: обе величины порядка $r_s\hbar\omega_c$. Показано, что квазичастицы с малыми энергиями, $\mathcal{E}_{l,k}$, переносят преимущественно поток импульса (переносимый ими поток частиц относительно мал).

Оценка величины выигрыша энергии построенного коррелированного основного состояния сравнительно с энергий основного состояния невзаимодействующих электронов показывает, что возможно сосуществование изученных нами многочастичных состояний и ранее изученных многочастичных состояний в этой системе типа волна плотности [1].

Мы приводим аргументы в пользу того, что построенные многочастичные состояния могут в значительной степени сохранить свой вид и свойства при наличии в системе достаточно малого постоянного электрического поля, а также слабого беспорядка, приобретая при этом конечные времена релаксации. Это является возможным объяснением реализации гидродинамического режима транспорта электронов в пределе низких температур в чистых наноструктурах в умеренном магнитном поле.

Список литературы

- [1] A. A. Koulakov, M. M. Fogler, and B. I. Shklovskii, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 499 (1996).

Спектры пропускания и экситонные состояния в вискерах TiS_3

И. Г. Горлова^{1,*}, К. Н. Болдырев², Е. В. Мостовщикова³,
А. Н. Титов³, В. Я. Покровский¹

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

²*Институт спектроскопии РАН, Троицк, г. Москва, Россия*

³*Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения РАН,
г. Екатеринбург, Россия*

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

Большой интерес к исследованию оптических свойств слоистого квазиодномерного полупроводника TiS_3 с запрещенной зоной ~ 1 эВ связан с перспективами использования этого соединения в нано- и оптоэлектронике [1]. Вместе с тем, оптическая спектроскопия используется как эффективный метод анализа его электронной и фононной структуры. Спектры отражения и поглощения TiS_3 хорошо изучены, однако до настоящего времени все измерения проводились только вблизи комнатной температуры. В этой работе представлены спектры пропускания t инфракрасного (ИК) и видимого излучения монокристаллическими вискерами TiS_3 при разных поляризациях света в диапазоне температур от комнатной до гелиевой. Определены абсолютные значения коэффициента поглощения для вискеро́в.

В дальней ИК области в диапазоне частот $40\text{--}700\text{ см}^{-1}$ (энергия фотона $E = 5\text{--}90\text{ мэВ}$, длина волны $\lambda = 250\text{--}14\text{ мкм}$) в спектрах пропускания наблюдается ряд полос поглощения на оптически активных фонах. Кроме ранее отмечавшихся в литературе минимумов, связанных с фононами, обнаружены дополнительные неглубокие минимумы при частотах $\sim 250\text{ см}^{-1}$ и $\sim 375\text{ см}^{-1}$. Скорее всего, это — неизвестные ранее фононные моды. При понижении температуры от 300 до 10 К происходит сужение фононных полос и дополнительных минимумов и проявляется еще ряд слабых линий поглощения (рис. 1).

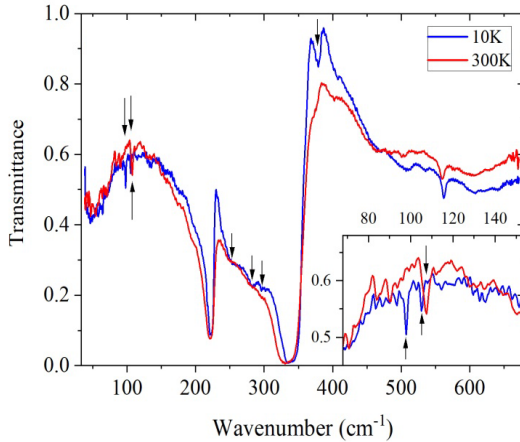


Рис. 1. Спектры пропускания монокристалла TiS_3 при $T = 300$ К и 10 К в неполяризованном свете. Вставка: фрагменты тех же спектров в области $70\text{--}150\text{ см}^{-1}$. Стрелками показаны линии поглощения, проявляющиеся при $T = 10$ К

На рис. 2 приведены спектры оптической плотности $D \equiv \ln(1/t)$ в ближней ИК области вблизи края фундаментального поглощения в диапазоне частот $3300\text{--}12000\text{ см}^{-1}$ ($E = 420\text{--}1500\text{ мэВ}$, $\lambda = 3\text{--}0.85\text{ мкм}$) при $T = 300$ К и $T = 5$ К в линейно поляризованном свете с электрическим полем $\mathbf{E}$, параллельным кристаллографическим осям $\mathbf{a}$ или $\mathbf{b}$. Видно, что понижение температуры приводит к сдвигу края поглощения в сторону бóльших энергий. При охлаждении от 300 К до 5 К запрещенная зона E_g возрастает примерно на 50 мэВ. Положение края поглощения, а также вид спектров оптической плотности зависят от направления поляризации света как при $T = 300$ К, так и при $T = 5$ К. Рост $D(E)$ для энергий выше края фундаментального поглощения происходит гораздо быстрее для поляризации параллельной металлическим цепочкам ($\mathbf{E}||\mathbf{b}$), чем для $\mathbf{E}||\mathbf{a}$. Спектры указывают на анизотропию оптической щели. При комнатной температуре мы оцениваем величину $E_g \approx 1\text{ эВ}$ при $\mathbf{E}||\mathbf{b}$, и $E_g = 1.4\text{--}1.5\text{ эВ}$ при $\mathbf{E}||\mathbf{a}$ [2]. Указание на анизотропию E_g можно заметить в ряде предыдущих работ, например в [3], однако авторы этих работ ее не обсуждают.

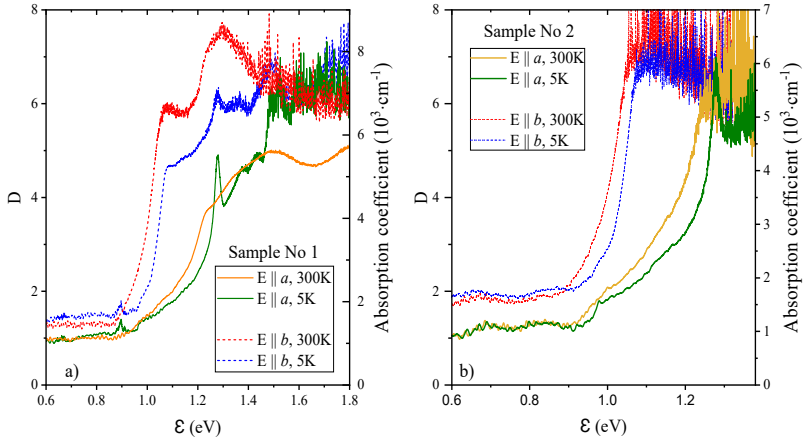


Рис. 2. Спектры оптической плотности образца №1 толщиной $d = 7 \pm 1$ мкм (а) и образца № 2 $d = 9 \pm 0.5$ мкм (b) при разных направлениях поляризации при $T = 300$ К и $T = 5$ К. На правых осях приведены соответствующие значения коэффициента поглощения

Ниже ~ 150 К обнаружен пик поглощения с энергией 1.28 эВ (рис. 2), который можно объяснить возбуждением экситонов [2]. Пик четко формируется при 120 К, а его интенсивность зависит от направления поляризации и определяется проекцией $\mathbf{E}$ на ось $\mathbf{a}$. Небольшой максимум при 1.28 эВ, заметный на рис. 2а при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$, связан, скорее всего, с неидеальной ориентацией образца № 1 относительно $\mathbf{E}$. На других образцах пик при поляризации $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$ полностью исчезает (рис. 2б). Возбуждение экситонов только при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$ можно объяснить тем, что при такой поляризации связанные электрон и дырка находятся на разных проводящих цепочках. В этом случае для рекомбинации электрона и дырки требуется преодоление барьера, поэтому такое состояние устойчивее, чем в случае возбуждения экситона на одной цепочке. С появлением экситонных состояний может быть связана нелинейная проводимость, которая наблюдается в TiS_3 при $T < 100$ К [4].

Список литературы

- [1] J.O. Island, A.J. Molina-Mendoza, M. Barawi, R. Biele, E. Flores, J.M. Clamagirand, J.R. Ares, C. Sanchez, H.S.J. van der Zant, R. D'Agosta, I.J.Ferrer, and A. Castellanos-Gomez, *2D Mater.*, **4**, 022003 (2017).
- [2] К.Н. Болдырев, А.Н. Титов, В.Я. Покровский, И.Г. Горлова *Письма в ЖЭТФ*, **120**, 590 (2024).
- [3] J.O. Island, R. Biele, M. Barawi, J.M. Clamagirand, J.R. Ares, C. Sanchez, H. S. J. van der Zant, I. J. Ferrer, R. D'Agosta, and A. Castellanos-Gomez, *Sci. Rep.*, **6**, 22214 (2016).
- [4] И.Г. Горлова, С.Г. Зыбцев, В.Я. Покровский, *Письма в ЖЭТФ*, **100**, 281 (2014).

Конкуренция волны зарядовой плотности и сверхпроводимости

П. Д. Григорьев^{1,2,*}, А. В. Цветкова², В. Д. Кочев²,
С. С. Сеидов², Я. И. Родионов^{2,3}

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

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

³*Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН,
г. Москва, Россия*

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

Взаимодействие волны зарядовой плотности (ВЗП) и сверхпроводимости изучается очень давно и является типичной для сильно анизотропных соединений [1]. Обе эти электронные неустойчивости создают энергетическую щель в электронном спектре на уровне Ферми, а значит должны мешать друг другу. Однако электрон-электронное взаимодействие в куперовском канале может усиливаться из-за Пайерлсовской неустойчивости [1-3], и тогда ВЗП увеличивает критическую температуру T_c сверхпроводимости, особенно вблизи точки фазового перехода ВЗП —

нормальный металл, как это наблюдается в купратах и других ВТСП, в дихалкогенидах переходных металлов, органических металлах и многих других соединениях. Тем не менее, это усиление e - e взаимодействия в куперовском канале сильно только для волновых векторов близких к вектору ВЗП. Поэтому ожидаемое уменьшение плотности состояний на уровне Ферми из-за щели ВЗП, даже частично покрывающей поверхность Ферми, на первый взгляд должно с запасом перевешивать эту перенормировку e - e взаимодействия и приводить к экспоненциальному уменьшению T_c сверхпроводимости. В нашей работе показано, что уменьшение плотности состояний на уровне Ферми из-за щели ВЗП оказывается сильно меньше ожидаемого и не приводит к экспоненциальному уменьшению T_c сверхпроводимости.

Мы изучаем ВЗП с неидеальным нестингом, когда щель ВЗП покрывает только часть поверхности Ферми (ПФ), оставляя карманы ПФ для сверхпроводимости. Вычислена перенормировка электронного спектра и плотности состояний (рис. 1а) из-за ВЗП в зависимости от степени неидеальности нестинга в слоистых квазиодномерных металлах с законом дисперсии

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = v_F(|k_x| - k_F) - 2t_y \cos(bk_y) - 2t'_y \cos(2bk_y),$$

а также соответствующее подавление температуры T_c сверхпроводящего перехода без учета перенормировки e - e взаимодействия в куперовском канале (рис. 1b). Видно, что даже в этом случае уменьшение T_c не экспоненциальное, а степенное.

Кроме этого, найдены коэффициенты функционала Гинзбурга–Ландау с двумя параметрами порядка для таких соединений и на его основе исследована фазовая диаграмма, в частности тип фазового перехода [5], что продолжает нашу работу [6].

Также получена [4] температурная зависимость сопротивления в широком интервале, включающем ВЗП переход (см. рис. 2). Объяснено, почему несмотря на то, что при ВЗП переходе большая часть поверхности Ферми оказывается покрыта щелью, увеличение сопротивления ниже перехода в ВЗП оказывается малым, намного меньше чем закрытая щелью доля поверхности Ферми. Это связано с тем, что уменьшение

числа свободных электронов вблизи уровня Ферми компенсируется увеличением их длины свободного пробега, возникающего уже в борновском приближении из-за уменьшения их плотности состояний.

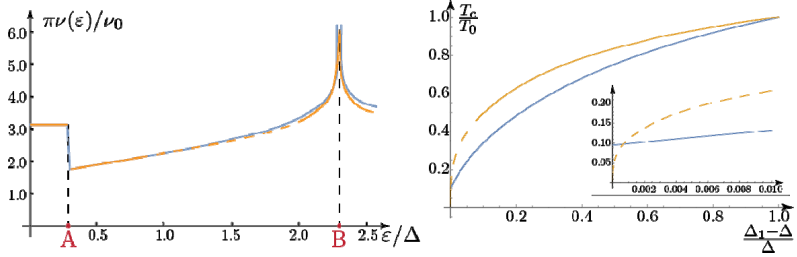


Рис. 1. (а) Плотность электронных состояний ν вблизи уровня Ферми в металлах в состоянии с ВЗП с неидеальным нестингом. На уровне Ферми до точки А (где энергия $\epsilon = \Delta_1 - \Delta$) плотность состояний ν в присутствии ВЗП совпадает с ν в металлической фазе без ВЗП. В точке В (где энергия $\epsilon = \Delta_1 + \Delta$) возникает логарифмическая расходимость плотности состояний, напоминающая сингулярность в модели БКШ. (б) Критическая температура T_c сверхпроводящего перехода на фоне ВЗП в зависимости от параметра антинестинга $\Delta_1 = 2t'_y$, вычисленная аналитически и численно. Здесь T_0 — критическая температура в отсутствии ВЗП, Δ — щель ВЗП

А.В.Ц. и В.Д.К. благодарят фонд развития теоретической физики и математики «БАЗИС», грант № 22-1-1-24-1, и грант K2-2022-025 НИТУ «МИСиС» программы «Приоритет 2030».

Список литературы

- [1] A. M. Gabovich, A. I. Voitenko, and M. Ausloos, Phys. Rep. 367(6),583–709 (2002).
- [2] Y. Tanaka and K. Kuroki, Phys. Rev. B 70, 060502 (2004).
- [3] Yuxuan Wang and Andrey Chubukov, Phys. Rev. B 88, 024516 (2013).
- [4] A. V. Tsvetkova, Ya. I. Rodionov, and P. D. Grigoriev, arXiv:2501.00341 (sent to PRB).
- [5] V.D. Kochev, S.S. Seidov, P.D. Grigoriev, to be published.
- [6] S.S. Seidov, V.D. Kochev, P.D. Grigoriev, Phys. Rev. B 108, 125123 (2023).

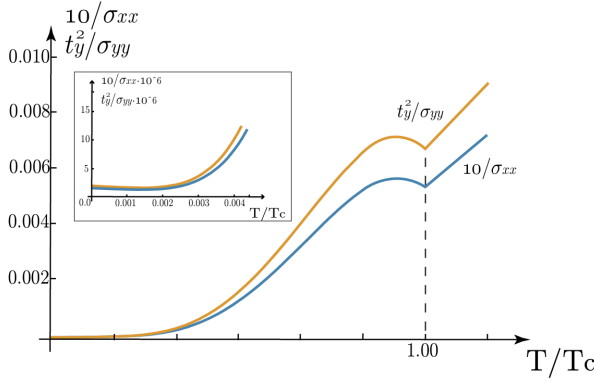


Рис. 2. Температурная зависимость сопротивления $R = 1/\sigma$ вдоль двух главных осей кристалла в проводящей плоскости x – y . Увеличение сопротивления ниже T_{CDW} заметно, но оно значительно меньше, чем сокращение поверхности Ферми (ПФ) из-за щели ВЗП. Сопротивление увеличивается не из-за уменьшения плотности состояний вблизи уровня Ферми благодаря щели ВЗП, которая при неидеальном нестинге покрывает только часть ПФ, а из-за перенормировки электронного спектра, уменьшающей средний квадрат скорости квазичастиц вблизи уровня Ферми

Интерфейсные электронные состояния на стыке атомных цепочек

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

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

²НИУ ВШЭ, г. Москва, Россия

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

Рассматриваются электронные состояния на стыке двух атомных цепочек в рамках метода сильной связи в приближении ближайших соседей и теории функционала плотности (DFT). Рассматриваемые систе-

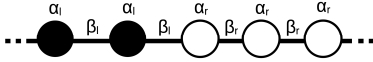


Рис. 1. Схематическое изображение рассматриваемого стыка цепочек

мы могут быть реализованы экспериментально, например, в атомных цепочках [1] или нанофотонике [2].

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.

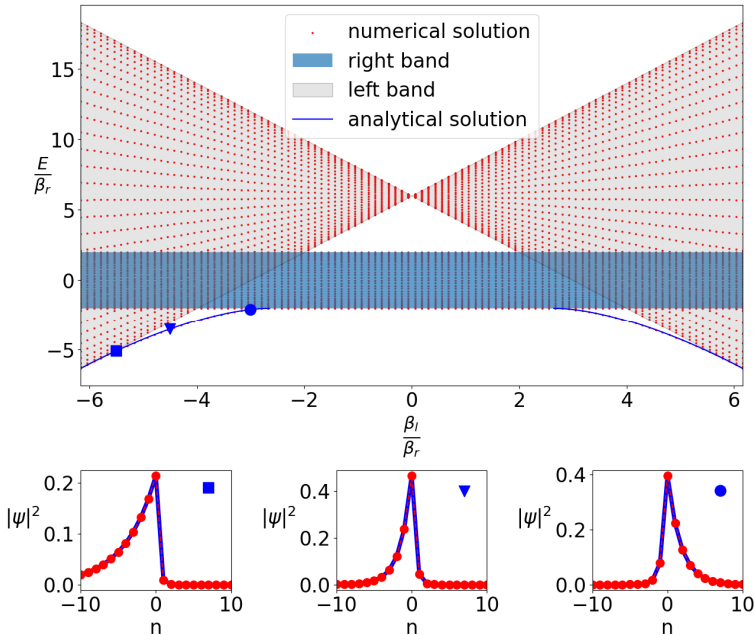


Рис. 2. Энергетический спектр цепочек, локализованное состояние и его волновые функции в однозонном приближении. Для численных расчетов полное число атомов $N = 200$, $\frac{\alpha_r}{\beta_r} = 0$, $\frac{\alpha_l}{\beta_r} = 6$, n — номер атома в цепочке

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.

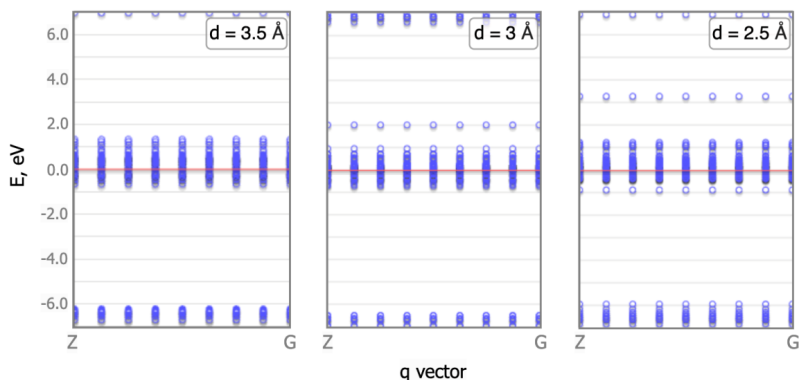


Рис. 3. Зонная структура двух цепочек атомов Si и C при разных расстояниях d между цепочками, рассчитанная в рамках теории функционала плотности.

На левой вставке интерфейсные состояния отсутствуют. На средней и правой вставке интерфейсные состояния расположены в интервале энергий от 2 до 4 эВ

В качестве примеры мы рассмотрели стык состоящая цепочек атомов кремния и углерода в рамках DFT. Межатомное расстояние в цепочке кремния $d_{\text{Si}} = 4.5 \text{ \AA}$, в цепочке углерода $d_{\text{C}} = 4.2 \text{ \AA}$. На рис. 3 изображены зонные структуры цепочек с разными расстояниями между атомами углерода и кремния на интерфейсе d . При уменьшении d увеличивается перекрытие волновых функций электронов атомов кремния

и углерода. При $d = 3.5 \text{ \AA}$ интерфейсные состояния еще не существуют. При дальнейшем уменьшении d от 3.5 до 2.5 $\text{\AA}$ энергия интерфейсного состояния возрастает приблизительно от 1.5 до 3.3 эВ относительно энергии Ферми. Таким образом, результаты, полученные в модели сильной связи и в рамках DFT качественно согласуются.

Список литературы

- [1] M.N. Huda, S. Kezilebieke, T. Ojanen, R. Drost, P. Liljeroth // *Npj Quantum Materials*. 2020. V. 5. P. 17.
- [2] Moritake Y., Ono M., Notomi M. // *Nanophotonics*. 2022. V. 11. P. 2183.

Конверсия тока ВЗП на микроконтактах $\text{NbS}_3\text{--NbS}_3$

С. Г. Зыбцев

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

Моноклинный политип NbS_3 примечателен тем, что в нём волны зарядовой плотности (ВЗП-1 и ВЗП-0) существует при комнатной температуре. Скольжение ВЗП-1 характеризуется высокой когерентностью, наблюдаются ступеньки Шапиро (СШ) с высокой степенью синхронизации [1]. Все исследования можно проводить при комнатной температуре, что намного упрощает эксперименты, особенно — подачу ВЧ поля.

Были исследованы структуры типа «крест», состоящие из двух вискеро NbS_3 , наложенных друг на друга в виде креста, т. е. структура типа ВЗП-контакт-ВЗП, позволяющая измерять контактное сопротивление между вискерами, которое мерялось 4-х контактным способом, пропуская ток через контакты 1-2 и измеряя напряжение на контактах 3-4 (см. вставку на рис. 1). При облучении внешним ВЧ полем на таких структурах кроме объемных ступенек Шапиро возникали СШ от контакта (черная кривая, рис. 1). Также было обнаружено необычное явление: пропуская ток через плечи двух вискеро, толстого и тонкого и контакт

(1-0-3, фиолетовая кривая, рис. 1) возникают СШ только от тонкого вискера. СШ от толстого вискера отсутствовали.

Легко предположить, что эффект может быть объяснен шнурованием нелинейного тока: нелинейный ток, выходя из тонкого в толстый вискер, протекает в том же сечении. В этом случае СШ в тонком и толстом вискере были бы при одинаковых токах ВЗП. На рис. 1 показаны двухконтактные зависимости дифференциальной проводимости σ от тока (ниже – ВАХ) для обоих вискеров (1-2 и 4-3) и через контакт (1-3) при воздействии ВЧ $f = 10$ МГц. Видно, что кривая 1-3 приблизительно является полусуммой кривых 1-2 и 4-3. Чётко видно, что на кривой 1-3 различимы два порога, которые соответствуют порогам кривых 1-2 и 4-3. Пороговые токи пропорциональны сечению образца. Таким образом, никакого шнурования не происходит. Есть еще вариант, что ВЧ поле не проходит в толстый образец, а проходит только в тонкий.

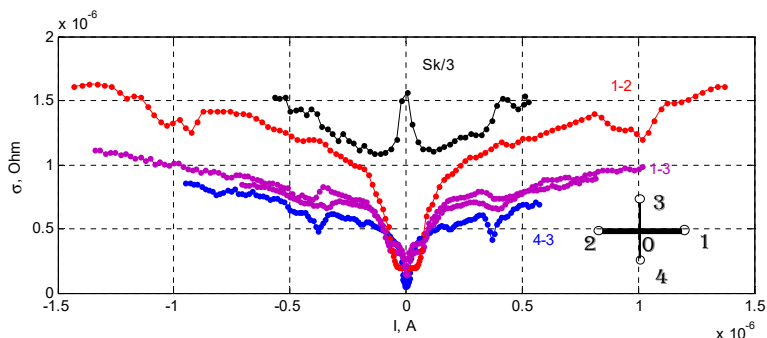


Рис. 1. Зависимости дифференциальных проводимостей от тока для структуры из вискеров NbS_3 типа крест при облучении ВЧ 10 МГц, конфигурация креста показана справа внизу. 1,2,3,4 — это контакты к вискерам, 0 — контакт между вискерами

Итак, два порога на кривой 1-3 соответствуют порогам от вискеров 1-2 и 4-3. На кривых 1-2 и 4-3 четко видны СШ. Тогда и на кривой 1-3 также должны быть видны две системы СШ. Но видны только СШ от тонкого вискера 4-3. СШ могут быть подавлены в случае, если дефектен

сам вискер. Но и это не проходит, т. к. ВАХ вискера 1-2 имеет резкие пороги, высокую нелинейность и четкие СШ.

Процесс конверсии квазичастиц из контакта в ВЗП и обратно может происходить через процесс проскальзывания фазы (ПФ). В достаточно общей модели (см., например, [2]) ПФ происходит через расширение или схлопывание дислокационных петель в электронном кристалле, каковым является ВЗП. Такие дислокации движутся через все сечение кристалла поперек цепочек ВЗП с определенной частотой, обеспечивая конверсию квазичастичного тока в ток ВЗП. Это подтверждается особой формой СШ на ВАХ контакта (черная кривая на рис. 1). Видно, что СШ перевернуты (вместо провалов — пики σ) в отличие от объемных СШ. Это может быть связано с подавлением поперечной проводимости при движении ВЗП, что было подтверждено экспериментально и теоретически в работах [3, 4]. Соответственно, в режиме синхронизации, аналогичному состоянию неподвижной ВЗП, поперечная проводимость на СШ возрастает. Для определенного материала скорость дислокаций постоянна. Тогда для толстого кристалла время конверсии будет больше, чем для тонкого. Соответственно и частота ПФ для тонкого будет выше — та же самая фундаментальная частота, как и для объема. Очевидно, для кристалла с когерентной ВЗП и с качественными контактами эти частоты должны совпадать, как показано на рис. 1 (СШ от контакта, черная кривая, и вискера 4-3 совпадают). Экспериментально это должно проявляться в высокой степени синхронизации ВЗП в области СШ и высокочастотной узкополосной генерации. Рассогласование этих частот, вероятно, должно привести к подавлению как СШ, так и узкополосной генерации.

Если барьер между двумя ВЗП достаточно тонкий, то процесс ПФ может переходить из одного кристалла с ВЗП в другой (конечно не сам ПФ, это просто дефект в электронном кристалле), т. е. цепочки ВЗП в обоих кристаллах обмениваются квазичастицами через процесс ПФ. Тогда движение ВЗП в тонком кристалле и ПФ на контакте будут происходить синхронно, что видно из совпадения СШ в тонком кристалле и контакта (синяя и черная кривые на рис. 1). В толстом кристалле ПФ на контакте также будет происходить, обеспечивая нелинейный ток, но

синхронизации уже не будет из-за различия фундаментальных частот контакта и объема толстого вискера, вследствие чего СШ в толстом вискере будут подавлены.

Таким образом, впервые показана возможность синхронизации ПФ с внешним ВЧ полем на микроконтактах NbS_3 - NbS_3 . Показано, что природа СШ и узкополосного шума неразрывно связана как со скольжением ВЗП в объеме, так и с процессами ПФ на контакте. Необходимым условием наблюдения СШ является совпадение фундаментальных частот скольжения ВЗП в объеме и процессов ПФ на контакте.

Список литературы

- [1] S. G. Zybtsev et al. // Phys. Rev. B. **101**, 115425 (2020).
- [2] S. Ramakrishna, M. P. Maher, V. Ambegaokar, and U. Eckern // Phys. Rev. Lett. **68**, 2066 (1992).
- [3] С. Н. Артеменко // ЖЭТФ **111**, 1494 (1997).
- [4] A. A. Sinchenko, P. Monceau and T. Crozes // Phys. Rev. Lett. **108**, 046402 (2012).

Влияние симметрии системы на плазмон-поляритонные и оптические свойства наноструктур с внедренным одно- или двухслойным графеном, в том числе сверхпроводящим

Ю. А. Косевич

*Федеральный исследовательский центр химической физики
им. Н. Н. Семенова РАН, г. Москва, Россия*

Время жизни плазмон-поляритона является свойством, зависящим от симметрии и структуры системы, которое можно настроить в низкоразмерных системах. В настоящей работе мы показываем, что симметрия субволновых наноструктур, основанных на однослойном графене (ОСГ), бислойном графене (БСГ) или двухслойном графене (ДСГ), существенно

влияет на время жизни плазмон-поляритона. Мы показываем, что симметричные наноструктуры с листами ОСГ, внедренными в оптически плотный диэлектрический слой или присоединенными к нему, поддерживают как поперечно-магнитные так и поперечно-электрические поверхностные плазмон-поляритоны с чрезвычайно большим временем жизни. Показано, что время жизни поперечно-магнитного плазмон-поляритона расходится независимо от собственной частоты рассеяния электронов в графене в случае, когда положение внедренного ОСГ совпадает с плоскостью симметрии диэлектрического слоя, что связано с нулевой физической толщиной ОСГ. Для внедренных ОСГ, БСГ или ДСГ мы показываем, что максимальное время жизни длинноволновой симметричной поперечно-магнитной моды реализуется в листах графена, симметрично внедренных в оптически плотный слой, при заданном расстоянии между листами и заданной толщины слоя. Внедренная или присоединенная слоистая графеновая наноструктура приводит к появлению дополнительного низкочастотного резонанса прохождения s -поляризованных волн в терагерцевом спектре Фабри-Перо слоя оптически плотного диэлектрика достаточно малой толщины. Появление дополнительного низкочастотного резонанса прохождения в терагерцевом спектре Фабри-Перо впервые было предсказано [1] и экспериментально обнаружено [2] в полупроводниковых слоистых структурах с двумерным электронным газом. Частота резонанса прохождения ω_0 играет роль частоты отсечки для поперечно-электрических поверхностных плазмон-поляритонов, которые существуют в слоистой графеновой наноструктуре в широком диапазоне частот выше ω_0 , в отличие от поперечно-электрических плазмонов в свободно-подвешенном ОСГ с энергией вблизи $2E_F$ [3]. При этом одно- или двухслойный графен, в том числе сверхпроводящий, внедренный в или присоединенный к диэлектрическому слою достаточно большой толщины, подавляет резонансы прохождения в спектре Фабри-Перо в низкочастотном терагерцевом диапазоне, зависящем от симметрии и структуры слоистой системы. Оба оптических эффекта связаны с терагерцевой электродинамикой диэлектрических слоев с внедренной или присоединенной слоистой графеновой наноструктурой, в том числе сверхпроводящей, с высокой оптической

проводимостью. Переключение из нормального в сверхпроводящее состояние внедренного в диэлектрическую матрицу бислойного графена, скрученного между слоями нитрида бора [4], приводит к температурной зависимости частоты и ширины низкочастотного резонанса прохождения в спектре Фабри–Перо слоя с графеновой наноструктурой. Рассчитан вклад поверхностных плазмон-поляритонов в теплопроводность, тепловой кондактанс и удельную теплоемкость диэлектрического слоя с внедренным одно- или двухслойным графеном.

Работа выполнена в рамках Госзадания ФИЦ ХФ РАН.

Список литературы

- [1] Ю. А. Косевич, *Письма в ЖЭТФ* **53**, 143 (1991).
- [2] A. Shuvaev, V. M. Muravev, P. A. Gusikhin, J. Gospodarič, I. A. Pimenov, and I. V. Kukushkin, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 136801 (2021).
- [3] S. A. Mikhailov and K. Ziegler, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 016803 (2007).
- [4] D. R. Klein, L. Q. Xia, D. MacNeill, K. Watanabe, T. Taniguchi, and P. Jarillo-Herrero, *Nature Nanotechnology* **18**, 331 (2023).

Проводимость слоистых квазидвумерных проводников в магнитном поле

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

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

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

³*Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»,
г. Москва, Россия*

^{*}*E-mail: 5taras@mail.ru*

Мы развиваем теорию осцилляций магнитосопротивления в слоистых квазидвумерных металлах. Огромное количество современных ис-

следований посвящено изучению электронной структуры в этих материалах. Существует два основных метода измерения электронной структуры в объеме этих материалов: фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением (ФЭС) [1] и магнитные квантовые осцилляции (МКО) [2–4].

ФЭС более нагляден, чем МКО, но имеет худшее разрешение по энергии и импульсу и требует высококачественной поверхности образца и сложной техники. Разрешение ФЭС часто недостаточно для изучения тонкого энергетического расщепления и перестройки поверхности Ферми электронными фазовыми переходами. МКО предоставляют инструмент для измерения геометрии поверхности Ферми с гораздо более высокой точностью, чем ФЭС, а также дают информацию об эффективной массе, свободном времени пробега и g -факторе носителей заряда [2–4]. Характерной особенностью МКО является их высокая чувствительность к температуре и беспорядку, включая макроскопические неоднородности образца. Однако извлечение этой информации из экспериментальных данных по МКО нуждается в построении количественной теории МКО.

В дополнение к магнитным квантовым (шубниковским) осцилляциям, в квазидвумерных металлах существуют также разностно-частотные или так называемые медленные осцилляции магнитосопротивления. Медленные осцилляции были впервые обнаружены в 1988 году при изучении органического сверхпроводника β -(BEDT-TTF)₂IBr₂ [5, 6]. Подобные осцилляции наблюдались и в других органических проводниках, например, β -(BEDT-TTF)₂I₃, κ -(BEDT-TTF)₂Cu₂(CN)₃ [7] и κ -(BEDT-TSF)₂C(CN)₃ [8, 9]. Из анализа медленных осцилляций можно найти интеграл межслойного переноса t_z , дающий скорость прыжков электронов между проводящими слоями, среднее время свободного пробега электронов, тип беспорядка в системе и т. д. [10]. Когда медленные осцилляции возникают из дисперсии электронов k_z , угловая зависимость частоты медленных осцилляций позволяет оценить импульс Ферми в плоскости k_F . Медленные осцилляции, возникающие из межслоевых прыжков электронов, напоминают магнитные межподзонные осцилляции в двумерных металлах [11, 12] или осцилляции разностной частоты [13], возникающие из-за нескольких карманов поверхности Ферми.

Мы рассчитали магнитные квантовые и медленные осцилляции внутрислоевой холловской проводимости σ_{xy} в квазидвумерных металлах в квантующем магнитном поле, предполагая, что осциллирующая часть всё ещё намного меньше монотонной части. Этот расчёт основан на формуле Кубо–Стреды. Теория учитывает рассеяние электронов на дефектах кристалла ближнего действия, например, на примесях, и пренебрегает электрон-электронным взаимодействием. Последнее приближение оправдано в металлическом пределе большого числа заполненных уровней Ландау и конечного интеграла межслоевого переноса t_z . Ранее подобный расчет в квазидвумерных металлах проводился только для диагональных компонент проводимости [14, 15]. Мы вычисляем тензор внутрислоевого магнитосопротивления, что позволяет проводить прямое сравнение с экспериментальными данными. Например, мы предсказываем немонотонную полевую зависимость амплитуды и фазы медленных осцилляций в определённом диапазоне параметров, зависящую от поля разность фаз между осцилляциями диагональной и холловской компонент магнитосопротивления, разницу между МКО внутрислоевого и межслоевого магнитосопротивления и т. д. Разработанная теория и её результаты полезны для описания транспортных свойств в различных анизотропных квазидвумерных металлах, включая высокотемпературные сверхпроводники, редкоземельные полителлуриды, слоистые халькогениды, ван-дер-ваальсовы кристаллы, гетероструктуры, органические металлы и т. д.

Список литературы

- [1] H. Zhang, T. Pincelli, C. Jozwiak, T. Kondo, R. Ernstorfer, T. Sato, and S. Zhou, *Nature Review Methods Primers* **2**, 54 (2002).
- [2] D. Shoenberg, *Magnetic Oscillations in Metals* (Cambridge Monographs on Physics) (Cambridge University Press, 2009).
- [3] A. A. Abrikosov, *Fundamentals of the theory of metals* (North-Holland Sole distributors for the USA and Canada, Elsevier Science Pub. Co, Amsterdam New York, NY, USA, 1998).
- [4] J. M. Ziman, *Principles of the theory of solids* (Cambridge University Press, Cambridge England, 1972).

- [5] M. V. Kartsovnik, P. A. Kononovich, V. N. Laukhin, and I. F. Shchegolev, Sov. Phys.: JETP Lett. **48**, 541 (1988).
- [6] M. V. Katsovnik, V. N. Laukhin, V. I. Nazhankovskii, and A. A. Ignat'ev, Sov. Phys.: JETP Lett. **47**, 363 (1988).
- [7] E. Ohmichi, H. Ito, T. Ishiguro, G. Saito, and T. Komatsu, Phys. Rev. B **57**, 7481 (1998).
- [8] B. Z. Narymbetov, N. D. Kushch, et al, Eur. Phys. J. B **5**, 179 (1998).
- [9] T. G. Togonidze, M. V. Kartsovnik, et al, Physica B **294–295**, 435 (2001).
- [10] M. V. Katsovnik, P. D. Grigoriev, et al, Phys. Rev. Lett. **89**, 126802 (2002).
- [11] M. T. Raikh and T. V. Shahbazyan, Phys. Rev. B **49**, 5531 (1994).
- [12] N. S. Averkiev, L. E. Golub, S. A. Tarasenko, and M. Willander, Journal of Physics. Condensed Matter **13**, 2517 (2001).
- [13] V. Leeb and J. Knolle, Phys. Rev. B. **108**, 054202 (2023).
- [14] P. D. Grigoriev, Phys. Rev. B **67**, 144401 (2003).
- [15] T. I. Mogilyuk, P. D. Grigoriev, Phys. Rev. B **98**, 045118 (2018).

Воздействие поверхностных акустических волн на динамику волны зарядовой плотности

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

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

Исследования транспортных свойств квазиодномерных проводников с волной зарядовой плотности (ВЗП) не теряют актуальности на протяжении десятков лет. ВЗП — коллективное состояние электронов (электронный кристалл), которое можно рассматривать как упругую среду, способную деформироваться и скользить при приложении электрического поля [1]. В квазиодномерном проводнике TaS₃ обнаружено влияние механических вибраций, возбуждаемых с помощью пьезоактюаторов, на динамику ВЗП [2]: наблюдалась синхронизация скольжения ВЗП (ступеньки Шапино (СШ) на ВАХ) с механическими вибрациями на частотах

до 1 МГц. Данная методика возбуждения колебаний применима на частотах до ~ 10 МГц, ограничена по амплитуде и привязана к собственным частотам подвешенной нити. Чтобы преодолеть эти ограничения, мы использовали поверхностные акустические волны (ПАВ), возбуждаемые в кристаллах ниобата лития.

При исследовании воздействия ПАВ на ВЗП важнейшей задачей является разделение вкладов электрического и механического полей. В докладе будет представлен метод, позволяющий различить электрическое и механическое воздействие на динамику ВЗП по амплитудной зависимости ширины СШ, в частности — порогового напряжения $V = V_1$ [3, 4].

Для исследований было выбрано соединение TaS_3 , отличающееся наиболее выраженной связью динамики ВЗП с деформацией решетки. Образец был расположен на поверхности ниобата лития (рис. 1,а). Нанесенная на поверхность система встречно-штыревых преобразователей (ВШП) позволила возбуждать резонансные моды ПАВ частотой $\sim 1\text{--}20$ МГц с длиной волны ~ 3 мм, сравнимой с длиной образца (700 мкм). Измерения ВАХ проводились при температуре 120 К.

Были обнаружены особенности на ВАХ при подаче напряжений на ВШП на частотах, соответствующих резонансным модам пластины ниобата лития (рис. 1б, красная кривая). Если сравнить эту кривую с ВАХ, измеренной без ВЧ воздействия (рис. 1б, черная кривая), видно, что ПАВ приводит к подавлению порогового поля и возникновению СШ. Синим цветом на рис. 1,б показана ВАХ, измеренная при подаче ВЧ поля непосредственно на образец. Величина ВЧ напряжения подобрана так, чтобы величина V_1 была примерно такой же, как и на красной кривой. При этом также возникают СШ, причем, при тех же токах ВЗП (в данном случае видны основная гармоника и субгармоника). Видно и качественное отличие СШ, индуцированных ПАВ: они заметно шире, в их структуре можно различить несколько близких друг к другу пиков. Аналогичное отличие механических СШ от электрических наблюдалось нами ранее в [2]. Более того, сравнение зависимостей V_1 от амплитуды ВЧ напряжения, подаваемого на образец и на ВШП, показало их качественное отличие друг от друга. При подаче напряжения на образец наблюдалась тен-

денция к осцилляциям V_t , характерным для ВЗП с высокой когерентностью, в то время как с ростом напряжения на ВШП V_t спадало плавно, с тенденцией к насыщению.

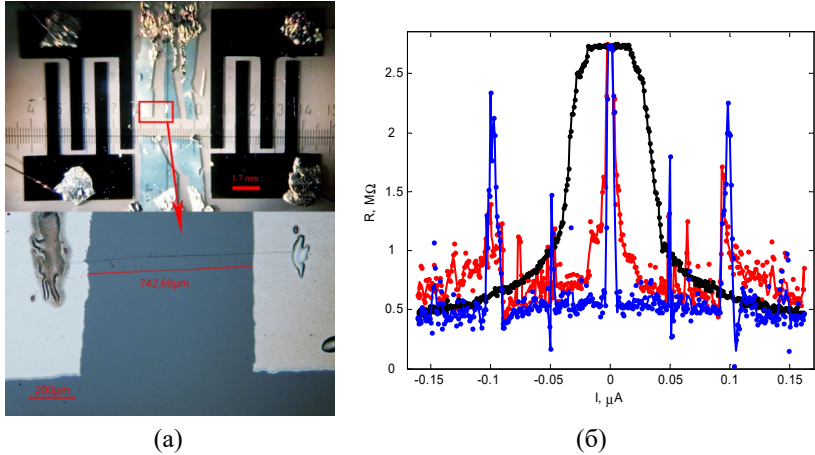


Рис. 1. Изображение пластины LiNbO₃ с ВШП и образцами TaS₃ (сверху) и изображение образца лежащего между двумя ВШП (снизу) (а); ВАХ без облучения (черный), при подаче ПАВ 1,13 МГц, $U_{rms} = 1150$ мВ (красный) и при подаче ВЧ 1,13 МГц, $U_{rms} = 620$ мВ, (синий), $T = 119$ К (б).

Итак, характер особенностей, возникающих при воздействии ПАВ, и их амплитудная зависимость указывают на их механическую природу [3, 4]. Отметим, что об особенностях на ВАХ образцов NbSe₃, расположенных на структуре с ПАВ, сообщается в неопубликованной ссылке [15] в [4], однако авторы не привели аргументов в пользу их механического происхождения. Таким образом, нами впервые наблюдалось воздействие акустического поля ПАВ на динамику ВЗП. Вместе с тем, для окончательного прояснения вопроса требуются дальнейшие исследования. В частности, уширение СШ в поле ПАВ может быть связано с неоднородностью электрического поля ПАВ: длина образца сравнима с длиной волны ПАВ. Кроме того, направление электрического поля ПАВ может не совпадать с осью образца. Обращает также на себя внимание

внешнее сходство «тонкой» структуры СШ с АЧХ структуры с ВШП вблизи резонансов.

Возможное использование результатов исследований — создание преобразователей акустических сигналов с частотным разрешением, в частности, селективных фильтров, анализаторов частот механических колебаний и других новых элементов нано- и микроэлектромеханики.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 25-29-00876.

Список литературы

- [1] Покровский В.Я., Зыбцев С.Г., Никитин М.В., Горлова И.Г., Насретдинова В.Ф., Зайцев-Зотов С.В. УФН 183 33–54 (2013).
- [2] Nikitin M.V., Zybtev S.G., Pokrovskii V.Ya. and Loginov B.A., Appl. Phys. Lett. **118**, 223105 (2021).
- [3] Никитин М.В., Покровский В. Я., Кай Д.А., Зыбцев С.Г., Письма в ЖЭТФ **118**, 854 (2023).
- [4] Y. Funami, K. Aoyama, Phys. Rev. B. V.108 L100508 (2023).

Внутренние напряжения, спинодальный распад и чередование политипов в вискерах NbS₃

В. Я. Покровский¹, В. П. Мартовицкий², А. Л. Васильев^{3,4,5}, А. Г. Иванова³,
И. Н. Трунькин⁴, Н. Б. Болотина³, М. В. Никитин¹, С. Г. Зыбцев¹

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

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

³*Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский
институт», Москва, Россия*

⁴*НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

⁵*МФТИ (НИУ) г. Долгопрудный, Московская область, Россия*

Кристаллы квазиодномерного проводника NbS₃ вырастают, как правило, в виде двух основных политипов — триклинного, без волны зарядовой плотности (ВЗП) и моноклинного, в котором две ВЗП (ВЗП-0

и ВЗП-1) существуют при комнатной температуре [0]. Синтезированы и другие политипы, общим числом около 8 ([0] и ссылки в ней). Все они представляют собой ленточные вискеры, вытянутые вдоль оси **b** наибольшей проводимости. Другое направление в плоскости ленты соответствует оси **a**.

Недавние исследования в скользящей геометрии в мягком рентгене (медное излучение) показали, что синтезированные вискеры можно относить к той или иной фазе с большими оговорками. Так, при исследовании вискеро́в II фазы обнаружено существенное изменение параметров решётки вдоль оси **c** [0]. В частности, наблюдается плавное изменение угла моноклинности β . В некоторых случаях изменение угла β имеет периодический характер, что видно по сверхструктурным рефлексам на кривых сканирования. Фаза II, к которой номинально относятся вискеры, характеризуется величиной $\beta_2 = 99.9 \div 100.0^\circ$. Фаза же с наименьшим углом моноклинности, $\beta_1 = 95.9 \div 97.2^\circ$, близка по структурным параметрам к фазе I без ВЗП. Таким образом, вискеры состоят из слоёв чередующихся фаз, параллельных плоскости (001).

В некоторых случаях в фазе II обнаружены атомно тонкие прослойки фазы I и, наоборот, в фазе I — атомно тонкие слои фаз II и IV. Второй случай особо интересен, поскольку означает наличие двумерных слоёв с ВЗП. Данный вывод подтверждается измерениями транспортных свойств некоторых образцов номинально I фазы. В них наблюдается нелинейная проводимость, причём её связь со скольжением ВЗП подтверждается наблюдением ступенек Шапиро при воздействии ВЧ поля. Используя ступеньки Шапиро, удалось оценить плотность заряда, переносимого ВЗП, и она соответствует предположению о скольжении ВЗП в одном слое.

Сделан вывод, что данная структура вискеро́в NbS_3 сформировалась в процессе спинодального распада, происшедшего при охлаждении вискеро́в по окончании процесса синтеза. Как рентгеноструктурными методами, так и с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), показано, что в вискерах NbS_3 наблюдается двойникование. Это приводит к внутренним напряжениям в структуре [0], особенно силь-

ным — в подчинённых двойниковых индивидах. Степень распада в них выше, из чего сделан вывод, что внутренние напряжения и являются первопричиной спинодального распада. В процессе распада возникают диффузионные потоки вакансий серы и происходит перераспределение их концентрации вдоль оси c . В итоге изменяются параметры решётки [0]. Минимальная концентрация вакансий соответствует минимуму β .

В ряде вискеро́в обнаружены многочисленные отщепившиеся тонкие пластины той же фазы, не имеющие внутренних напряжений. Сравнение параметров решётки пластин и вискеро́в показало, что вискеро́в как I, так и II фаз сжаты в продольном направлении и растянуты в направлении поперёк слоёв. Продольное сжатие способствует короблению (потере устойчивости) цепочек Nb и может стимулировать возникновение ВЗП: существенная роль поперечных смещений атомов в образовании ВЗП рассматривалась как теоретически [0], так и экспериментально [0].

Рентгеноструктурные данные о чередовании фаз подтверждаются и дополняются исследованиями в ПЭМ. Наблюдались границы I и II фаз разного типа. Тёмные области вблизи некоторых фазовых границ отражают внутренние напряжения и искажения параметров решётки. Обнаружены также области II фазы с высокой концентрацией двойников и сильно искажёнными параметрами решётки [0]. В этих областях сохраняется ВЗП-0, однако отсутствует ВЗП-1. Исчезновение ВЗП-1 можно объяснить деформацией элементарной ячейки, приводящей к рассогласованию условий нестинга ВЗП-1 и её подстройки под 2-ю гармонику ВЗП-0 [0].

Одно из проявлений внутренних напряжений – раздвоение особенности в сопротивлении R в области температуры T_{P1} образования ВЗП-1. Один максимум $\ln R/d(1/T)$ наблюдается при $T_{P1}=360$ К, другой — существенно ниже по температуре. Если первый пик обнаруживает переход в ненапряжённых слоях, второй — в напряжённых, вероятно — в двойниковых, в подчинённых индивидах. Нагрев выше 400 К может приводить к снижению напряжений, что проявляется в повышении T_{P1} в части образца. Так, в одном из образцов NbS₃-II второй пик $\ln R/d(1/T)$ сдвинулся вверх с 308 до 325 К.

Таким образом, структурные данные, полученные методиками ПЭМ, мягкого рентгена, а также в синхротронном рентгене и с помощью сканирующего туннельного микроскопа свидетельствуют о сложной дефектной структуре вискеро́в NbS_3 , включающей двойникование и дефекты упаковки. Наблюдается также изменение параметров решётки и чередование фаз вдоль оси c . Показано, что в формировании структуры вискеро́в определяющую роль играет спинодальный распад, происходящий под действием внутреннего напряжения между слоями, связанного с образованием двойников.

Список литературы

- [1] P. Monceau, Electronic crystals: an experimental overview // *Adv. Phys.* **61**, 325 (2012).
- [2] А. Л. Васильев, А. Г. Иванова, И. Н. Трункин, Н. Б. Болотина, В. Я. Покровский, С. Г. Зыбцев, Новый политип вискеро́в NbS_3 : от простого к сложному // *Письма в ЖЭТФ* **119**, 917 (2024).
- [3] В. П. Мартовицкий, М. В. Никитин, В. Я. Покровский, Спинодальный распад вискеро́в NbS_3 с волнами зарядовой плотности // *Письма в ЖЭТФ* **120**, 37 (2024).
- [4] D. Feinberg and J. Ranninger, Lattice instability in one-dimensional molecular-type crystals // *J. Phys. C: Solid State Phys.* **16**, 1875 (1983).
- [5] M. R. Hauser, B. B. Plapp, and G. Mozurkewich, Thermal expansion associated with the charge-density wave in $\text{K}_{0.3}\text{MoO}_3$ // *Phys. Rev. B* **43**, 8105 (1991).
- [6] В. Я. Покровский, А. Л. Васильев, Н. Б. Болотина, А. Г. Иванова, С. В. Зайцев-Зотов, С. Г. Зыбцев, А. А. Синченко, Взаимодействие волн зарядовой плотности в моноклинной фазе NbS_3 // *Письма в ЖЭТФ* **121**, 412 (2025).

ТОПОЛОГИЧЕСКИ НЕТРИВИАЛЬНЫЕ

Топологические свойства монокристаллов твёрдых растворов на основе арсенида кадмия

В. С. Захвалинский¹, А. В. Борисенко¹, А. В. Маширов²

¹*Белгородский государственный национальный исследовательский
университет, г. Белгород, Россия*

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

Недавние достижения в области полупроводниковых соединений таких материалов, как твердые растворы на основе Cd_3As_2 , привлекли значительное внимание исследователей, благодаря их уникальным электронным свойствам и потенциальному применению [1]. Твердые растворы на основе Cd_3As_2 , являющегося трехмерным аналогом графена, демонстрируют интересные свойства, например, высокую подвижность электронов [2]. Расчет зонной структуры показал, что Cd_3As_2 является 3D-полуметаллом Дирака. Возможность нарушения определенных симметрий из-за легирования магнитными примесями приводит к возникновению нетривиальных состояний, таких как полуметаллы Вейля, топологические изоляторы и топологические сверхпроводники [3] и дает импульс к исследованию монокристаллов твёрдых растворов на основе арсенида кадмия, в частности, $(\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x)_3\text{As}_2$, $x = 0.093$ и $(\text{Cd}_{1-x-y}\text{Zn}_x\text{Mn}_y)_3\text{As}_2$, $x = 0.29$, $y = 0.01$.

Исследуемый образец монокристалла твёрдого раствора $(\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x)_3\text{As}_2$, $x = 0.093$ получен методом Бриджмена. Поведение температурной зависимости удельного сопротивления соответствует металлическому характеру зависимости (рис. 1). В магнитном поле наблюдались осцилляции Шубникова–де Гааза, что позволило провести расчет физи-

ческих характеристик (таблица 1). Зависимость циклотронной массы $m_c(0)/m_0$ экспериментально наблюдаемой по осцилляциям Шубникова–де Гааза от волнового вектора Ферми согласуется с предсказанной теорией линейной зависимостью. В свою очередь, график веерной диаграммы Ландау указывает на наличие в $(\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x)_3\text{As}_2$, $x = 0.093$ фермионов Дирака с околонулевой эффективной массой.

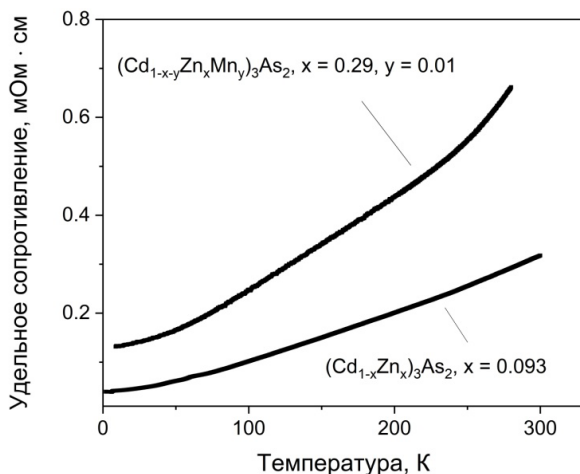


Рис. 2. Температурная зависимость удельного сопротивления в монокристаллах $(\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x)_3\text{As}_2$, $x = 0.093$ и $(\text{Cd}_{1-x-y}\text{Zn}_x\text{Mn}_y)_3\text{As}_2$, $x = 0.29$, $y = 0.01$

По результатам рентгеновской дифрактограммы основной плоскостью $(\text{Cd}_{1-x-y}\text{Zn}_x\text{Mn}_y)_3\text{As}_2$, $x = 0.29$, $y = 0.01$ выступает плоскость (101). Зависимость удельного сопротивления от температуры схожа с $(\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x)_3\text{As}_2$, $x = 0.093$, имеет металлический характер зависимости, убывая при понижении температуры (рис. 1). В магнитном поле до 10 Тл экспериментально наблюдались осцилляции Шубникова–де Гааза, как при измерении удельного сопротивления, так и при измерении удельного сопротивления Холла, что позволило рассчитать значения нормального коэффициента Холла $R_H = -3.261 \text{ см}^3/\text{К}$ и аномального удельного сопротивления Холла $\rho_{AH} = -3.28 \cdot 10^{-5} \text{ Ом}\cdot\text{см}$ при температуре 2 К. Осцилляции

сопротивления Холла предположительно вызваны одновременно как неэквивалентностью зондов, так и проявлением в 2D-слое квантового эффекта Холла. В магнитно-легированных системах, к которым относится $(\text{Cd}_{1-x-y}\text{Zn}_x\text{Mn}_y)_3\text{As}_2$ при $x = 0.29$, $y = 0.01$ есть возможность расчета параметров в 2D-поверхностном слое: концентрации $n_{2d} = 1.33 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ и подвижности $\mu_{2d} = 1.41 \cdot 10^3 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$, а также значение толщины поверхностного 2D-слоя 10.62 нм. Рассчитанные физические параметры приведены в таблице 1.

Таблица 1. Характерные параметры монокристаллов $(\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x)_3\text{As}_2$, $x = 0.093$ и $(\text{Cd}_{1-x-y}\text{Zn}_x\text{Mn}_y)_3\text{As}_2$, $x = 0.29$, $y = 0.01$

	$(\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x)_3\text{As}_2$, $x = 0.093$	$(\text{Cd}_{1-x-y}\text{Zn}_x\text{Mn}_y)_3\text{As}_2$ $x = 0.29$, $y = 0.01$
n_{SDH} , см^{-3}	$1.2 \cdot 10^{18}$	$8.22 \cdot 10^{17}$
n , см^{-3}	$1.7 \cdot 10^{18}$	$1.92 \cdot 10^{18}$
μ , $\text{см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$	$5 \cdot 10^4$	$3.78 \cdot 10^2$
T_D , К	21.2	34.6
$m_c(0)/m_0$	0.053	0.031
k_F , нм^{-1}	0.33	0.29
$v_F \cdot 10^5$, м/с	2.5	3.83
l_F , нм	29.1	26.9

Теоретические расчеты зонной структуры и проведенные экспериментальные исследования эффекта Шубникова–де Гааза в монокристаллах твердых растворов арсенида кадмия $(\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x)_3\text{As}_2$, $x = 0.093$ и $(\text{Cd}_{1-x-y}\text{Zn}_x\text{Mn}_y)_3\text{As}_2$, $x = 0.29$, $y = 0.01$ показали, что рассматриваемые материалы обладают топологическими нетривиальными свойствами. Для исследованных образцов были определены физические параметры, представленные в таблице 1. Полученные параметры не противоречат аналогичным результатам, полученным ранее [4]. Прогресс при изучении данных материалов может быть достигнут при условии совершенствования

методов синтеза материалов и технологии роста монокристаллов твёрдых растворов на основе арсенидов кадмия.

Список литературы

- [1] Mitra A. et al. Constraints on proximity-induced ferromagnetism in a Dirac semimetal (Cd_3As_2)/ferromagnetic semiconductor ($\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$) heterostructure // *Physical Review Materials*. 2023. Т. 7. №. 9. С. 094201. <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.7.094201>
- [2] Rice A. D. et al. High mobility Cd_3As_2 (112) on GaAs (001) substrates grown via molecular beam epitaxy // *ACS Applied Electronic Materials*. 2022. Т. 4. № 2. С. 729–734. <https://doi.org/10.1021/acsaelm.1c01126>
- [3] Yuan X. et al. Direct observation of Landau level resonance and mass generation in Dirac semimetal Cd_3As_2 thin films // *Nano Letters*. 2017. Т. 17. № 4. С. 2211–2219. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b04778>
- [4] Laiho R. et al. Resonant acceptor states in diluted magnetic semiconductor $(\text{Cd}_{1-x-y}\text{Zn}_x\text{Mn}_y)_3\text{As}_2$ // *Solid state communications*. 1999. Т. 110. № 11. С. 599–603. [https://doi.org/10.1016/S0038-1098\(99\)00135-0](https://doi.org/10.1016/S0038-1098(99)00135-0)

Инверсия типа поверхностной проводимости в коррелированном топологическом изоляторе SmB_6

В. С. Журкин, А. Д. Божко, М. А. Анисимов, О. С. Кудрявцев,
Б. В. Андрушечкин, В. М. Шевлюга, В. В. Глушков*

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

**E-mail: glushkov@lt.gpi.ru*

Выделенное положение узкозонного полупроводника SmB_6 (запрещенная зона $E_g = 19$ мэВ [1]) в семействе топологических изоляторов (ТИ) определяется режимом сильных электронных корреляций, реализующихся в условиях гибридизации $4f$ - и $5d$ -состояний и промежуточной

валентности ионов самария ($\nu \approx 2,6$ [2]). Интересно, что в этом соединении с кубической структурой киральные поверхностные состояния возникают как из-за нетривиальной топологии электронного спектра (в точках Γ/X , X и K/M поверхностной зоны Бриллюэна для плоскостей (100), (110) и (111), соответственно [3]), так и под влиянием симметрии кристаллической решетки (в точке Y поверхностной зоны Бриллюэна для плоскости (110)) [4]. Однако исследования параметров поверхностной проводимости в фазе ТИ существенно осложняют полярный характер поверхностей и влияние способа подготовки поверхности SmB_6 на характеристики носителей заряда при низких температурах. В частности, для SmB_6 травление полированных полярных граней (100) приводит к уменьшению концентрации и росту подвижности поверхностных носителей заряда n -типа при 1,9 К до значений $0,76/a^2$ ($a = 4,134 \text{ \AA}$) и $18 \text{ cm}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$, соответственно. После травления неполярных поверхностей (110) и (111) концентрации поверхностных носителей заряда превышают предельные значения, рассчитанные для соответствующей поверхностной зоны Бриллюэна, в 2,3 и 3,9 раза. Более того, после предварительной полировки поверхности (110) химическое травление уменьшает холловскую концентрацию поверхностных электронов при 1,9 К почти на 2 порядка, в то время как параметры ЭПР отклика парамагнитных центров при температурах ниже 5,5 К остаются практически неизменными [5]. В такой ситуации для идентификации природы фазы ТИ в SmB_6 крайне важно иметь надежную количественную информацию о параметрах носителей заряда для поверхностей с различными ориентациями и способами подготовки.

В докладе представлены результаты исследования параметров электронного транспорта в монокристаллических образцах SmB_6 с гранями, подвергнутыми различным видам обработки (механической полировке, химическому травлению или обработке ионным пучком) [6, 7]. Показано, что для поверхностей SmB_6 , образованных плоскостями (100) и (110), обработка пучком ионов аргона со средней энергией 500 эВ и флюэнсом до $3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ инициирует инверсию знака поверхностных носителей заряда с переходом к проводимости p -типа при температурах ниже 4 К (рис. 1).

Для неполярных граней (110) значения холловской подвижности поверхностных дырок в SmB_6 ($|\mu_H^S| \sim 40\div 60 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$, рис. 2) заметно превышают параметры поверхностных электронных и объемных дырочных носителей заряда (соответственно, $|\mu_H^S| \sim 7 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$ при 1,9 К [6] и $\mu_{H,p} < 3 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$ при 10 К [1]). При этом поверхностные носители заряда p -типа лишь частично (примерно на 10 %, рис. 2) заполняют соответствующую поверхностную зону Бриллюэна, что не противоречит критерию существования фазы ТИ [6]. Изменение типа поверхностной проводимости связывается с ростом концентрации дефектов поверхности и с их последующей пассивацией атмосферным кислородом и открывает возможности управления параметрами электронного транспорта в основном состоянии SmB_6 за счет изменения поверхностного потенциала при контролируемом введении дефектов или под влиянием эффекта поля.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РНФ № 25-72-20032.

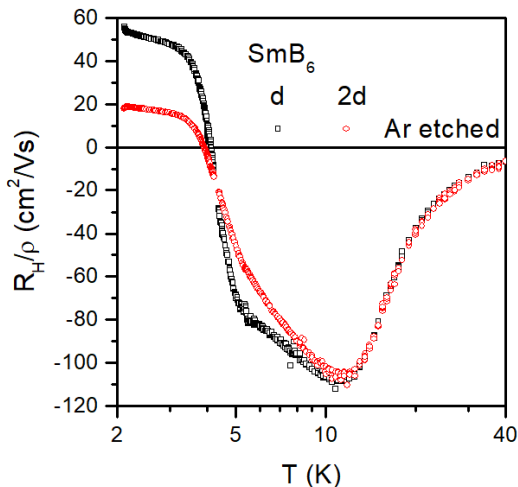


Рис. 1. Холловская подвижность носителей заряда для образцов SmB_6 с толщинами $d = 170 \text{ мкм}$ и $2d = 340 \text{ мкм}$ с поверхностями (110), обработанными ионами аргона со средней энергией 500 эВ и флюенсом $3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$

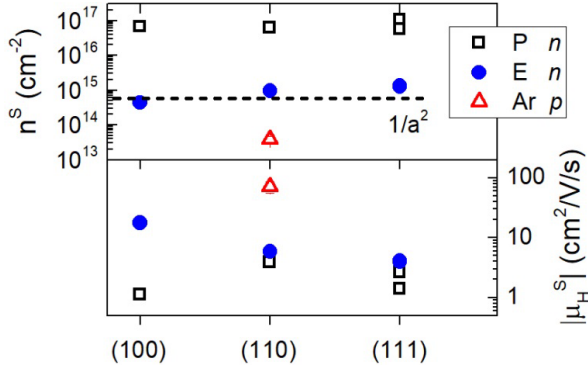


Рис. 2. Концентрация (верхняя панель) и холловская подвижность (нижняя панель) поверхностных носителей заряда для поверхностей SmB_6 после абразивной полировки (P), химического травления (E) и обработки ионами аргона (Ar). Буквами n и p указан тип поверхностной проводимости. Пунктирной линией обозначена концентрация, отвечающая однократному заполнению поверхностной зоны Бриллюэна для плоскости (100).

Список литературы

- [1] N. Sluchanko, V. Glushkov, B. Gorshunov et al. // Phys. Rev. B. 2000. V. 61. P. 9906–9909.
- [2] M. Dzero, K. Sun, V. Galitski, Victor et al. // Phys. Rev. Lett. 2010. V. 104. P. 106408–1–4.
- [3] Y. S. Eo, S. Wolgast, A. Rakoski et al. // Phys. Rev. B. 2020. V. 101. P. 155109–1–15.
- [4] Dong-Choon Ryu, Chang-Jong Kang, Junwon Kim et al. // Phys. Rev. B. 2021. V. 103. P. 125101–1–6.
- [5] S. V. Demishev, M. I. Gilmanov, A. N. Samarin et al. // Sci. Rep. 2018. V. 8. P. 7125–1–8.
- [6] В. В. Глушков, В. С. Журкин, А. Д. Божко и др. // Письма в ЖЭТФ. 2022. Т. 116. С. 770–776.
- [7] Е. А. Артёмов, А. В. Мантузов, В. С. Журкин и др. // ФТП. 2023. Т. 57. С. 232–236.

Генерация терагерцового излучения в плазмонных фотопроводящих антеннах на основе топологических изоляторов

П. М. Ковалева^{1,*}, К. А. Кузнецов^{1,2}, П. И. Кузнецов², Г. Х. Китаева¹

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

²*ФИРЭ им. В.А. Котельникова РАН, Фрязино, Россия*

**E-mail: kovaleva.pm19@physics.msu.ru*

Терагерцовое излучение (частоты в диапазоне 0.1–30 ТГц) привлекает значительное внимание благодаря своей безопасности для биологических объектов, отсутствию ионизирующей способности, а также высокой проникающей способности в диэлектрических материалах. Эти свойства делают его востребованным как в фундаментальных исследованиях [3, 4], так и в прикладных задачах, включая спектроскопию, медицинскую диагностику [1] и системы безопасности.

Фотопроводящие антенны (ФПА) за последние 15 лет зарекомендовали себя как компактные и эффективные источники ТГц-излучения, однако их коэффициент оптико-терагерцового преобразования, достигающий 10^{-4} – 10^{-3} , остаётся ограниченным. Дальнейшее повышение эффективности генерации ТГц-поля возможно за счёт модификации конструкции ФПА, в частности, за счёт применения просветляющих покрытий и использования новых материалов активного слоя.

В данной работе предложено объединение двух подходов к увеличению эффективности ФПА: использование просветляющего покрытия, нанесенного на сверхрешётку на поверхности антенны, что повышает коэффициент поглощения оптического излучения на поверхности активного слоя; а также замена традиционных полупроводниковых материалов активного слоя на топологический изолятор $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ (BSTS)⁶. Высокая подвижность носителей заряда в топологически-защищённых поверхностных состояниях BSTS, характеризующихся дираковской линейной дисперсией, способствует снижению рассеяния и увеличению эффективности фотопроводимости, что, в свою очередь, может приводить к усилению генерируемого ТГц-поля.

Численное моделирование генерации ТГц-излучения в ФПА с учётом различных каналов релаксации показало, что предложенные модификации значительно повышают эффективность антенны. Экспериментально подтверждено, что применение BSTS в качестве активного слоя, а также плазмонных решеток в комбинации с просветляющими покрытиями приводит к десятикратному увеличению напряжённости генерируемого ТГц-поля по сравнению с традиционной дипольной ФПА. Полученные результаты демонстрируют перспективность использования топологических изоляторов в ФПА и открывают возможности для дальнейшей оптимизации конструкции ТГц-источников. Исследованные образцы выращены в рамках государственного задания ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН № 075-00395-25-00.

Список литературы

- [1] Chen, H.; Han, J.; Wang, D.; Zhang, Y.; Li, X.; Chen, X. In Vivo Estimation of Breast Cancer Tissue Volume in Subcutaneous Xenotransplantation Mouse Models by Using a High-Sensitivity Fiber-Based Terahertz Scanning Imaging System. *Front. Genet.* 2021, 12. <https://doi.org/10.3389/fgene.2021.700086>.
- [2] Yang, H.; Zheng, S.; Zhang, H.; He, T.; Li, N.; Yang, Z.; Lyu, Z.; He, Y.; Zhang, L.; Yu, X. Metasurface-Based High-Speed Photonic THz OAM Communication System. *J. Lightwave Technol.* 2024, 42 (15), 5080–5087. <https://doi.org/10.1109/jlt.2024.3384477>.
- [3] Kutas, M.; Haase, B.; Bickert, P.; Riexinger, F.; Molter, D.; Von Freymann, G. Terahertz Quantum Sensing. *Sci. Adv.* 2020, 6 (11), eaaz8065. <https://doi.org/10.1126/sciadv.aaz8065>.
- [6] El Fatimy, A.; Myers-Ward, R. L.; Boyd, A. K.; Daniels, K. M.; Gaskill, D. K.; Barbara, P. Epitaxial Graphene Quantum Dots for High-Performance Terahertz Bolometers. *Nature Nanotech* 2016, 11 (4), 335–338. <https://doi.org/10.1038/nnano.2015.303>.
- [7] Tan, Y. J.; Zhu, C.; Tan, T. C.; Kumar, A.; Wong, L. J.; Chong, Y.; Singh, R. Self-Adaptive Deep Reinforcement Learning for THz Beamforming with Silicon Metasurfaces in 6G Communications. *Opt. Express* 2022, 30 (15), 27763. <https://doi.org/10.1364/oe.458823>.

- [8] K.A. Kuznetsov, S.A. Tarasenko, P.M. Kovaleva, P.I. Kuznetsov, D.V. Lavrukhin, Y.G. Goncharov, A.A. Ezhov, D.S. Ponomarev, G.Kh. Kitaeva, *Nanomaterials*, 12, 3779, (2022). <https://dx.doi.org/10.3390/nano12213779>

**Электронная зонная структура и взаимосвязь
с допированием собственными дефектами в МВЕ пленках
АФМ топологического изолятора $\text{MnTe} \cdot \text{Bi}_{(2-x)}\text{Te}_{3(1-x/2)}$:
исследование методами эллипсометрии и ИК спектроскопии**

Н. Н. Ковалева¹, А. В. Муратов¹, Т. Н. Фурсова², С. И. Божко²,
Ю. А. Алещенко¹, К. И. Кугель³, Д. В. Ищенко⁴, О. Е. Терещенко⁴

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

²Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия

³Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН,
г. Москва, Россия

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
г. Новосибирск, Россия

E-mail: kovalevann@lebedev.ru

Электронное допирование, вызванное присутствием собственных дефектов в антиферромагнитных (АФМ) топологических изоляторах (ТИ) семейства $\text{MnTe} \cdot n\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ($n = 1, 2, 3, \dots$), сдвигает уровень Ферми (E_F) выше зоны проводимости и оказывает влияние на магнитные и топологические свойства этих материалов, что создает препятствия для исследования дираковских состояний. В настоящей работе, пленки $\text{MnTe} \cdot \text{Bi}_{(2-x)}\text{Te}_{3(1-x/2)}$, выращенные методом МВЕ на подложках Si(111) при увеличении содержания Bi и Te от MnTe до MnBi_2Te_4 , были исследованы методом спектроскопической эллипсометрии в спектральном диапазоне 0.5–6.5 эВ. Кроме этого, были исследованы инфракрасные (ИК) спектры отражения в диапазоне 0.004–1.1 эВ и спектры пропускания в диапазоне 0.004–0.9 эВ. Измеренные эллипсометрические углы, $\Psi(\omega)$ и $\Delta(\omega)$, моделировались в двух- или трехслойной модели, с учетом

шероховатости пленки. В результате были определены спектры комплексной диэлектрической функции $\epsilon^*(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$, комплексного показателя преломления $n^*(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$ и оптической проводимости $\sigma_1(\omega)$. Было обнаружено, что абсолютные значения $\epsilon_1(\omega)$ и $\epsilon_2(\omega)$ увеличиваются при увеличении содержания Вi и Те от MnTe до MnBi_2Te_4 , в то время как максимум $\epsilon_2(\omega)$ систематически смещается в сторону более низких энергий фотона от ~ 3.7 эВ до ~ 1.2 эВ, которые характерны для исходных соединений MnTe и MnBi_2Te_4 , соответственно. В спектрах ИК пропускания пленок были идентифицированы ИК фононные моды характерные для монокристаллов MnBi_2Te_4 (48, 87 и 131 см^{-1} [1]) и MnTe (131 см^{-1} [2]). Установлено, что пленка MnBi_2Te_4 стехиометрического состава демонстрирует вклад типа Друде в дальнем ИК-диапазоне, связанный с доминированием собственных дефектов замещения донорного типа Vi_{Mn} , при этом концентрация электронов составляет $1.2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, в соответствии с оценкой, полученной для монокристаллов MnBi_2Te_4 [1]. Однако, в пленках $\text{MnTe} \cdot \text{Bi}_{(2-x)}\text{Te}_{3(1-x/2)}$ с пониженной стехиометрией по Вi и Те, вклад свободных носителей заряда подавлен, наблюдается заметная перестройка электронной зонной структуры, выраженная в перераспределении оптического спектрального веса [3]. Морфология поверхности пленок была охарактеризована методом атомно-силовой микроскопии (АСМ). Обнаружено, что стехиометрическая пленка MnBi_2Te_4 имеет нанокристаллическую структуру с размерами кристаллитов 500-1000 нм и протяженными плоскими участками поверхности.

Полученные результаты позволят контролировать электронную зонную структуру и уровень допирования в МВЕ пленках $\text{MnTe} \cdot \text{Bi}_{(2-x)}\text{Te}_{3(1-x/2)}$, а также в интеркалированных MnTe многослойных магнитных структурах $[(\text{MnTe} \cdot \text{Bi}_2\text{Te}_3)(\text{MnTe})_m]_N$.

Список литературы

- [1] B. Xu, Y. Zhang, E. H. Alizade *et al.* Phys. Rev. B **103**, L121103 (2021).
- [2] J. W. Allen, G. Lucovsky, J. C. Mikkelsen, Solid State Commun. **24**, 367 (1977).
- [3] N. N. Kovaleva *et al.* Appl. Phys. Lett. **125**, 262404 (2024).

Нетривиальная эволюция дираковского конуса в соединении Cd_3As_2 , легированном магнитными атомами

Э. Т. Кулатов¹, Ю. А. Успенский^{2,*}, К. И. Кугель^{3,4}

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

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

³*Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН,
г. Москва, Россия*

⁴*Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики,
г. Москва, Россия*

**E-mail: uspenski@lpi.ru*

Теоретические исследования предсказывают, что магнитное легирование дираковского полуметалла расщепляет конусы Дирака (КД) на конусы Вейля (КВ), имеющие левую и правую киральность. Наличие киральности вносит в электродинамику и транспортные свойства вейлевских полуметаллов много своеобразия и делает их материалами очень интересными для приложений. Однако в реальных материалах изменения в спектре, вызванные магнитным легированием, зачастую имеют сложный характер и требуют тщательного изучения. Экспериментальные исследования, выполненные для дираковского полуметалла Cd_3As_2 , легированного атомами переходных $3d$ -металлов показали, что проявления топологических свойств (ненулевая фаза Берри и аномально малая эффективная масса носителей заряда) не исчезают при легировании, а сохраняются вплоть до концентраций $3d$ -элементов в несколько процентов. Но сам характер изменений спектра и условия сохранения в нем конусов Вейля остаются пока неизвестными.

Чтобы внести ясность в эти вопросы, мы провели первопринципные расчёты электронной структуры сплавов $(\text{Cd}_{0.96}\text{M}_{0.04})_3\text{As}_2$ с $\text{M} = \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}$ и оценили изменения их транспортных свойств, вызванные легированием. Более точно, для ферромагнитного (ФМ) и антиферромагнитного (АФМ) упорядочений спина были рассчитаны: зонная структура и

плотность электронных состояний, скорость электронов на уровне Ферми (E_F) и поверхность Ферми, а также плазменная частота Друде, играющая важную роль в электронном транспорте. Была также изучена стабильность сплавов по отношению к перестройке спиновой структуры и к пространственному перераспределению магнитных атомов. Выполненные расчёты показали, что введение магнитных атомов в Cd_3As_2 не сводится к спиновому расщеплению КД, а вызывает сложное и неоднозначное изменение электронного спектра вблизи E_F . Важную роль в формировании спектра $(\text{Cd}_{1-x}\text{M}_x)_3\text{As}_2$ играет гибридизация $3d$ -орбиталей атомов М с электронными состояниями Cd_3As_2 , которая сильно деформирует или даже разрушает КД. Чтобы этого не произошло, КД и E_F должны попасть в энергетическое «окно», где $3d$ -состояния атомов М почти полностью отсутствуют. В случае ФМ упорядочения спинов картина образования таких окон наиболее прозрачная. Окно, свободное от состояний М $3d\downarrow$, гарантированно существует вблизи E_F , если вся М $3d\downarrow$ -зона не заполнена и лежит значительно выше E_F . Для существования же «окна» для электронов со спином вверх зона М $3d\uparrow$ должна быть полностью заполнена и располагаться намного ниже E_F . Если же М $3d$ -зона со спином вверх или вниз заполнена лишь частично, то её орбитали будут присутствовать в окрестности E_F и сильно смешиваться с состояниями конуса Вейля. При АФМ упорядочении спинов возможностей для формирования «окон» существенно меньше. В этом случае магнитные моменты атомов М направлены как вверх, так и вниз, из-за чего «окна» в АФМ спектре зависят от ФМ «окон» для обоих направлений спина. В изученных нами сплавах $(\text{Cd}_{1-x}\text{M}_x)_3\text{As}_2$ все эти варианты изменения спектра имеют место. В частности, $\text{KB}\downarrow$ сохраняется в ФМ сплавах $(\text{Cd}_{1-x}\text{Cr}_x)_3\text{As}_2$ (рис. 1) и $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$, а $\text{KB}\uparrow$ — в ФМ сплавах $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ и $(\text{Cd}_{1-x}\text{Fe}_x)_3\text{As}_2$ (в двух последних сплавах $\text{KB}\uparrow$ смещён на $+0.05$ эВ выше E_F за счёт гибридизации с $3d\uparrow$ -зоной).

Наличие в окрестности E_F энергетических окон, свободных от $3d$ -состояний атомов М, не только создаёт благоприятные условия для существования дираковского спектра, но и резко снижает вклад в остаточное сопротивление, обусловленный рассеянием электронов на магнит-

ных атомах. По этой причине КД, если он сохраняется в спектре, вносит доминирующий вклад в транспортные свойства сплавов $(\text{Cd}_{1-x}\text{M}_x)_3\text{As}_2$ при температуре $T \rightarrow 0$ К, что хорошо согласуется с данными магнитотранспортных измерений.

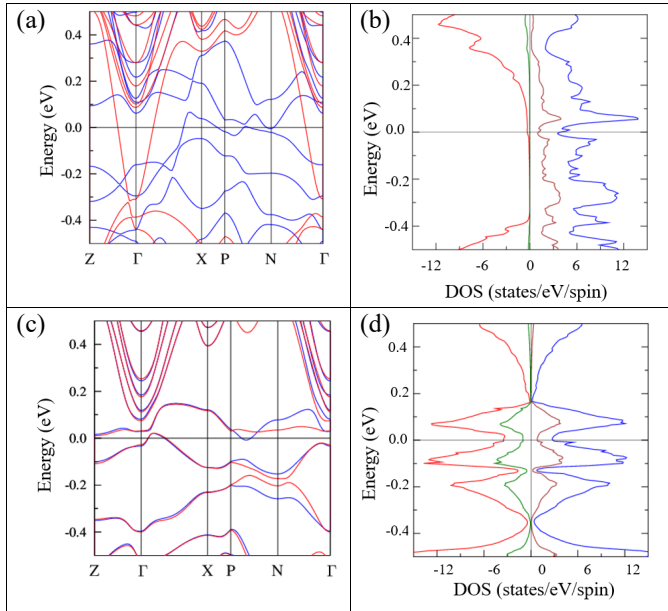


Рис. 1. Электронная структура сплава $(\text{Cd}_{0.96}\text{Cr}_{0.04})_3\text{As}_2$: (a) зонная структура и (b) плотность состояний (DOS) для ФМ сплава, (c) зонная структура и (d) плотность состояний для АФМ сплава. На панелях (a–d) синие и красные кривые отвечают законам дисперсии и полным плотностям состояний соответственно для состояний со спином вверх и вниз. Коричневые и зелёные кривые на панелях (b) и (d) отвечают парциальным плотностям состояний хрома со спином вверх и вниз, соответственно

Выявленные закономерности формирования электронного спектра и транспортных характеристик магнитных сплавов $(\text{Cd}_{1-x}\text{M}_x)_3\text{As}_2$ показывают, что топологические свойства этих материалов могут сохраняться при многих вариантах выбора М среди элементов 3d-ряда. Понимание

этих закономерностей повысит эффективность исследований по улучшению топологических характеристик сплавов $(\text{Cd}_{1-x}\text{M}_x)_3\text{As}_2$ за счёт оптимизации концентрации x , легирования, формирования микроструктуры и других факторов.

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

Список литературы

- [1] E.T. Kulatov, Yu.A. Uspenskii, K.I. Kugel, J. Phys. Chem. Solids **194**, 112215 (2024).
- [2] Э.Т. Кулатов, Ю.А. Успенский, К.И. Кугель, Письма в ЖЭТФ (в печати).

Собственный аномальный эффект Холла на поверхности магнитного полупроводника с сильным эффектом Рашба

В. Н. Меньшов¹, И. П. Русинов¹, Е. В. Чулков²

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

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

Мы рассматриваем, как рассеяние на магнитной доменной стенке влияет на поверхностные электронные состояния полупроводника с расщеплением по Рашба. Наш теоретический анализ открывает существование на доменной стенке особого резонансного состояния, которое при условии малости обменной щели по сравнению со спин-орбитальным расщеплением показывает свойства, подобные свойствам краевых состояний в топологических изоляторах. Мы вскрываем, что физическая причина возникновения резонансного состояния связана с особой структурой кризисы Берри в импульсном пространстве и изменением знака числа Черна на доменной стенке. Оценки показывают, что такие состояния могут наблюдаться в материале BiTeI , легированном атомами магнитных переходных металлов. Предложена новая платформа для реализации собственного аномального эффекта Холла: поверхность магнитного полупро-

водника с сильным Рашба эффектом, обладающая текстурой намагниченности в форме регулярных доменов противоположной поляризации, перпендикулярной поверхности. Холловское напряжение возникает между соседними доменными стенками, несущими слабозатухающие электронные каналы с линейным энергетическим спектром и противоположной киральностью. В приборе на основе BiTeI, допированном V или Mn, режим поперечной проводимости, близкой к квантованному значению, можно ожидать в температурной области от 0 до 100 К.

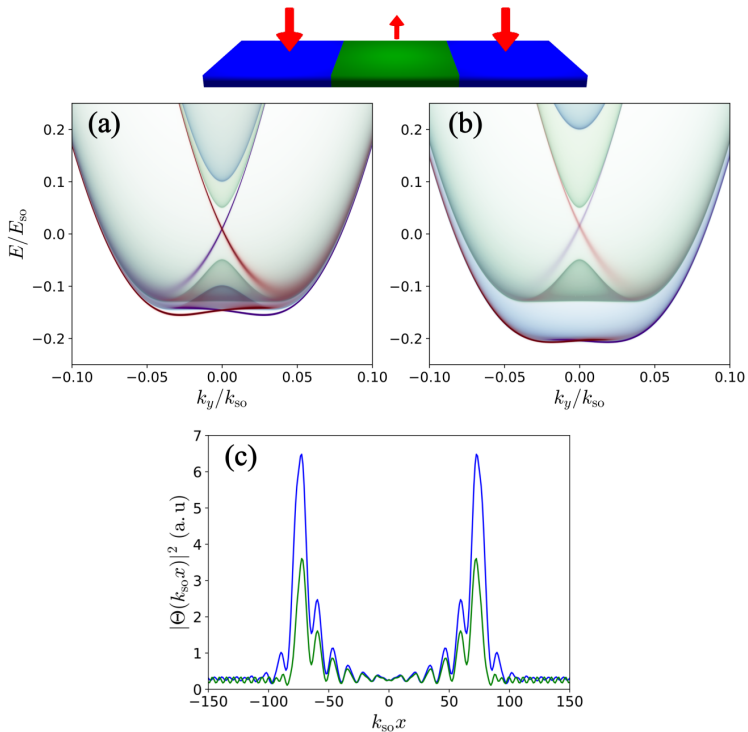


Рис. 1. Спектральное поведение (a) и (b) и пространственный профиль (c) электронных резонансных состояний на поверхности магнитного полупроводника с двумя параллельными доменными стенками при различной величине намагниченности в доменах

Магнетосопротивление объемного образца FeSi

А. Е. Петрова¹, С. Ю. Гаврилкин¹, С. С. Хасанов²,
В. А. Степанов¹, С. М. Стишов¹

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

²*Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия*

E-mail: stishovsm@lebedev.ru

Исследовано магнетосопротивление (MR) объемного образца FeSi, хорошо охарактеризованного в наших ранних работах. Наши наблюдения свидетельствуют о существовании отрицательной компоненты MR, которая появляется при температуре около 12 К и, в конечном итоге, определяет отрицательные значения как поперечного, так и продольного магнетосопротивления FeSi при высоких температурах. Отрицательная компонента MR возможно связана с топологическими особенностями хиральной структуры FeSi.

Введение и описание эксперимента

Уникальные физические свойства моносилицида железа FeSi изучаются несколько последних десятилетий. Фактически, FeSi при высоких температурах является металлом, и, с понижением температуры превращается в узкозонный полупроводник [1, 2]. FeSi характеризуется необычным поведением магнитной восприимчивости, теплоемкости, удельного сопротивления и других физических свойств [3–5].

Недавно была обнаружена низкотемпературная металлическая проводимость в нитевидном FeSi, что указывает на существование проводящей поверхности, как это имеет место в топологическом изоляторе [6].

Образцы для измерений были вырезаны из известного монокристалла FeSi (см., например, обзор [7]), выращенного методом Чохральского. Теплоемкость образца измерялась с помощью системы измерения физических свойств Quantum Design с модулем теплоемкости и вставкой He-3. Удельное сопротивление измерялось по стандартной четырехкон-

тактной схеме с золотыми проводами, прикрепленными к образцу серебряной пастой в качестве электрических контактов. Магнитная восприимчивость измерялись с помощью системы измерения магнитных свойств Quantum Design.

Удельное сопротивление FeSi (рис. 1) демонстрирует сложное поведение, демонстрируя разные режимы проводимости.

Рисунок 1 (см. линию 1 на вставке) показывает, что в узком диапазоне температур 100–150 К сопротивление объемного образца FeSi может быть описано стандартной активационной формулой с энергетической щелью E_g 0,06 eV или 700 К. Линия 2 на вставке — это кривая сопротивления нитевидного FeSi, которая, как утверждается в [6], демонстрирует вторую щель в диапазоне 30–54 К, и которая не наблюдается в нашем объемном FeSi.

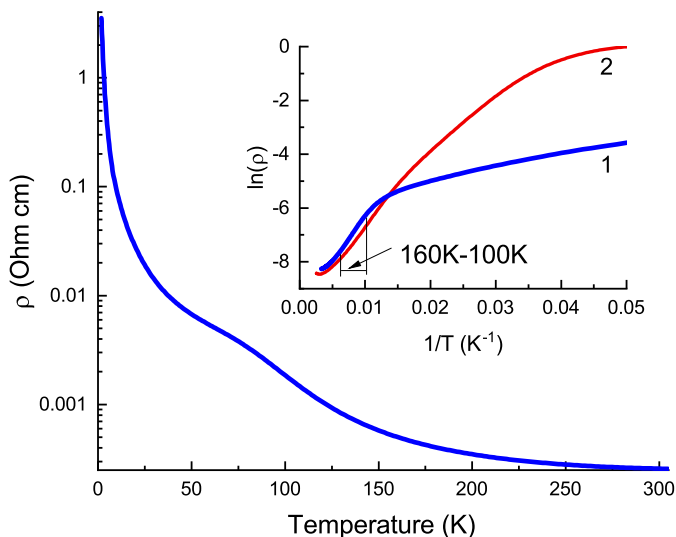


Рис. 1. Удельное сопротивление ρ FeSi как функция температуры. На вставке две линии демонстрируют поведение удельного сопротивления образцов 1 и 2 в координатах $\ln(\rho)$ и T^{-1} . 1 — объемный образец FeSi, 2 — нитевидный образец FeSi [6]

Измерения магнетосопротивления проводились в двух ориентациях магнитного поля: продольным ($I \parallel H$) и поперечным ($I \perp H$), ток всегда был направлен вдоль $[100]$ ($I \parallel [100]$). Во время измерений образец ступенчато охлаждался от 300 К до 1.8 К (см. рис. 2, 3). Результаты измерений магнетосопротивления показаны на рис. 2 и 3. Видно, что нет существенной разницы в результатах, полученных в двух разных ориентациях. Изменение направления магнитного поля при измерениях сопротивления FeSi показывает отсутствие значимого холловского вклада в текущих измерениях.

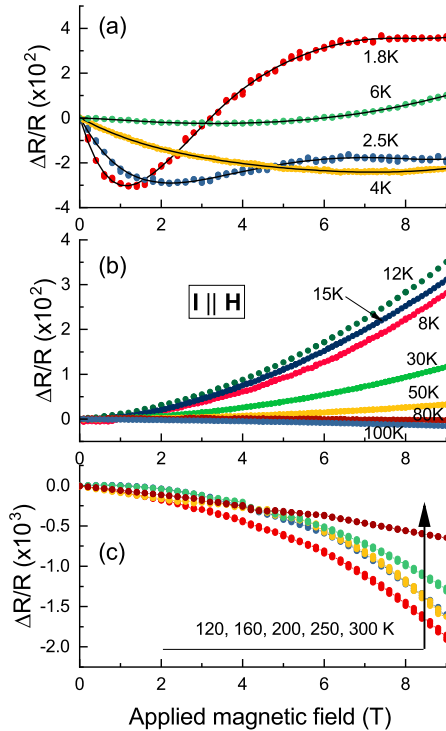


Рис. 2. Магнетосопротивление FeSi как функция температуры и продольного магнитного поля ($I \parallel H$, $I \parallel [100]$ для всех панелей). Изменен масштаб $\Delta R/R$ на панели (c)

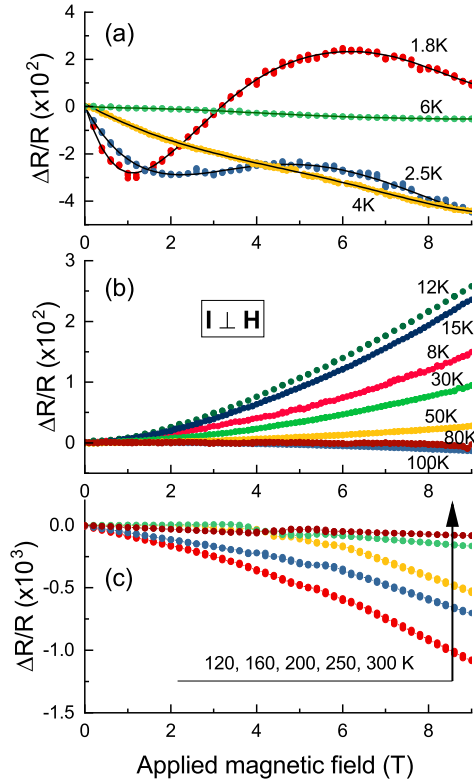


Рис. 3. Магнитосопротивление FeSi как функция температуры и поперечного магнитного поля ($I \parallel H$, $I \parallel [100]$ для всех панелей). Изменен масштаб $\Delta R/R$ на панели (c)

Результаты и обсуждение

Мы опускаем анализ магнетосопротивления FeSi при $T \leq 6$ K. Низкотемпературная область, содержащая частично отрицательные изотермы MR, характеризуется взаимодействием локализованных и свободных носителей. Поэтому каждая кривая $\rho(M)$ требует специального анализа.

Переходя к более высоким температурам при $T > 6$ K, можно увидеть общее уменьшение магнетосопротивления FeSi с температурой, что

на первый взгляд можно было бы объяснить увеличением концентрации носителей индуцированной металлизацией и уменьшением средней длины свободного пробега носителей. Однако, как показывает максимум MR при 12 К, не все так просто. Для описания ситуации можно предположить существование двух компонент магнетосопротивления, положительную и отрицательную, причем последняя начинает увеличиваться вблизи 12 К.

Заключение

Магнетосопротивление FeSi (рис. 2, 3) (1) слабо чувствительно к ориентации образца относительно магнитного поля, (2) MR можно разделить на две группы по температуре измерений: низкая $T < 6$ К и высокая $T > 6$ К. В отличие от низкотемпературной зоны, MR при высоких температурах ведет себя довольно регулярно в зависимости от магнитного поля и температуры. Высокотемпературная часть MR проходит через максимум примерно при 12 К и постепенно уменьшается, приближаясь к слегка отрицательным значениям, а затем к нулю. Таким образом, наблюдения предполагают существование отрицательной компоненты MR, появляющейся примерно при 12 К, окончательно определяя отрицательные значения как поперечного, так и продольного магнетосопротивления FeSi при высоких температурах. Однако следует отметить, что, как показано на рис. 2,с и 3,с, в FeSi продольное MR конечно и отрицательно, тогда как поперечное MR практически равно нулю при 300 К, что предположительно указывает на топологическую природу отрицательной компоненты MR.

Список литературы

- [1] K. Ishizaka, T. Kiss, T. Shimojima, T. Yokoya, T. Togashi, S. Watanabe, C. Q. Zhang, C. T. Chen, Y. Onose, Y. Tokura, and S. Shin // Phys. Rev. B **72**, 233202 (2005).
- [2] M. Arita, K. Shimada, Y. Takeda, M. Nakatake, H. Namatame, M. Taniguchi, H. Negishi, T. Oguchi, T. Saitoh, A. Fujimori, and T. Kanomata // Phys. Rev. B **77**, 205117 (2008).

- [3] V. Jaccarino, G. K. Wertheim, J. H. Wernick, L. R. Walker, and S. Aarjns // Phys. Rev. **160**, 476 (1967).
- [4] M. B. Hunt, M. A. Chernikov, E. Felder, H. R. Ott, Z. Fisk, and P. Canfield // Phys. Rev. B **50**, 14 933 (1994).
- [5] D. Mandrus, J. L. Sarrao, A. Migliori, J. D. Thompson, and Z. Fisk // Phys. Rev. B **51**, 4763, 1995.
- [6] Yuankan Fang, Sheng Ranc, Weiwei Xied, Shen Wange, Ying Shirley Menge, and M. Brian Maple, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **115**, 8558 (2018).
- [7] S. M. Stishov, A. E. Petrova, Physics-Uspekhi **66**, 576 (2023).

Подход фазы Берри для сильно коррелированных электронных систем

Д. В. Фёдоров

*Сколковский институт науки и технологий, г. Москва, Россия
E-mail: Dm.Fedorov@skoltech.ru*

С момента публикации известной статьи Майкла Берри [1], довольно элегантно разъясняющей механизм возникновения геометрической или топологической фазы в квантовых системах, соответствующий подход нашел широкое применение в различных областях физики, изучающих свойства электронных систем [2]. Особый интерес представляют явления, вызванные разделением квантово-механических систем на «медленные» и «быстрые» подсистемы, что допустимо для теоретического описания многих материальных объектов. Хорошим примером применимости такого разделения являются твёрдые тела, часто рассматриваемые в рамках приближения Борна-Оппенгеймера. Для таких систем, фаза, связность и кривизна Берри возникают вследствие параметрической зависимости блоховских функций электронов от волнового вектора (квазиимпульса), в котором закодирована информация о расположении (статических) атомных ядер. В данной области исследований, теоретические работы вышли на уровень первопринципных расчётов

кривизны Берри, которые уже успешно осуществлены в рамках ряда вычислительных методов [3].

Выход за рамки приближения независимых электронов, движущихся в поле неподвижных ядер, существенно усложняет задачу, особенно для случая сильно коррелированных электронных систем. Во-первых, правильный учёт динамики ядер требует применения точной факторизации полной волновой функции на электронную и ядерную [4]. Такой подход был изначально разработан для молекулярных систем как в терминах волновых функций [5], так и на основе электронной плотности [6]. Позднее произошло его обобщение на случай описания электрон-фононных систем в рамках теории функционала плотности (ТФП) [7], что позволило получить более прозрачный формализм, чем предоставляемый такими методами как ТФП для сверхпроводников [8] или многокомпонентная ТФП [9]. Во-вторых, учёт (сильных) корреляционных взаимодействий между электронами вносит дополнительную степень усложнения задачи. Среди ряда интересных работ в этом направлении, можно отметить изучение влияния фазы Берри на динамику квазичастиц в эффектах сверхтекучести [10] и сверхпроводимости [11], включая рассмотрение магнитных сверхпроводников [12]. Весьма интригующие исследования базируются на идее описания самого механизма сверхпроводимости в терминах фазы, связности или кривизны Берри [13]. Однако, расчёты подобных явлений из первых принципов отсутствуют на данный момент [14].

Предлагается краткий обзор вышеперечисленных аспектов, а также обсуждение перспектив первопринципного описания эффектов фазы (связности и/или кривизны) Берри в сильно коррелированных электронных системах / для сверхпроводимости.

Список литературы

- [1] M. V. Berry, *Proc. R. Soc. A* **392**, 45 (1984).
- [2] D. Xiao, M.-C. Chang, and Q. Niu, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1959 (2010).
- [3] M. Gradhand, D. V. Fedorov, F. Pientka *et al.*, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 213202 (2012).

- [4] A. Abedi, N. T. Maitra, and E. K. U. Gross, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 123002 (2010).
- [5] R. Requist, F. Tandetzky, and E. K. U. Gross, *Phys. Rev. A* **93**, 042108 (2016).
- [6] R. Requist and E. K. U. Gross, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 193001 (2016).
- [7] R. Requist, C. R. Proetto, and E. K. U. Gross, *Phys. Rev. B* **99**, 165136 (2019).
- [8] L. N. Oliveira, E. K. U. Gross, and W. Kohn, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2430 (1988).
- [9] T. Kreibich and E. K. U. Gross, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2984 (2001).
- [10] C. Zhang, A. M. Dudarev, and Q. Niu, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 040401 (2006).
- [11] Z. Wang, L. Dong, C. Xiao, and Q. Niu, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 187001 (2021).
- [12] S. Murakami and N. Nagaosa, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 057002 (2003).
- [13] H. Koizumi, *J. Supercond. Nov. Magn.* **34**, 2017 (2021).
- [14] C. Pellegrini and A. Sanna, *Nat. Rev. Phys.* **6**, 509 (2024).

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ, КВАНТОВЫЕ ЭФФЕКТЫ И ПРОЧИЕ ЗАГАДКИ

Критическая динамика спин-бозонной модели

М. Г. Васин^{1,*}, А. А. Елистратов¹, С. В. Ремизов¹

¹*Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики*

им. Н. Л. Духова, г. Москва, Россия

**E-mail: dr_vasin@mail.ru*

В представленной работе изучаются низкоэнергетические свойства спин-бозонной модели (SBM), которая описывает динамику 1/2-спина, связанного с бозонным термостатом, характеризующимся спектральной плотностью $f(\omega) \propto |\omega|^s$. Теоретическое описание построено в технике Келдыша–Швингера, основанной на представлении 1/2-спина майорановскими спинорами. Мы исследуем критическую динамику системы вблизи квантового фазового перехода, проанализировав систему уравнений ренормализационной группы. Предложенный теоретический подход является более универсальным, в отличие от подхода, основанного на квантово-классическом отображении [1], поскольку он применим для $0 < s \leq 1$. Мы показываем, что как в омическом случае $s = 1$, так и в субомическом $0 < s < 1$ в рассматриваемой модели наблюдается квантовый фазовый переход второго рода, а вычисленный критический показатель намагниченности согласуется с точным результатом гиперскейлинга и результатами численных расчётов [2, 3], $1/\delta = (1-s)/(1+s)$. Кроме того, получена зависимость критического значения константы спин-бозонной связи от температуры теплового резервуара.

Список литературы

- [1] A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, M. P. A. Fisher, A. Garg, and W. Zwerger // *Rev. Mod. Phys.* **59**, 1 (1987).
- [2] M. Vojta, N.-H. Tong, and R. Bulla // *Phys. Rev. Lett.* **94**, 070604 (2005).
- [3] Y.-Z. Wang, S. He, L. Duan, and Q.-H. Chen // *Phys. Rev. B* **100**, 115106 (2019).

Плавление алмаза и вольфрама и фазовые переходы под воздействием импульсного лазера при давлениях до 50 ГПа

К. М. Булатов, Ф.С. Хоробрых, Д. Журавлев, И.Б. Кутуза, П. В. Зинин

Научно-технологического центра уникального приборостроения РАН

Прямое наблюдение плавления алмаза при высоких давлениях трудно достижимо, поскольку алмаз прозрачен для лазерного излучения и прямой нагрев алмаза невозможен. Поэтому в работе [1] использовалась смесь порошков алмаза и никеля для нагрева лазерным излучением в камере высокого давления с алмазными наковальнями (КВДАН). При нагреве наблюдались как прямые, так и каталитические переходы алмаза в луковичные структуры. В данной работе исследовался процесс плавления алмаза под действием импульсного нагрева вольфрамовой пластинки в КВДАН. При давлении в 50 ГПа, в момент плавления вольфрама при температурах вблизи 3800 К наблюдалась мощная вспышка, внутри которой температура достигала 4500 К.

В результате вспышки на алмазных наковальнях образуются кратеры глубиной в несколько микрон (рис. 1).

Диаметр углублений составляет от двух до трех микрон. Анализ углублений, проведенный с использованием сканирующего электронного микроскопа и спектроскопии комбинационного рассеяния света, показал, что в углублениях отсутствует графитовая фаза. Это является свидетельством того, что произошло плавление алмаза.

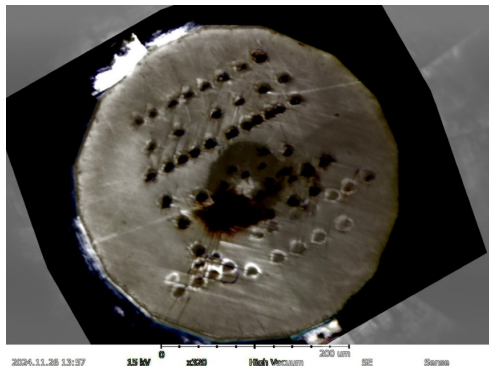


Рис. 1. Фотографии поверхности алмазной наковальни после нагрева вольфрама импульсным лазером

В работе также обсуждаются преимущества использования мультиспектральных камер для изучения плавления металлов при высоких давлениях и температурах.

Список литературы

- [1] М. У. Попов, В. Д. Чуркин, В. А. Кулнитский, А. Н. Кириченко, К. М. Булатов, А. А. Быков, Р. В. Зинин, В. Бланк. “Transformation of diamond to fullerene-type onions at pressure 70 GPa and temperature 2400 K” // *Nanotechnology*. **31** 315602(1-6) (2020).

Уравнения состояния металлов при высоких давлениях и температурах

И. В. Ломоносов

ФИЦ ПХФ и МХ РАН, г. Черноголовка, Россия

Физические процессы, возникающие в условиях высоких плотностей энергии, таких, как высокоскоростной удар, действие мощных по-

токов энергии на конденсированных сред и других, представляют интерес для фундаментальных исследований, так и для многочисленных практических применений. Характерные особенности этих явлений — сложный характер 3D газодинамического потока и большие градиенты параметров. Численное моделирование процессов в экстремальных условиях обеспечивает поддержку экспериментальных исследований в этой области [1, 2]. С другой стороны, моделирование - единственный инструмент для исследования явлений, которые не могут проводиться в лабораторных условиях [3]. Значительный прогресс в компьютерной индустрии в последние 20 лет привел к развитию высокопроизводительных компьютеров и эффективные численные схем. Уравнение состояния (УРС) замыкает систему уравнений газовой динамики и в значительной степени определяет точность и надежность результатов численного моделирования. В докладе формулируются основные математические и физические требования к широкодиапазонным УРС.

Современное состояние проблемы теоретического описания термодинамических свойств вещества при высоких давлениях, высоких температурах приведены в ряде работ [1–3]. Несмотря на значительный прогресс, достигнутый в разработке УРС твердой, жидкой и плазменной фаз с использованием самых современных «первопринципных» теоретических подходов (классические и квантовые методы, диаграммная техника, квантовые методы Монте-Карло и молекулярной динамики) недостатком этих теорий является их региональный характер [2]. Диапазон применимости каждой теории является локальным и, строго говоря, не позволяет обеспечить для правильный теоретический расчет термодинамических свойств вещества на всей плоскости фазой диаграммы от холодного кристалла к жидкости и горячей плазме. Основной проблемой здесь является необходимость правильного учета сильного коллективного межчастичного взаимодействия в неупорядоченных средах, что встречает особые трудности в области, занятой неидеальной плазмой [2]. В этом случае экспериментальные данные при высоких давлениях и температурах, имеют особое значение, поскольку служат в качестве реперных для теории и полуэмпирических моделей. Данные, полученные с ис-

пользованием динамических методов (см. [4] и ссылки в них) крайне важны с практической точки зрения. Ударно-волновые методы позволяют изучить широкий спектр фазовой диаграммы от сжатого горячего вещества до неидеальной плазмы и квази-газовых состояний. Имеющиеся экспериментальные данные по ударному сжатию сплошных и пористых металлов, а также изоэнтروпического расширения включают девять порядков по давлению и четыре по плотности.

Обсуждается УРС [4], определяемое потенциалом свободной энергии для металлов в всей практически важной области фазовой диаграммы. Оно учитывает твердую, жидкую и плазменные фазы, а также двухфазные области плавления и испарения. В УРС отдельные коэффициенты - константы, характерные для каждого металла (атомный вес и заряд, плотность при нормальных условиях и др.) и находятся из табличных данных, а остальные служат в качестве подгоночных параметров и их значения находятся из оптимального описания имеющихся экспериментальных и теоретических данных и обеспечения правильных асимптот к расчетам на основе теорий Дебая-Хюккеля и Томаса-Ферми. Для построения УРС использованы следующие данные: измерения изотермической сжимаемости в алмазных наковальнях, данные по скорости звука и плотности жидких металлов при атмосферном давлении, электровзрыв проволочек, регистрации ударной сжимаемости твердых и пористых образцов, измерения ударной сжимаемости при подземных взрывах, данных по изоэнтропическому расширению, расчеты по моделям Дебая-Хюккеля и Томаса-Ферми, оценки критической точки.

Проводится иллюстративная дискуссия построения широкодиапазонного УРС алюминия с учетом всего комплекса имеющейся при высоких давлениях и температурах информации. Отдельно обсуждаются экспериментальные данные в области терапаскальных давлений и проблема надежного расчета свойств ударной адиабаты алюминия как эталона высоких динамических давлений. Приводятся результаты новых измерений, выполненных с помощью кумулятивного взрывного генератора, и результат описания области ударного сжатия при высоких динамических давлениях

Рассматриваются задачи численного моделирования высокоэнергетических процессов, на примерах показана важность корректного учета эффектов плавления и испарения при высоких давлениях и температурах.

Список литературы

- [1] Physics of High Energy Density / Eds. P. Caldirola, H. Knoepfel. — New York: Academic Press, 1971.
- [2] Fortov V. E., and Yakubov I. T. Non-ideal plasma. — Atomenergoizdat, Moskva (1994) [in Russian].
- [3] Zeldovich Ya. B., and Raizer Yu. P. Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena. — Academic Press, New York (1966, 1967).
- [4] Lomonosov I. V. Laser & Part. Beams. 25(4), 567-584, 2007.

О новом классе фазовых переходов первого рода

Г. Э. Норман^{1,*}, И. М. Саитов¹

¹НИИ ВШЭ

^{*}E-mail: gnorman@hse.ru

1. **Химическая модель.** Плазменный фазовый переход (ПФП) [1] предсказан в рамках трёхкомпонентной модели. В уравнениях состояния и ионизационного равновесия учитывались кулоновское взаимодействие между электронами и ионами и их короткодействующее эффективное квантовое отталкивание, атомы считались идеальным газом. При высоких неидеальностях система теряла устойчивость и расслаивалась на две фазы. Ван-дер-Ваальсов вид имела зависимость концентрации атомов от концентрации зарядов. Фазовое равновесие свелось к равенству концентраций атомов двух фаз.

Биберман и Норман [2] рассмотрели метастабильные состояния, порождаемые ПФП, и обнаружили их аномальный характер. Имеют ме-

сто сильные перекрытия по объёму стабильной ветви одной фазы и метастабильной ветви другой на изотерме зависимости давления от объёма. В области перекрытия изотерма, в силу своего наклона, оказывается трехзначной функцией (три значения давления соответствуют одному значению объёма), в отличие от однозначной изотермы Ван-дер-Ваальса (рис. 1). В работе [3] аналогичная особенность обнаружена при исследовании фазового перехода, обусловленного диссоциацией молекул. Это позволило авторам [3] в 2022 году предложить объединить плазменный и диссоциационный фазовые переходы в новый класс фазовых переходов первого рода.

Другой особенностью, заслуживающей выделения ПФП в новый класс фазовых переходов, является то, что давление уменьшается по мере приближения к критической точке на рис. 1. Такое поведение также отличается от уравнения Ван-дер-Ваальса. На рис. 1 схематично изображены изотермы и бинадаль для газа Ван-дер-Ваальса (а) и флюида водорода (б). Линия сосуществования фаз выглядит как длинный, изогнутый и узкий язык, который довольно сложно ограничить и определить положение критической точки. Эта картина имеет место как в химической модели, так и при расчётах ТФП для флюида водорода [4].

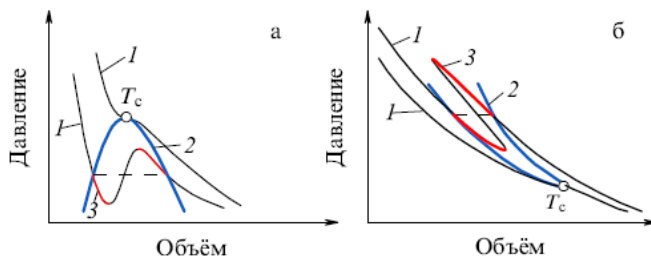


Рис. 1. Изотермы и критическая точка Ван-дер-Ваальса (а) и ПФП (б)

2. ТФП. К этой же задаче был применён метод теории функционала плотности (ТФП) [4]. Этот современный подход часто называют *ab initio*, несмотря на содержащиеся в нём приближения. ТФП — это огромный шаг по сравнению с химической моделью. Однако между этими

двумя подходами при описании фазового перехода флюид-флюид в разогретом плотном водороде с помощью ТФП и при описании ПФП в рамках химической модели есть важная принципиальная общность.

В обоих случаях имеет место скачок плотности, и он сопровождается скачком ионизации. Последнее в ТФП проявляется как скачок электропроводности, в химической модели — как увеличение скачком концентрации зарядов и степени ионизации. Эта внутренняя общность между результатами описания фазового перехода в рамках двух подходов привела и к качественной общности принципиальных результатов (рис. 1,б). В рамках ТФП подтверждены особенности, предсказанные химической моделью, которые мы обсуждали выше.

Исследование осуществлено в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

Список литературы

- [1] Г. Э. Норман, А. Н. Старостин // ТВТ, 1968, **6**, 410.
- [2] Л. М. Биберман, Г. Э. Норман // ТВТ, 1969, **7**, 822.
- [3] А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин // ЖЭТФ, 2022, **161**, 238.
- [4] Г. Э. Норман, И. М. Саитов // УФН, 2021, **191**, 1153.

Рассеяние света электронами и структурный переход в Sr_2VO_4

Ю. С. Поносов^{1,*}, Xubin YE², Y. W. Long², С. В. Стрельцов^{1,3}

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

²*Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, China*

³*Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия*

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

Исследование основного состояния перовскита Sr_2VO_4 интересно из-за предсказаний нетривиального спинового и орбитального порядка

в этом соединении [1]. Оно кристаллизуется в K_2NiF_4 структуре и имеет электронную конфигурацию иона V^{4+} на t_{2g}^1 орбитали с $S = 1/2$ в тетрагональном кристаллическом поле октаэдра VO_6 . Структурные переходы обнаружены в области $T_c = 101\text{--}127$ K, а магнитный переход — при $T_N = 10$ K [2]. Сделано предположение, что структурный переход обусловлен орбитальным упорядочением [3]. Экспериментальные и теоретические исследования предполагают наличие очень узкой Моттовской щели (~ 80 мэВ), что затрудняет проведение эксперимента из-за сложности синтеза однофазных поликристаллических образцов.

Мы представляем первое экспериментальное исследование монокристалла Sr_2VO_4 методом неупругого рассеяния света. Число и симметрия основных наблюдаемых в спектрах линий ($2A_{1g}$ на 200 и 557 см^{-1} и $2E_g$ на 127 и 286 см^{-1}) согласуется с правилами отбора для пространственной группы $I4/mmm$, определенной при 300 K [4]. Интригующим обстоятельством является расщепление A_{1g} линии на 557 см^{-1} . Однако, кроме основных линий, спектры содержат несколько более слабых широких линий, которые при охлаждении кристалла ниже 140 K преобразуются в ряд узких линий A_{1g} и B_{1g} симметрии. Это предполагает формирование при $T_s < 80\text{--}90$ K решетки орторомбической симметрии с гораздо большим числом атомов, чем считалось ранее. Наличие дополнительных линий в спектре предполагает, что уже при комнатной температуре существует нарушение симметрии, а эти широкие линии содержат информацию о плотности фоновных состояний низкотемпературной фазы.

Фононные линии в спектрах наложены на растущий к низким частотам континуум, интенсивность которого имеет наибольшую величину для симметрии рассеяния B_{1g} . Ширина этого «центрального» пика уменьшается с понижением температуры, а интенсивность падает при $T < 140$ K. Он практически исчезает при $T < T_s$ с появлением фоновных линий симметрии B_{1g} . Как раз моды данной симметрии ($x^2 - y^2$) должны стать активными в низкотемпературной орторомбической фазе. Можно предположить, что наблюдаемое электронное рассеяние представляет собой орбитальные флуктуации, которые существуют уже в высокотемпературной фазе и являются признаками нарушения тетрагональной

симметрии в ней, приводящего к дополнительным возбуждениям в фоновном спектре.

Список литературы

- [1] Yoshiki Imai, Igor Solovyev, and Masatoshi Imada, PRL **95**, 176405 (2005).
- [2] Hiroya Sakurai, Physics Procedia, **75**, 829–836, (2015).
- [3] R. Viennois, E. Giannini, J. Teyssier, J. Elia, J. Deisenhofer, D. Van der Marel, Journal of physics: Conference Series **200**, 012219, (2010).
- [4] M. Cyrot *et al.*, J. Solid State Chem. **85**, 321 (1990).

On the topological features of the helical phase transition in 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*

Many decades of study have revealed very unusual properties of the helical phase transition in MnSi. This situation is briefly described and illustrated in the present note. As one will be able to see, one peculiarity is that the phase transition point in MnSi is accompanied by extremes of different thermodynamic and kinetic quantities on the high temperature side of the transition, which look similar to a property of 2D systems.

Introduction

MnSi is a weak zone ferromagnetic 3d metal crystallizing in a non-centrosymmetric cubic structure B 20, characterized by the space group P2₁3, which does not contain a center of symmetry. The magneto-ordered state in

MnSi was found in [1]. The same work indicated that magnetic transformation in MnSi takes place at a temperature of 30 K. Helical magnetic order in MnSi was established in [2]. The magnetic structure of MnSi in a zero magnetic field can be described as a system of planes parallel to the crystallographic plane (111) containing ferromagnetically ordered spins. The magnetic moment of each layer is rotated by a small angle relative to the magnetic moment of adjacent layers due to the Dzyaloshinsky–Moria interaction. As a result, in the magnetically ordered phase (below ~ 29 K), the spins form an incommensurate helix with a wave vector $\sim 0.036 \text{ \AA}^{-1}$ (corresponding to a period of $180 \text{ \AA}$) in the direction [111]. Fig. 1–3 show the heat capacity, coefficient of thermal expansion and elastic modulus c_{11} of MnSi in the phase transition region along with corresponding data for KDP (KH_2PO_4) ferroelectric crystal. The KDP crystal is one of the model materials exhibiting a small first order phase transition close to a second order phase transition. A drastic difference in the character of the phase transitions in both cases is quite obvious. In contrast to the KDP case, the phase transition in MnSi is accompanied by extremes or shoulders of different thermodynamic and kinetic quantities.

Heat Capacity

Measurements of heat capacity on high quality crystals in magnetic fields up to 4 Tesla have been carried out in [6, 7] (Fig. 1). As follows from Fig. 1,a the heat capacity curve $C_p(T)$ at $B = 0$ is characterized by a sharp peak at $T_c = 28.8 \text{ K}$ corresponding to the phase transition and a distinct “shoulder” on its high-temperature side, as a contrast to the behavior of the heat capacity at the phase transition in KDP Fig. 1,b [4].

Thermal expansion

Detailed studies of the thermal expansion of MnSi were carried out in [3], the results of which are presented in Figs. 2. These results are compared with the thermal expansion measurements of KDP [5] Fig. 2,b.

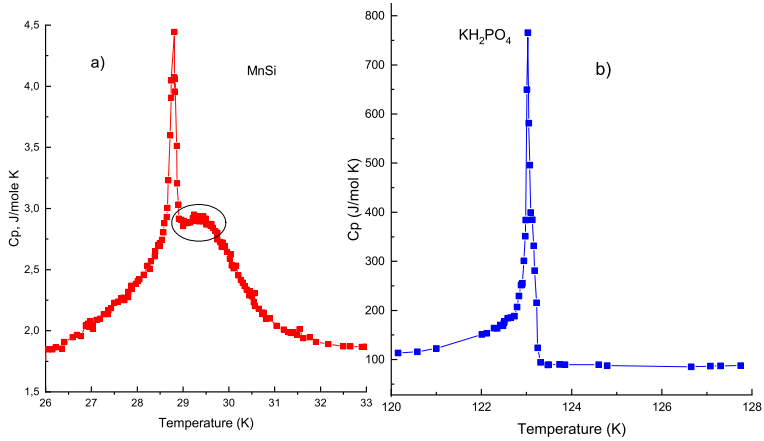


Fig. 1. Heat capacity of MnSi at magnetic phase transition (a) [3]. Heat capacity of KDP at ferroelectric phase transition (b) [4]. The hump marked by ellipse in (a) demonstrates the specific feature of the phase transition in MnSi when comparing with other typical phase transition of first order close to the second order (see b)

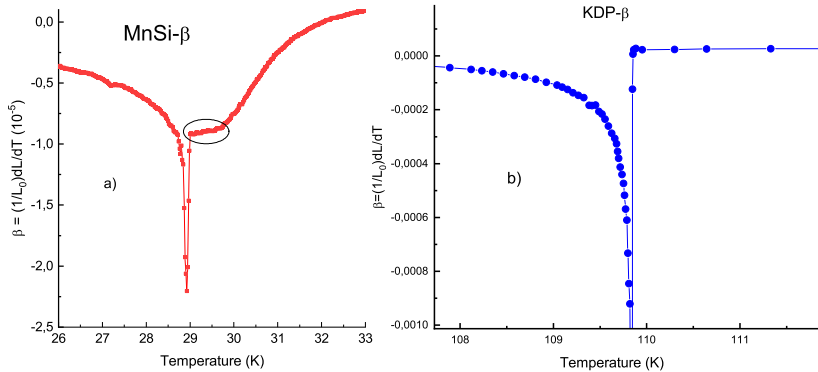


Fig. 2. Thermal expansion coefficient of MnSi at magnetic phase transition (a) [3]. Thermal expansion coefficient of KDP at ferroelectric phase transition near the tricritical point at pressure 2621.5 bar (b). Again, the shallow minimum indicated by the ellipse near the sharp negative peak in (a) is the peculiarity of the phase transition in MnSi compared to other typical first order phase transitions close to the second order [5] (see b)

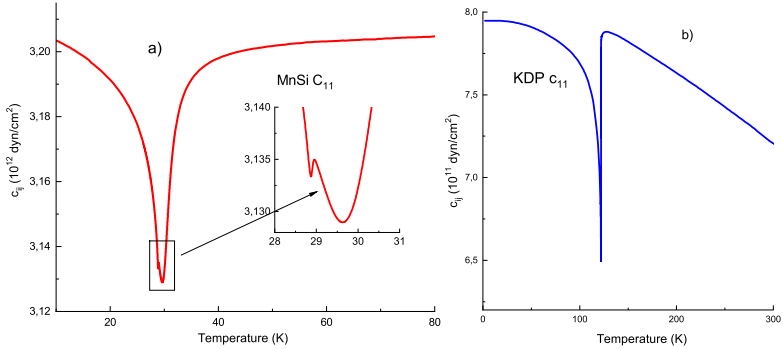


Fig. 3. Elastic module c_{11} of MnSi at magnetic phase transition (a) [6]. The depicted vast minima of c_{11} indicates that a tiny peak corresponding first order transition is only a minor feature of the global transformation in MnSi (In this connection see also Fig. 3). Nothing like that can be seen in Fig. 4,b [7]

Elastic properties

As can be seen from Fig. 4,a, the magnetic phase transition in MnSi is accompanied by a deep anomaly (softening) of the elastic modulus C_{11} . At the same time, the magnetic phase transition itself appears as a small jump of the elastic modulus localized on the low-temperature side of the anomaly. Note that both of these features correlate perfectly with the behavior of heat capacity, thermal expansion coefficient, and temperature coefficient of electrical resistivity [3], except that the sharp maxima and minima of these thermodynamic and transport properties at the phase transition point are replaced by modest jumps in elastic moduli.

Monte-Carlo calculations

Monte Carlo simulations of the classical chiral spin system were performed in the paper [8]. The spin configurations are displayed in Fig. 4 at different temperatures. It can be seen that the vortex structure of the configuration at temperatures above $T_c \cong 0.96$. It is not excluded that these vortices are topological objects and just their destruction provides the indicated specific in the heat capacity.

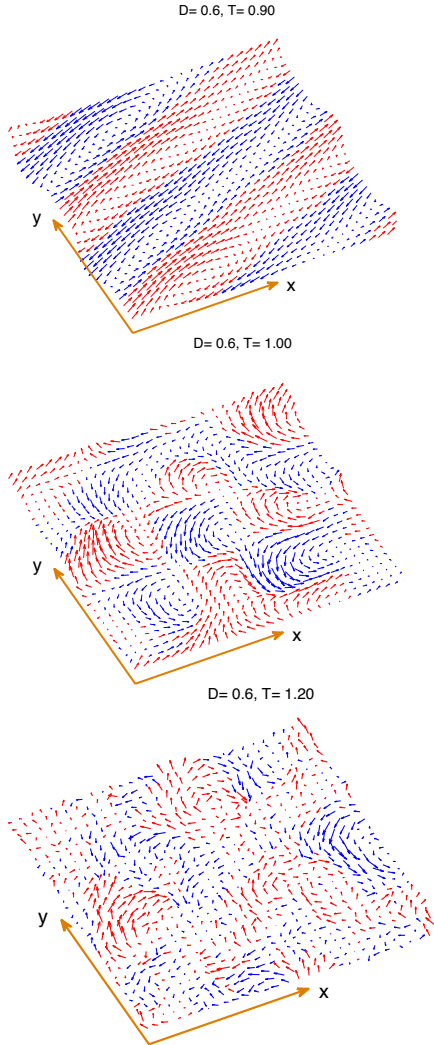


Fig. 4. Spin configurations at helical phase transition in classical chiral spin system Monte-Carlo calculations at $J = 1$ and $D = 0.6$. Phase transition point $T_c \cong 0.96$. Vortex structure of spins is clearly seen at temperature above T_c , corresponding to side maximum (shoulder) in C_p [8]

Discussion

As can be seen in the previous sections that in contrast to the KDP case, the phase transition at about 28 K in MnSi is accompanied by extremes or shoulders of different thermodynamic and kinetic quantities. At the same time the additional extra peculiarity of all transformations in MnSi on the way from the helical magnetic to the paramagnetic state is that the small helical first order phase transition does not much affect the behavior of thermodynamic quantities with temperature variation.

All this probably proves that the phase transition at 28 K, being only a minor feature of the transformation, manifests only a loss of long-range helical order, but leaves practically intact the general spin ability to form spiral structures. Finally, the whole situation can be tentatively described as a phase transformation of the helical phase of MnSi to the paramagnetic state, occurring in two steps, at beginning as a first order transition and then as a topological one.

References

- [1] H. J. Williams, J. H. Wernick, R. C. Sherwood, and G. K. Wertheim, Magnetic Properties of the Monosilicides of Some 3d Transition Elements // J. Appl. Phys. 37, 1256 (1966).
- [2] Y. Ishikawa, K. Tajima, D. Bloch and M. Roth, Helical spin structure in manganese silicide MnSi // Solid State Commun. 19, 525 (1976).
- [3] S. M. Stishov, A. E. Petrova, S. Khasanov, G. K. Panova, A. A. Shikov, J. C. Lashley, D. Wu, and T. A. Lograsso, Magnetic phase transition in the itinerant helimagnet MnSi: Thermodynamic and transport properties // Phys. Rev. B76, 052405 (2007).
- [4] B. A. Strukov, M. Amin, and V. A. Kopchik, Comparative Investigation of the Specific Heat of KH_2PO_4 (KDP) and KD_2PO_4 (DKDP) Single Crystals // Phys. Stat. Sol. 27, 741 (1968).
- [5] A. N. Zisman, V. N. Kachinskii, Thermal Expansion of Ferroelectric KH_2PO_4 , unpublished (1979).

- [6] A. E. Petrova, S. M. Stishov, Ultrasonic studies of the magnetic phase transition in MnSi // J. Phys. Condens. Matter 21, 196001 (2009).
- [7] A. E. Petrova, S. M. Stishov, Elastic properties of KH_2PO_4 at the ferroelectric phase transition // Solid State Communications, 171, 26 (2013).
- [8] A. M. Belemuk and S. M. Stishov, Phase transitions in chiral magnets from Monte-Carlo simulations // Phys. Rev. B95, 224433 (2017).

Преобразование оксидов ванадия для оптимизации электронных свойств фазового перехода диэлектрик-металл

Д. П. Судас, Г. Г. Якущева, П. И. Кузнецов

*Фрязинский филиал Института радиотехники и электроники
им. В. А. Котельникова РАН, г. Фрязино, Россия*

Почти все оксиды ванадия проявляют сильные электронные корреляции, выражающиеся в значительном влиянии степени заполнения электронных зон на их энергетическую структуру. Это приводит к возникновению безгистерезисного электронного перехода Мотта [1] — фазового перехода второго рода, связанного с коллективной перестройкой электронных состояний. Данный переход, в свою очередь, может индуцировать более медленный структурный переход Пайерлса [2], который, в отличие от перехода Мотта, обладает термическим гистерезисом и относится к переходам первого рода. В результате такой перестройки материал изменяет свои электронные свойства: из исходного полупроводникового состояния он переходит в металлическое (MIT — metal-to-insulator transition). Таким образом, взаимосвязь между переходом Мотта и переходом Пайерлса определяет уникальные функциональные свойства оксидов ванадия, включая управляемое переключение между диэлектрическим и металлическим состояниями.

В зависимости от количества ванадия в оксиде критическая температура перехода будет отличаться от криогенных ($-133\text{ }^{\circ}\text{C}$ для V_2O_3) до относительно высоких ($250\text{ }^{\circ}\text{C}$ для V_3O_5). Самым перспективным для практического использования является диоксид ванадия VO_2 с MIT переходом около $60\text{--}70\text{ }^{\circ}\text{C}$ [3]. Каждый из оксидов ванадия с MIT [4] обладает разной температурой перехода, а также свойства этих переходов зависят от фазового состава, морфологии поверхности выращиваемого оксида, подложки и примесей, содержащихся в материале и его кристалличности [5].

Три-изопропоксид ванадила использовали для нанесения тонких пленок оксидов ванадия на сапфировые подложки в инертной атмосфере аргона при температурах осаждения $150\text{--}290\text{ }^{\circ}\text{C}$ методом химического парофазного осаждения из металлоорганических соединений. Получаемые плёнки содержали в основном фазы V_2O_5 и V_6O_{13} и незначительное количество фаз V_2O_3 , VO_2 и V_3O_5 [6]. Их соотношение сильно зависело от температуры осаждения и количества кислорода в газовой фазе. Для пленок, выращенных вблизи верхнего температурного диапазона $290\text{ }^{\circ}\text{C}$, при измерении температурной зависимости сопротивления был обнаружен слабый фазовый переход при $69\text{ }^{\circ}\text{C}$ из фазы VO_2 . С помощью рамановских измерений было установлено, что путем отжига осажденных многофазных пленок при температурах $290\text{--}470\text{ }^{\circ}\text{C}$ в атмосфере аргона или водорода можно получить чистую фазу VO_2 . Реакция восстановления происходит при участии углерода, образующегося при диспропорционировании углеводородных радикалов, возникающих при термическом разложении использованной органики. После отжига пленки на сапфире становятся поликристаллическими. Выявлено, что изначально большее количество пентоксида ванадия в составе затрудняет получение диоксида методом отжига в инертной атмосфере и требует больших температур отжига. При этом V_6O_{13} восстанавливается до VO_2 как в присутствии водорода, так и без.

Скачок электрического сопротивления на образцах покрытий по мере отжига показан на рисунке 1.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФИРЭ им.
В. А. Котельникова РАН.

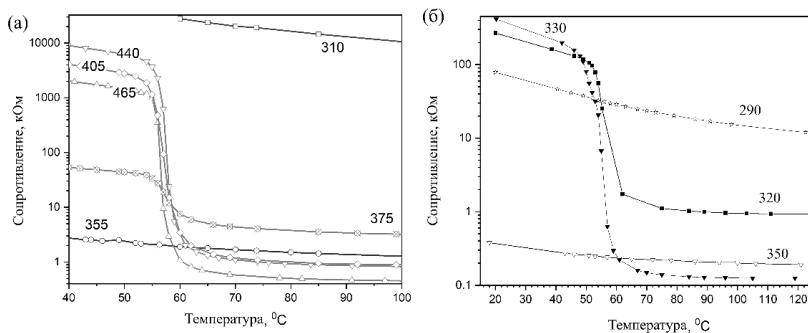


Рис. 1. Зависимость электрического сопротивления от температуры окружающей среды в образцах покрытий оксидов ванадия, полученных при разной температуре отжига: (а) при отжиге в водороде, (б) при отжиге в аргоне. Цифрами указаны температуры отжига

Список литературы

- [1] N. F. Mott, Proceedings of the Physical Society. Section A 62.7 (1949) 416.
- [2] R. Peierls, Princeton: Princeton University Press (1992).
- [3] D. Ruzmetov, S. Ramanathan: S. Ramanathan (eds.). Thin Film Metal-Oxides (2010) Springer, Boston, MA.
- [4] P. Shvets, O. Dikaya, K. Maksimova, A. Goikhman, J. Raman. Spectrosc. (2019) 1–19.
- [5] Z. Shao, X. Cao, H. Luo, et al, NPG Asia Mater 10 (2018) 581–605.
- [6] D. P. Sudas, V. A. Jitov, L. Yu. Zakharov, V. A. Luzanov, P. I. Kuznetsov, Journal of Radio Electronics. (2024). № 11.

Возможность плазменного фазового перехода в плотном разогретом цезии

А. А. Филаткин^{1,2,*}, И. М. Саитов^{1,3}, Г. Э. Норман^{1,2,4}

¹*Объединенный институт высоких температур РАН, Россия*

²*Московский физико-технический институт*

(Национальный исследовательский университет), г. Москва, Россия

⁴*Университет of Л'Акулы*

³*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»*

**E-mail: filatkin.aa@phystech.su*

Современные методы экспериментальной диагностики материалов в экстремальных состояниях позволяют изучать область плотного разогретого вещества (warm dense matter) на фазовой диаграмме. Модельным элементом для генерации плотной неидеальной плазмы является цезий в силу аномальной малости энергии первой ионизации, что даёт возможность достигать высоких электронных концентраций в умеренных температурах.

Построение уравнения состояния неидеальных сред и поиск границ различных фаз — важное направление исследований, которые, в частности проводятся в контексте фазового перехода флюид-флюид. Переходы такого типа, тесно связанные с ионизацией атомов под давлением, возникают в плотной разогретой среде и имеют уникальные особенности, за что называются плазменным фазовым переходом (ПФП) [1]. Впервые ПФП экспериментально обнаружен в дейтерии [2]. Вопрос о возможности подобного перехода в широком классе веществ остается открытым, существующие сведения ограничиваются единичными работами. В том числе, авторы [3] моделью среднего атома показали немонотонность энтропии цезия, причем при прохождении через немонотонный участок средний заряд ионов цезия рос в более чем 2 раза, намекая на плазменный механизм перехода. Подтверждение данного ПФП без привязки к

свойствам конкретных химических элементов не оставит сомнений в плазменной природе перехода.

Работа посвящена первопринципному расчету уравнения состояния и проводимости плотного разогретого цезия, анализу его особенностей. Для этого используется квантовое атомистическое моделирование, основанное на теории функционала электронной плотности. Обменно-корреляционный функционал взят в форме PBE (по фамилиям авторов Perdew, Burke, Ernzerhof). Электрон-ионное взаимодействие описывается методом присоединенных спроектированных волн, валентными приняты 9 внешних электронов атомной оболочки цезия. Расчет выполнен в пакете программ VASP для системы 64 атомов цезия в периодических граничных условиях.

Уравнение состояния цезия получено в диапазоне плотностей от 2 г/см^3 до 18 г/см^3 на изотермах от 500 до 10000 К. По формуле Кубо-Гринвуда определена динамическая электропроводность среды на изотермах. Для наглядности результатов проведена оценка числа делокализованных электронов на один атом, то есть среднего заряда ионов в плазме цезия, двумя методами: через аппроксимацию по модели Друде и с помощью правила сумм для проводимости металлов [4]. Проводимость и заряд усреднялись по нескольким равновесным конфигурациям атомов (от 3 до 5).

Обнаружены широкие участки плотностей с возникающей многозначностью давления. Вдоль равновесной траектории давления системы наблюдается одно короткоживущее метастабильное и одно долгоживущее равновесное состояние. Сравнительный анализ вида парных корреляционных функций (ПКФ) для метастабильного и стабильного состояний, а также сопоставление с видом ПКФ состояний вне участка двузначности позволяет разделить изотерму на две ветви (рис. 1,а). Участок перекрытия ветвей длинный и узкий, разница давлений составляет в среднем не более 1–2 % от их абсолютного значения.

Установленный средний заряд ионов существенно зависит от метода его получения. На малых плотностях значения близки, однако с уплотнением цезия разница заметно увеличивается, поскольку длинновол-

новой «хвост» проводимости становится все более высоким. В то время как заряд из правила сумм одинаков в пределах погрешностей на одной плотности и различных ветвях, а также монотонно растет с увеличением давления, в случае модели Друде величина заряда на ветви повышенного давления может отличаться для одной и той же плотности от заряда на равновесной ветви в 2 и менее раза (см. рис. 1,б). Это связано с тем, что средний заряд ионов чувствителен к статической проводимости согласно формуле Друде; статическая проводимость, в свою очередь, зависит от способа представления дельта-функции в формуле Кубо-Гринвуда, необходимого для избегания некорректного предела нулевой частоты. Правило сумм же заключается в интегрировании динамической проводимости, на величину строго взятого интеграла окрестность одной точки оказывает малое влияние.

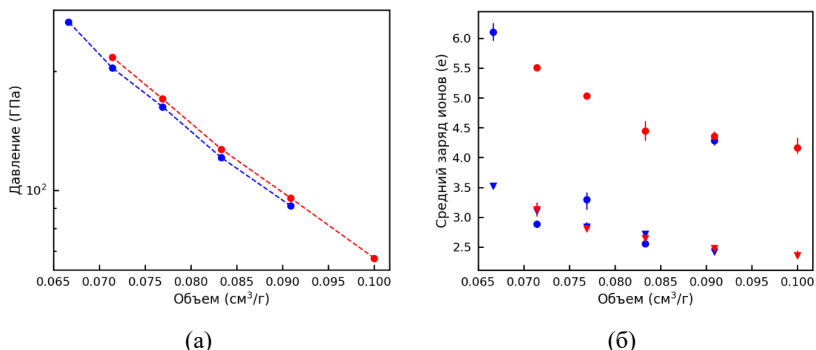


Рис. 1. Область перекрытия ветвей изотермы 2000 К а) давления б) среднего заряда ионов (кружки — по модели Друде, треугольники — по правилу сумм)

Повышение температуры ведет к уменьшению среднего времени жизни наблюдающихся метастабильных состояний и смещению метастабильного участка в сторону более высоких плотностей. При температурах от 5000 К и выше метастабильные состояния не наблюдались, что можно объяснить смещением соответствующего участка на плотности,

выходящие за диапазон исследуемых. Во всяком случае, критическая температура составляет не менее 4000 К.

Таким образом, рассчитанные уравнение состояния и проводимость цезия свидетельствуют о несовершенстве существующего теоретического описания плазменных параметров плотной среды. Описанные особенности изотерм цезия указывают на необходимость обсуждения существования ПФП.

Список литературы

- [1] Норман Г. Э., Старостин А. Н. Несостоятельность классического описания невырожденной плотной плазмы // Теплофизика высоких температур. 1968. Т. 6. № 3. С. 410–415.
- [2] Fortov V. E. et al. Phase Transition in a Strongly Nonideal Deuterium Plasma Generated by Quasi-Isentropical Compression at Megabar Pressures // Physical Review Letters. 2007. Т. 99. № 18. С. 185001.
- [3] Воробьев В. С., Грушин А. С., Новиков В. Г. Исследование фазовых переходов в цезии с помощью модели среднего атома // Препринты ИПМ им. МВ Келдыша. 2016. № 100. С. 1–16.
- [4] Норман Г. Э., Сайтов И. М., Стегайлов В. В. Расчет коэффициента отражения ударно-сжатого ксенона из первых принципов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2015. Т. 147. № 5. С. 1032–1044.

Поляронный хоппинг и переход Вервея в магнетите

Н. А. Фоминых^{*}, В. В. Стегайлов

*Объединенный институт высоких температур РАН, г. Москва, Россия
Московский физико-технический институт (НИИУ), г. Долгопрудный, Россия*

^{}E-mail: fominykh.na@phystech.edu*

Переход Вервея в магнетите Fe_3O_4 послужил исходным прототипом концепции фазового перехода металл-изолятор [1]. Однако, хотя некоторые противоречия ещё сохраняются, современные эксперименталь-

ные работы характеризуют переход Вервея как переход полупроводник-полупроводник [2, 3]. Показательным фактом в этой связи является существование альтернативных поляронной и зонной интерпретаций экспериментальных данных по оптической проводимости магнетита [4, 5].

Первопринципные расчеты электронной структуры магнетита долгое время были ограничены отсутствием точных экспериментальных данных по кристаллической структуре низкотемпературной фазы магнетита. На сегодня известно [6], что ниже температуры Вервея T_V магнетит имеет Сс структуру и обладает тримеронным упорядочением. В работе применен метод расчета энергий поляронного хоппинга в рамках DFT+U, который использовался нами для хромита [7] и феррита никеля [8].

Наряду с Сс структурой были рассмотрены и альтернативные варианты орбитально зарядового упорядочения: $P2_1$, $P4_12_12$, $P2/c$, $Pnma$, $Imma$. Полученные значения ширины запрещённой зоны лежат в диапазоне $E_g = 0.55\text{--}1.12$ эВ, причем для структуры Сс значение $E_g = 1.03$ эВ, что почти на порядок больше ранних интерпретаций экспериментальных данных. Показано наличие тримеронного упорядочения для структур Сс, $P2/c$ и $Pnma$. Для структуры Сс воспроизводится так называемый «плохой» тримерон, образующий зону прямо под уровнем Ферми, что может объяснить экспериментально наблюдаемое селективное легирование [9]. В рамках теории Гольштейна–Мотта и подхода Маркуса были получены энергии поляронного транспорта дырок и электронов в низкотемпературной.

Таким образом, в данной работе представлена [10] гармонизирующая интерпретация вкладов зонного и поляронного транспорта, в рамках которой появляется возможность рассматривать вклады от транспорта малых поляронов и зонной проводимости не как альтернативные механизмы, а как два дополняющих друг друга механизма, проявляющихся в спектрах оптической проводимости при разных энергиях, что хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными данными [4, 5] и позволяет взглянуть под другим углом на природу перехода Вервея.

В докладе будут представлены первые результаты моделирования в рамках квантовой молекулярной динамики для явного учета температурных эффектов. На основе этих результатов обсуждаются особенности хоппинга при $T < T_c$ и $T > T_c$.

Список литературы

- [1] N. F. Mott, Rev. Mod. Phys. 40, 677 (1968).
- [2] D. Schrupp et al., Europhys. Lett. 70, 789 (2005).
- [3] R. Prozorov et al., Mat. Res. Bulletin 167, 112442 (2023).
- [4] S. K. Park, T. Ishikawa, Y. Tokura, Phys. Rev. B 58, 3717 (1998).
- [5] L. V. Gasparov et al., Phys. Rev. B 62, 7939 (2000).
- [6] M. S. Senn et al., Nature 481, 173 (2012).
- [7] Н. А. Фоминых, В.В. Стегайлов, Письма в ЖЭТФ 117, 857–862 (2023).
- [8] N. A. Fominykh et al., Comput. Mater. Sci. 246, 113326 (2025).
- [9] E. Pachoud et al., Nature Comm. 11, 1671 (2020).
- [10] N. A. Fominykh, V. V. Stegailov, Phys. Rev. B 111, 115130 (2025).

РАЗНОЕ

Хиральная метамембрана для терагерцового диапазона на основе кремния

Н. В. Валенко^{1,2}, Р. О. Маликов¹, С. Г. Тиходеев^{1,3}

¹*Физический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова*

²*Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН*

³*Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН*

В последнее десятилетие для управления поляризацией электромагнитного излучения разрабатываются различные метаповерхности. Такие компактные, по сравнению с волновыми пластинами, фотонные структуры позволяют изменять состояние поляризации падающей волны в различных диапазонах (оптическом, инфракрасном, терагерцовом) и могут быть весьма полезны для сенсорики, включая биосенсорику, а также для приложений опто-спинтроники и долин-троники. Используя различную симметрию элементарной ячейки образующего метамембрану фотонного кристалла, можно изготовить структуру, пропускающую одну циркулярную поляризацию и отражающую другую, конвертеры и фильтры циркулярной поляризации. В данном докладе рассматривается кремниевая метамембрана с хиральной элементарной ячейкой для терагерцового диапазона.

Для оптического диапазона такого рода метамембраны исследовались в работах [1, 2]. Структура предлагаемой метамембраны показана схематически на рис. 1.

Метамембрана подобного типа была предложена нами [3] для среднего ИК диапазона 10–12 мкм, на основе лазерно-структурированной плёнки нанокристаллического алмаза. К сожалению, оптические хиральные свойства деградируют с ростом потерь [3], а при изготовле-

нии метамембраны методом лазерной абляции из нанокристаллического алмаза на поверхности образуется тонкий графитизированный поглощающий слой, который не удастся удалить [4]. Можно надеяться, что переход к более технологичному с точки зрения лазерной абляции кремнию, а также к терагерцовому диапазону — с соответствующим масштабированием размеров требуемой метамембраны — позволит улучшить качество изготавливаемых метамембран.

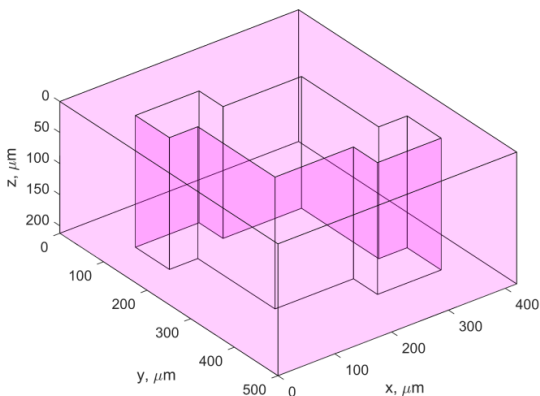


Рис. 1. Схематическое изображение элементарной ячейки хиральной метаповерхности

В докладе будут проанализированы физические причины так называемого максимально-хирального оптического отклика оптимизированной для терагерцового диапазона хиральной кремниевой метамембраны. На рис. 2 представлены рассчитанные методом Фурье-модального разложения и оптической матрицы рассеяния спектры пропускания и отражения в циркулярном базисе. «R» и «T» обозначают коэффициенты отражения и пропускания соответственно, второй нижний индекс показывает входную циркулярную поляризацию, а первый описывает циркулярную поляризацию отклика. Видно, что на длине волны ≈ 600 мкм левая циркулярная поляризация почти полностью отражается в левую,

а правая проходит через мембрану с конверсией также в левую циркулярную поляризацию.

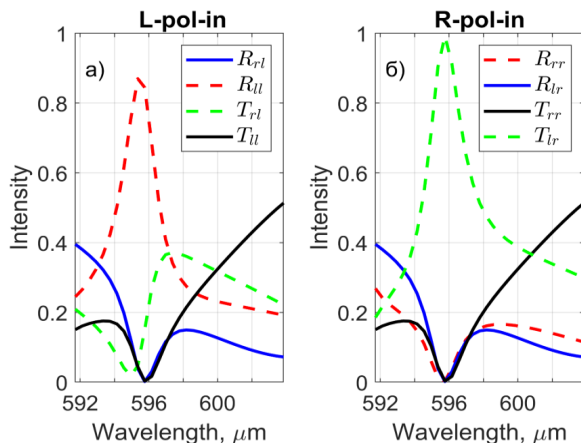


Рис. 2. Расчетные спектры пропускания и отражения для нормального падения в базисе циркулярных поляризаций: а) на структуру падает левополяризованный свет, б) падает право-поляризованный свет

Работа поддержана грантом № 29/24 в форме субсидий на проведение крупных научных проектов по приоритетным направлениям научно-технологического развития, утвержденными постановлением Правительства Российской Федерации от 27 декабря 2019 г. No. 1902.

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] Valenko NV, Dmitrieva OA, Tikhodeev SG. Effect of losses on optical properties of chiral metamembranes // Computer Optics; 48(6): 816-821 (2024)
- [4] M. S. Komlenok et al., in preparation.

Электрокорреляции в системах «вода–водорастворимые соли–полистирол»

С. А. Винокуров¹, Н. В. Классен^{1,*}, И. С. Цебрук¹

Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН

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

Ранее мы сообщали о своеобразных электрофизических процессах в системах «вода–растительный материал» и «вода–поверхностно-активная жидкость» [1, 2]. Своеобразие выражалось в аномальном усилении пьезоэлектрических модулей у пучков растительных микрокапилляров при смачивании их внутренней поверхности водой и формировании механически прочных оболочек вокруг пузырьков с водородом, образующихся при электролизе воды. Наблюдавшееся при этом дальнodelствующее притяжение между пузырьками по диполь-дипольному вандер-ваальсову типу индуцировало предположение о большой электрической поляризации их оболочек. Аналогичное предположение возникало и при анализе обнаруженного усиления пьезомодулей при контакте микрокапиллярных стенок с водой. Это приводило к заключению, что и на границах воды с внутренними стенками капилляров, и на внутренних сторонах оболочек водородных пузырьков, формируются супертонкие пленки из молекул воды, дипольные моменты которых коррелированным образом ориентированы в определенном направлении по сегнетоэлектрическому типу. Но такое предположение выглядело не слишком убедительно на фоне серии опубликованных другими авторами экспериментальных данных о том, что сегнетоэлектричество пленок адсорбированной воды в нанокapиллярах действительно наблюдается, но это происходит при температурах чуть выше абсолютного нуля [3], а в наших экспериментах эти признаки предполагаемого сегнетоэлектричества наблюдались при комнатной температуре.

Возможное объяснение столь сильного расхождения — использование в наших экспериментах в качестве контактирующих с водой веществ органических материалов. И стенки растительных капилляров, и поверхностно-активные органические жидкости содержат в своих при-

граничных слоях большое количество атомов водорода, который способен организовывать с молекулами воды собственные химические связи по водородному типу, в то время как подобного вида возможности у поверхностей неорганических капилляров гораздо слабее. Такое сопоставление делает оправданным продолжение экспериментов по электрокорреляциям на границах воды с твердыми телами варьируемых составов (с разными соотношениями органических и неорганических компонентов) и изменениями действующих на эти композиции электрических полей в широком диапазоне их амплитуд. В данной работе представлены новые экспериментальные результаты, полученные при многовариантных вариациях параметров экспериментов.

Например, комбинированные воздействия воды и внешнего электрического поля на композиции из активированного полистирола и микрочастиц бромида лантана приводят к многообразию результатов, позволяющему простыми приемами получать требуемые свойства композиций. Некоторые из этих результатов показаны на рис. 1. Слева — рентгеновская дифрактограмма смеси из пленки активированного полистирола с наполнителем из микрочастиц бромида лантана, которая 15 минут находилась в открытой атмосфере с влажностью на уровне 30 %. При толщине пленки 300 мкм за это время все рентгеновские рефлексы кристаллического бромида лантана преобразовались в рефлексы кристаллогидрата бромида лантана, где на одну молекулу этой неорганической соли приходится семь молекул воды. При повышении уровня влажности рефлексы кристаллогидрата превращаются в гало насыщенного раствора бромида лантана в воде (средняя дифрактограмма). А после обработки полем в 10^4 В/см рефлексы кристаллогидрата превращаются в рефлексы оксидбромида лантана LaOBr (справа). После такой обработки инфракрасная спектроскопия определяет уменьшение содержания воды. Следует подчеркнуть, что электрические поля на порядок меньших амплитуд также уменьшают содержание воды (в меньшей степени), но оксидбромид лантана не образуется.

При воздействии на пленку из насыщенного раствора бромида лантана в воде, помещенного на подложку из того же активированного полистирола, слабых полей (порядка 100 В/см) наблюдается образование композиционных пленок смешанного состава (органика — неорганика). Эта структура демонстрирует в указанном выше слабом поле быстрые

автоколебания между состоянием с разделенной на микродомены фазой с сильной оптической анизотропией и изотропным состоянием. Периоды колебаний менее секунды. Появление оптической анизотропии объясняется коррелированной ориентацией комбинированных молекулярных состояний из цепочек полистирола и молекул воды. Анизотропная фаза образована ориентированными цепочками полистирола, захватившими молекулы воды. В такой ситуации возникают сильные поля электрической поляризации и механической деформации, которые вызывают быстрое сворачивание цепочек в клубки. При этом внутри структуры опять появляется сильное поле от внешнего источника за счет прекращения экранирования большим дипольным моментом ориентированной структуры. По этой причине цепочки опять распрямляются и т. д.

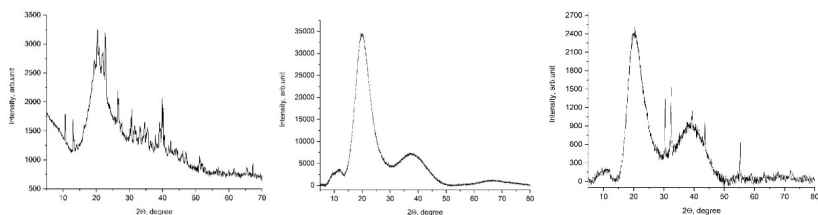


Рис. 1. Рентгеновские дифрактограммы композиции бромида лантана в оплстироле после разных воздействий. Слева — пребывание в низкой влажности. В середине — выдержка в высокой влажности. Справа — после обработки полем 10 килвольт/см

Если же такого типа насыщенный раствор соли в воде подвергнуть воздействию поля подобной амплитуды, происходит осциллирующий рост кристаллов соли из раствора. Но период осцилляций в этом случае значительно больше (порядка 10 секунд). В обоих случаях осцилляции можно объяснить деполяризующим действием дипольных макромоментов, образованных коррелированно ориентированными микромоментами воды и других компонентов. Но в ситуации без полистирола перестройка этих диполей происходит диффузионным путем на расстояния значительно больше межатоного. При сцеплении диаолей воды с цепочками полистирола перестройка диполей носит чисто переориентационный характер и происходит значительно быстрее.

Список литературы

- [1] А. А. Топоркова, С. А. Винокуров, Н. В. Классен, И. С. Цебрук, Электрические корреляции между микропузырьками на поверхности водных растворов / XXI Конференция «Сильно коррелированные электронные системы» ФИАН, г. Москва, 23 мая 2024 г.,
- [2] S. A. Vinokurov, I S Tsebruk, T D Betenina, N V Klassen, (2020), Modulation of structure and optical properties micro-fibrils of plants by means of electrical, deformation and optical treatments. Journal of Physics: Conference Series 1560 012042 (2020)
- [3] B. P. Gorshunov, et.al. Incipient ferroelectricity of water molecules confined in beril nanopores? Nature Communications, 2016, Vol. 7, No. 12842.

Наблюдение разных мод вибрирующего резонатора с образцом кремниевого аэрогеля в нормальном и сверхтекучем ^3He

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

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

Сверхтекучесть ^3He связана с образованием куперовских пар с полными спином и орбитальным моментом, равными 1, что приводит к огромному разнообразию его свойств, а в теории к существованию до 18 разных сверхтекучих фаз. В низком магнитном поле в объемном ^3He в зависимости от давления и температуры реализуются только 2 фазы, имеющие при этих условиях наименьшую энергию: B фаза с изотропной сверхтекучей щелью и A фаза, сверхтекучая щель которой обращается в нуль в двух точках. В высоком магнитном поле к ним добавляется A_1 фаза, которая возникает вблизи температуры сверхтекучего перехода (T_c) и отличается от A фазы наличием только куперовских пар $\uparrow\uparrow$ (A фаза представляет собой конденсат одинакового числа пар $\uparrow\uparrow$ и $\downarrow\downarrow$). 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 $T_{c2} < T_c < T_{c1}$.

Сверхтекучий ^3He является идеальным модельным объектом для исследования нестандартной сверхтекучести/сверхпроводимости: все примеси при сверхнизких температурах, когда наступает сверхтекучесть (~ 1 мК), вымерзают, Ферми поверхность ^3He имеет вид сферы. Однако, реальные системы (например, сверхпроводники) неизбежно имеют примеси, что затрудняет интерпретацию наблюдаемых явлений. Поэтому стало актуально исследовать сверхтекучесть ^3He в присутствии примесей, роль которых может играть высокопористый аэрогель. В первых экспериментах использовался изотропный кремниевый аэрогель пористостью 98 %, с диаметром нитей ≈ 3 нм, расстоянием между нитями ~ 100 нм. При этом наблюдаются 2 сверхтекучие фазы (А-подобная и В-подобная), аналогичные А и В фазам объемного ^3He , а 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].

В данной работе с помощью вибрирующей проволоочки с приклеенным к ней образцом кремниевого аэрогеля, погруженной в жидкий чистый ^3He и помещенной в высокое магнитное поле (вплоть до ≈ 32 кЭ), мы наблюдаем несколько мод механического резонанса: слабая ($f \approx 500$ Гц), более интенсивная ($f \approx 2000$ Гц). Мы измеряем резонансные характеристики этих мод (резонансные частота и ширина на полувысоте) в зависимости от температуры и наблюдаем особенность на обоих модах, похожую на сверхтекучий переход, при низкой температуре. Однако, данная температура оказывается ниже ожидаемой для кремниевого аэрогеля, и требуются дальнейшие эксперименты (и с вибрирующей проволоочкой и по ЯМР) для интерпретации результатов.

Стоит отметить, что мы проводили измерения в чистом ^3He (без добавления ^4He). В этом случае нити аэрогеля покрываются твердым парамагнитным слоем ^3He , который создает диффузный характер рассеяния

квазичастиц ${}^3\text{He}$ и включает магнитный канал рассеяния, который должен приводить к нелинейной зависимости сверхтекучих переходов ${}^3\text{He}$ T_{c1} и T_{c2} от поля [3,4] в изотропном аэрогеле. При покрытии же нитей аэрогеля ~ 3 атомными слоями ${}^4\text{He}$ создается зеркальный характер рассеяния квазичастиц ${}^3\text{He}$, и в этом случае область существования A_1 фазы линейно зависит от поля. В наших экспериментах мы наблюдаем только верхний переход (T_{c1}), а его зависимость от поля пока полностью не объясняется теоретическими предсказаниями.

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).

Электронный транспорт в тонких пленках Sr_2IrO_4 и джозефсоновских переходах на их основе

Ю. В. Кислинский^{1,*}, И. Е. Москаль¹, В. А. Байдикова^{1,2},
К. И. Константиан¹, Н. В. Дубицкий^{1,3}, А. М. Петржик¹,
А. В. Шадрин^{1,4}, В. А. Шмаков¹, Г. А. Овсянников¹

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

²Российский технологический университет МИРЭА, г. Москва, Россия

³ВШЭ, Физический факультет, г. Москва, Россия

⁴МФТИ, г. Долгопрудный, Московская область, Россия

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

В нашей работе приводятся результаты резистивных измерений тонких пленок Sr_2IrO_4 , и установлены модели транспорта носителей тока в них. Показаны электрофизические свойства джозефсоновских гетероструктур $\text{Nb}/\text{Au}/\text{Sr}_2\text{IrO}_4/\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ и обсуждаются механизмы транспорта носителей данных гетероструктурах.

Иридаты стронция являются материалами с сильным спин-орбитальным взаимодействием порядка 0.5 eV, вследствие наличия в них иридия — элемента с большим атомным номером. В контактах иридатов со сверхпроводниками могут образоваться нетривиальные поверхностные состояния [1], в переходах Джозефсона с барьерами из иридатов наблюдался пик проводимости при нулевом смещении [2]. В переходах Джозефсона на основе купратного сверхпроводника $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, верхнего слоя из металлического сверхпроводника Nb с барьерами из иридатов стронция наблюдались джозефсоновские токи при толщинах барьеров t от 5 до 14 nm [2, 3]. В качестве барьеров применялись тонкие пленки как SrIrO_3 [4] — полуметалла с низкими подвижностями и концентрациями носителей заряда, так и диэлектрика Sr_2IrO_4 [2], который является скошенным антиферромагнетиком с намагниченностью $\sim 10^{-2}$ $\mu_B/\text{атом Ir}$. Преобладающие механизмы проводимости, встречающиеся в пленках Sr_2IrO_4 , зависят и от толщины пленок t и от температуры T . В тонких пленках Sr_2IrO_4 наблюдались: i) термическая активация носителей заряда (модель TA) с энергией активации $\Delta E \sim 0.1$ eV, ii) трехмерная прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка (модель VRH) и радиусами локализации носителей заряда $\alpha \sim 0.3$ nm [5]. Зависимости проводимостей от температуры для пленок Sr_2IrO_4 , полученных по трем различным технологиям, показаны на рис. 1.

В модели TA удельная проводимость $\sigma = 1/\rho$ падает с температурой по экспоненте:

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left(-\frac{\Delta E_A}{2kT}\right) \quad (1)$$

где ΔE_A — энергия активации носителей, k — константа Больцмана. На рис. 1,а показано, что температурные зависимости проводимости удовлетворительно описываются TA моделью при $T \sim 100$ K, но отклоняются от нее при комнатных температурах.

В модели VRH удельная проводимость зависит от температуры по экспоненте [6]:

$$\sigma(T) = \sigma_0 \exp\left[-\left(\frac{T_0}{T}\right)^{\frac{1}{4}}\right]; \quad T_0 = \frac{\beta}{kg(\mu)\alpha^3}, \quad (2)$$

где T_0 — экспериментальная константа, $g(\mu)$ — плотность состояний на уровне Ферми, α — радиус локализации, $\beta \sim 10$ — постоянный для данного вещества коэффициент, k — константа Больцмана. Механизм VRH преобладает при температурах $T > T_{VRH}$, если толщина пленки $t > r$ — радиуса прыжка, который уменьшается с ростом T : $r \sim \alpha \cdot (T_0/T)^{1/4}$. Нами получена оценка по порядку величины радиуса локализации носителей заряда: $\alpha \sim t \cdot (T_{VRH}/T_0)^{1/4}$. На рис. 1,б показаны аппроксимации экспериментальных зависимостей по VRH модели, сделанные для интервалов температур $T_{VRH} < T < 300$ К. Аппроксимацией зависимостей на рис. 1 для образца, полученного лазерной абляцией, вычислены величины $\Delta E_A \approx 210$ meV, $\alpha \approx 1 \div 1.5$ nm; для образца, напыленного методом PULSE, получены значения: $\Delta E_A \approx 25$ meV, $\alpha \approx 9 \div 11$ nm.

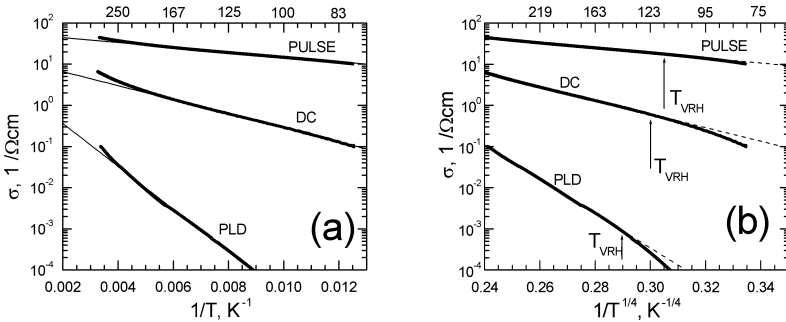


Рис. 2. Зависимости $\sigma(T)$ для пленок Sr_2IrO_4 на подложках NdGaO_3 , полученных лазерной абляцией — PLD, распылением на постоянном токе — DC, импульсами напряжения — PULSE: (a) в зависимости от обратной температуры $1/T$ и (b) от обратной температуры в степени $1/T^{1/4}$, стрелками обозначены температуры T_{VRH}

По технологии PLD были получены гетероструктуры $\text{Nb}/\text{Au}/\text{Sr}_2\text{IrO}_4/\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ с толщиной Sr_2IrO_4 $t = 7$ nm. Для них плотности критического тока $J_C = I_C/A$ были $0.2 \div 0.4$ A/cm², нормальные сопротивления единицы площади составляли R_{NA} $80 \div 130$ $\mu\Omega \cdot \text{cm}^2$, где A — площадь структуры. С уменьшением толщины барьера до $t = 5$ nm величины

J_C возрастали в 20 раз, сопротивления R_{NA} уменьшались в 10 раз. В предположении, что зависимости от толщины имеют вид: $1/J_C \sim R_{NA} \sim \exp(2t/\alpha)$ получен радиус локализации в барьерах структур $\alpha = 1 \div 1.5$ nm. Из соотношения $E_b \sim 1/\alpha^2$ [7] вычислена высота барьера гетероструктур $E_b \approx 15 \div 25$ meV. Радиусы локализации в гетероструктурах близки к радиусам a для пленок Sr_2IrO_4 , полученных лазерным напылением. Высоты барьеров структур значительно меньше энергий активации ΔE_A в PLD пленках. Предполагаемая причина уменьшения высоты барьера в структурах — наличие слоя нормального металла на интерфейсе $\text{Sr}_2\text{IrO}_4/\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ [2]. Возможно и образование омического контакта p^+ -типа в модели контакта двух полупроводников. В модели электрод из $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ представляется вырожденным полупроводником p^+ -типа, а барьер из Sr_2IrO_4 — узкозонным полупроводником p -типа [4].

Работа выполнена по государственному заданию ИРЭ им. В. А. Котельникова РАН. Авторы благодарны Д. В. Мастерову и А. Е. Пестун за полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] Yige Chen, and Hae-Young Kee // *Physical Rev. B*. 2018. V. 97, p. 085155.
- [2] A. M. Petrzlik, K. Y. Constantinian, G. A. Ovsyannikov, et al. // *Physical Rev. B*. 2019. V 100, p. 024501.
- [3] Y. V. Kislinskii, K. Y. Constantinian, I. E. Moskal, et al. // *Russian Microelectronics*. 2023. V. 52, p. S53.
- [4] Yu. V. Kislinskii, K. Y. Constantinian, G. A. Ovsyannikov, et al // *V International Conference FSP'15. Workbook of extended abstracts*, Moscow, изд. ФИАН. 2015, p. 144.
- [5] Chengliang Lu, A. Quindeau, H. Deniz, et al. // *Appl Phys. Lett.* 2014. V. 105. p. 082407.
- [6] Boris I. Shklovskii, Alex L. Efros. *Electronic Properties of Doped Semiconductors*. (Springer – Verlag, Berlin - Heidelberg, 1984.).
- [7] А. И. Девятов, М. Ю. Куприянов // *Письма в ЖЭТФ*. 1994. Т. 59, стр. 187.

Оптическое детектирование квантового эффекта Холла в кремниевых наносандвич-структурах

Н. И. Руль^{1,2}, К. Б. Таранец^{1,2}, Н. Т. Баграев¹, Л. Е. Клячкин¹,
А. М. Маляренко¹, В. В. Романов²

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе, г. Москва, Россия

²СПбПУ Петра Великого, г. С.-Петербург, Россия

В работе представлены результат сравнительного анализа квантового целочисленного и дробного эффекта Холла (рис. 1,а), экспериментально обнаруженного при температуре 77 К, и спектров терагерцевой электролюминесценции исследуемой низкоразмерной структуры (рис. 1,б), полученных методом ИК-Фурье спектроскопии. Исследуемая кремниевая наносандвич-структура, полученная на поверхности монокристаллического кремния (100) n-типа, представляет собой одиночную квантовую яму p-типа, ограниченную цепочками примесных дипольных центров бора с отрицательной корреляционной энергией.

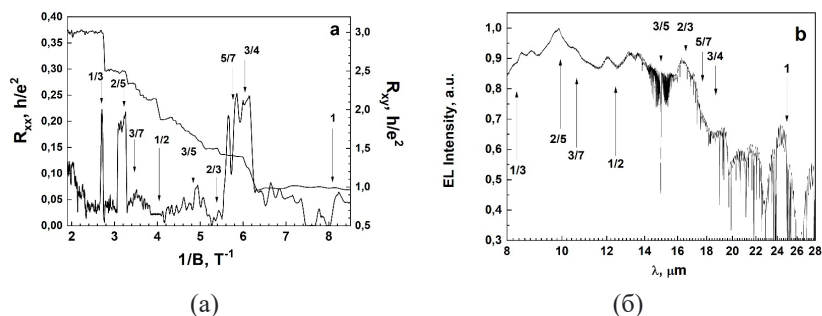


Рис. 1. а) осцилляции Шубникова–де Гааза и квантовая лестница холловского сопротивления, 77 К; б) спектры терагерцевой электролюминесценции, 300 К

Использование свойств дипольных центров с отрицательной корреляционной энергией, ограничивающих области интерференции носи-

телей в транспортных каналах исследуемой системы, способствует подавлению электрон-электронного взаимодействия, позволяя тем самым наблюдать квантовый эффект Холла и другие макроскопические квантовые явления при высоких температурах [1].

Наряду с эффектом де Гааза–ван Альфена, наблюдаемом в осцилляциях намагниченности, и эффектом Шубникова–де Гааза в продольном сопротивлении, обычно изучаемыми совместно с исследованием квантового эффекта Холла для получения полной картины о свойствах и характеристиках транспорта носителей в изучаемом объекте, особый интерес в целях подтверждения отличительных особенностей исследуемых низкоразмерных структур представляет изучение спектров электролюминесценции. В работе впервые продемонстрированы экспериментальные результаты, подтверждающие возможность детектирования и идентификации квантового целочисленного и дробного эффекта Холла при анализе особенностей спектров электролюминесценции кремниевой наносандвич-структуры, полученных методом ИК-фурье спектроскопии. Показано, что особенности поведения поперечного и продольного сопротивления исследуемой структуры находятся в полном согласии со спектрами терагерцевой электролюминесценции согласно условиям квантования Ландау.

Полученные результаты свидетельствует о возникновении индуцированного терагерцевого излучения в условиях квантования Ландау в кремниевых наносандвич-структурах.

Список литературы

- [1] Bagraev N. T. et al. High-temperature quantum kinetic effect in silicon nanosandwiches // Low Temperature Physics. 2017. Vol. 43. № 1. P. 110–119.

Органический проводник κ -(BEDT-TTF)₂Cu(CN)₃: Cu²⁺ примеси в анионном слое и их влияние на электронную структуру

Э. И. Хасанова*, А. В. Кузьмин, С. С. Хасанов

Институт физики твердого тела имени Ю. А. Осипьяна

Российской академии наук (ИФТТ РАН), Россия

**E-mail: hasanova.leo@issp.ac.ru*

Кристаллы катионных солей κ -BEDT-TTF₂Cu₂(CN)₃ (сокращённо κ -CN) относятся к классу органических проводников на основе BEDT-TTF (ET) молекул и интересны своей богатой фазовой диаграммой: наличием перехода Мотта при $T = 25$ К [1], перехода в сверхпроводящее состояние при ~ 3 К и $P \approx 14 \cdot 10^4$ кПа [2]. Существует ряд теоретических работ, предсказывающих наличие в кристаллах κ -CN состояния спиновой жидкости при температурах ниже 32 мК [3] с антиферромагнитным обменным взаимодействиями с $J = 250$ К. Из литературы известно, что нетривиальные электронные свойства соли κ -CN главным образом определяются пространственным расположением молекул ET и их ориентацией относительно анионного слоя [4] (рис. 1). С целью обнаружения подобных корреляций структуры с электронными характеристиками данного соединения, нами были проведены низкотемпературные рентгеноструктурные исследования кристаллов κ -CN и, на основе полученных структурных данных, выполнены квантово-химические расчеты электронного спектра проводящих слоев.

В данной работе кристаллы слоистого органического проводника κ -CN были исследованы методами монокристалльной рентгеновской дифракции, методами комбинационного рассеяния света и фотоэлектронной спектроскопии. Электронная структура проводящих BEDT-TTF₂ слоёв и детали их Ферми поверхности были проанализированы методами квантово-химического моделирования в приближении теории функционала плотности.

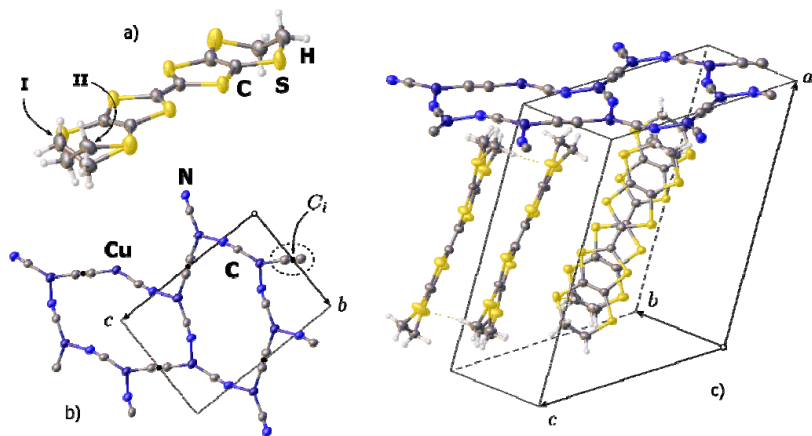


Рис. 1. Структура кристалла соединения κ -CN: (а) молекула ET с беспорядком в одной из концевых этиленовых групп $-\text{C}_2\text{H}_4-$, (б) анионный слой $\text{Cu}_2(\text{CN})_3$, (с) слоистая структура кристалла κ -CN

Анализ результатов экспериментальных исследований методом фотоэлектронной спектроскопии в совокупности с результатами моделирования позволил обнаружить наличие примеси Cu^{2+} в анионном слое и выяснить, каким образом она влияет на электронные свойства кристаллов соли κ -CN. В частности, было показано, что появление следов двухвалентной меди в анионном цианополимере приводит к перераспределению заряда в слоях катионов ET^+ и меняет зонную структуру и геометрию Ферми поверхности в k -пространстве. Так, например, зависимость рассчитанных значений электронной свободной энергии при различных величинах заряда q на молекуле ET, показывает, что равновесному состоянию системы соответствует заряд молекулы $q = 0.488$, который отличается от стехиометрического $q = 0.5$ (согласно условиям синтеза кристаллов). Исходя из общей химической формулы для данного соединения, этот недостаток заряда соответствует наличию 1.2 % замещённых позиций меди, что повреждает экспериментальные данные, полученные методом фотоэлектронной спектроскопии.

Список литературы

- [1] Miyagawa, K.; Kawamoto, A.; Nakazawa, Y.; Kanoda, K. Antiferromagnetic Ordering and Spin Structure in the Organic Conductor, κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Cl. *Phys Rev Lett* 1995, 75 (6), 1174–1177. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.75.1174>.
- [2] Furukawa, T.; Kobashi, K.; Kurosaki, Y.; Miyagawa, K.; Kanoda, K. Quasi-Continuous Transition from a Fermi Liquid to a Spin Liquid in κ -(ET)₂Cu₂(CN)₃. *Nat Commun* 2018, 9 (1). <https://doi.org/10.1038/s41467-017-02679-7>.
- [3] Shimizu, Y.; Miyagawa, K.; Kanoda, K.; Maesato, M.; Saito, G. Spin Liquid State in an Organic Mott Insulator with a Triangular Lattice. *Phys Rev Lett* 2003, 91 (10), 107001. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.91.107001>.
- [4] Toyota, N.; Müller, J.; Lang, M. *Low-Dimensional Molecular Metals*; Springer Series in Solid State Sciences 154; Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007. https://doi.org/10.1007/978-3-540_49576-5.

Микроволновая фотопроводимость в $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te(In)}$

С. Н. Чмырь¹, А. В. Галеева¹, Д. Е. Долженко¹, С. А. Дворецкий²,
Н. Н. Михайлов², 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

Интерес к исследованию твердых растворов $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te(In)}$ связан главным образом с их высокой фоточувствительностью в инфракрасном и терагерцовом диапазонах [1]. В области составов $0.22 < x < 0.28$ глубокий примесный уровень индия стабилизирует уровень Ферми в запрещенной зоне, что приводит к формированию полуизолирующего состояния. В таких системах при низких температурах $T < 25$ К наблюдаются

долговременные релаксационные процессы и задержанная фотопроводимость [2]. Кроме того, были обнаружены локальные электронные состояния вблизи квазиуровня Ферми, обеспечивающие положительную фотопроводимость в условиях возбуждения терагерцовым излучением с частотой 0,6–3,4 ТГц. В настоящей работе изучена фотопроводимость в монокристаллах $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}(\text{In})$, индуцированная микроволновым излучением с частотой ~ 50 ГГц.

Исследованные монокристаллы $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}(\text{In})$ в окрестности состава $x = 0,25$ как n -, так и p -типа были выращены модифицированным методом Бриджмена. Транспортные свойства образцов изучены в диапазоне температур 4,2–300 К в магнитных полях до 0,05 Тл. Исследование фотопроводимости было проведено при температурах 4,2–40 К с использованием двойной модуляционной методики. Фотовозбуждение осуществлялось СВЧ импульсами излучения диода Ганна с частотой ~ 50 ГГц.

Во всех исследованных образцах при $T < 30$ К была обнаружена СВЧ фотопроводимость. Основные особенности наблюдаемого фотоотклика в образцах p - и n -типа аналогичны. На рис. 1,а представлены температурные зависимости сопротивления при фоновой засветке и фотосопротивления для образца состава $x \sim 0,25$ n -типа. При $T < 25$ К фотопроводимость отрицательна. При повышении температуры фотопроводимость становится положительной. Сопоставление температурных зависимостей сопротивления при фоновой засветке и фотосопротивления при СВЧ возбуждении позволяет связать зарегистрированный фотоотклик с болометрическим эффектом.

На рис. 1,б представлена температурная зависимость холловского фотонапряжения ΔU_H для образца состава $x \sim 0,25$ n -типа. Установлено, что смена знака фотопроводимости при повышении температуры коррелирует с инверсией знака ΔU_H . Таким образом, исследование эффекта Холла в условиях фоновой засветки и при воздействии СВЧ излучения показало, что СВЧ фотопроводимость обусловлена главным образом изменением концентрации носителей при их разогреве падающим излучением.

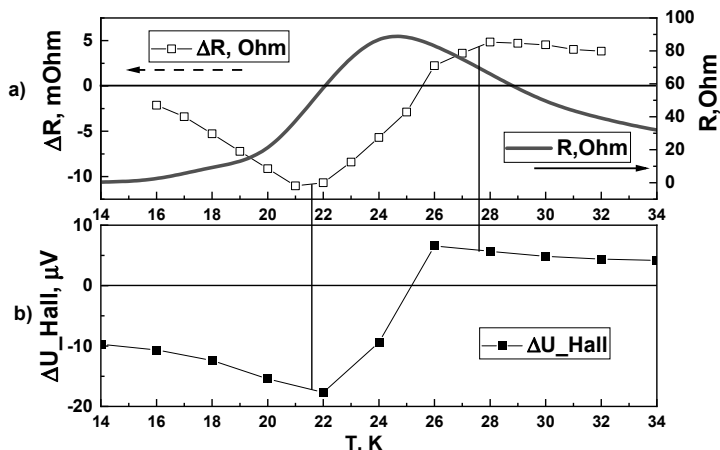


Рис. 1. Температурные зависимости сопротивления R при фоновой засветке, фотосопротивления ΔR (a) и холловского фотосигнала ΔU_H (b) для образца n-типа состава $x \sim 0.25$ (a).

Обнаружение при низких температурах отрицательного СВЧ отклика, не проявляющего признаков задержанной кинетики, может указывать на наличие частотного порога наблюдавшегося ранее эффекта возбуждения состояний вблизи квазиуровня Ферми и положительной тергерцовой фотопроводимости. Вместе с тем, остается открытым вопрос, в какой мере интенсивность фоновой теплового излучения может влиять на наблюдаемый СВЧ отклик. Нельзя исключить, что повышенные значения фоновой концентрации могут обеспечить условия для проявления долговременных неравновесных процессов, обусловленных формированием специфических электронных состояний вблизи квазиуровня Ферми.

С. Н. Чмырь благодарит Фонд развития теоретической физики и математики «БАЗИС» за поддержку.

Список литературы

- [1] Волков Б. А. Рябова Л. И., Хохлов Д. Р. // УФН 172 875–906 (2002).
- [2] Рябова Л. И., Хохлов Д. Р. // УФН 184 1033–1044 (2014).

Корреляции вибронных возбуждений при рентгеновском облучении кластерных композиций из полимерных люминофоров и неорганических сцинтилляторов

И. С. Цебрук*, Н. В. Классен, В. В. Кедров, А. П. Киселев, А. Д. Орлов

Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН,

г. Черноголовка, Россия

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

В ряде наших предыдущих публикаций было показано, что нанокompозиты из неорганических сцинтилляторов и органических люминофоров позволяют значительно улучшить характеристики радиационных детекторов за счет сочетания больших сечений поглощения гамма квантов и радиационной прочности тяжелых неорганических атомов с высокими квантовым выходом и быстродействием светоизлучения органики. Важность уменьшения размеров органических и неорганических фаз до наноскопических размеров определяется необходимостью высокой вероятности перехода электронных возбуждений, созданных в неорганике поглощением гамма квантов ее тяжелыми атомами, в органические для эффективного превращения их энергии в световые вспышки сцинтилляционного излучения. В данной работе продемонстрировано, что уменьшение композиций до молекулярно-кластерного уровня создает новый механизм возбуждения: часть кинетической энергии фотоэлектронов, выбитых рентгеновскими квантами из тяжелых атомов неорганики, передается органическим люминофорам через вибронные возбуждения. Это возможно благодаря перекрытию электронных волновых функций компонентов, что предотвращает диссипацию энергии в тепло и ускоряет излучение света.

Для создания молекулярно-кластерных композиций из активированного полистирола и неорганических сцинтилляторов ($\text{LaBr}_3(\text{Ce})$, $\text{CsI}(\text{Tl})$) использовали ультразвуковое воздействие и нагрев смесей. Поляризационная микроскопия выявила образование оптически анизотропных стержневидных структур. Предположительно, они состоят из цепей полистирола с закрепленными ароматическими кольцами активаторов,

которые захватывают ионы неорганических компонентов. Кулоновское взаимодействие между ионами вызывает выпрямление цепей и их агрегацию в стержневидные агломераты.

Прямолинейная конфигурация молекулярно-кластерных композиций усиливает чувствительность радиационных детекторов за счет корреляции процессов. Быстрые электроны, вылетающие при поглощении рентгеновских квантов, и сцинтилляционные фотоны движутся прямолинейно. Если фотоэлектрон вылетает вдоль полимерной цепи, он взаимодействует с ароматическими кольцами, вызывая импульсное возбуждение их электронно-колебательных систем (длительность $\sim$ единицы-десятки фемтосекунд). Это приводит к эффективному образованию вибронных пакетов, чьи электрические колебания коррелируют с полем электрона, снижая его электростатическую энергию. В результате вероятность вылета фотоэлектрона вдоль цепи выше, чем в перпендикулярном направлении. Возбужденные вибронные пакеты создают вдоль полимера цепочку электронно-возбужденных состояний, способствуя коллективному излучению фотонов (по механизму свёрхлюминесценции или лазерной генерации). Таким образом, в прямолинейных молекулярно-кластерных системах выделяются три фактора усиления сцинтилляционных сигналов: преобразование энергии фотоэлектрона в вибронные пакеты органики, коррелированное возбуждение вибронов при преимущественном вылете электронов вдоль цепей и усиление квантового выхода сцинтилляционных фотонов за счет направленного излучения вдоль полимеров.

В пользу изложенной выше вибронной версии свидетельствует ряд экспериментальных фактов. На рис. 1 показаны два спектра рентгенолюминесценции, снятые при одинаковом рентгеновском облучении структуры в виде сэндвича из двух пленок активированного полистирола и размещенного между ними порошка сцинтилляционного бромид лантана полистирола и молекулярно-кластерной композиции из такого же количества порошка бромид лантана, перемешанного с раствором активированного полистирола в бензоле с помощью ультразвука и потом отвержденного. При этом отчетливо наблюдались описанные выше стержневидные анизотропные включения.

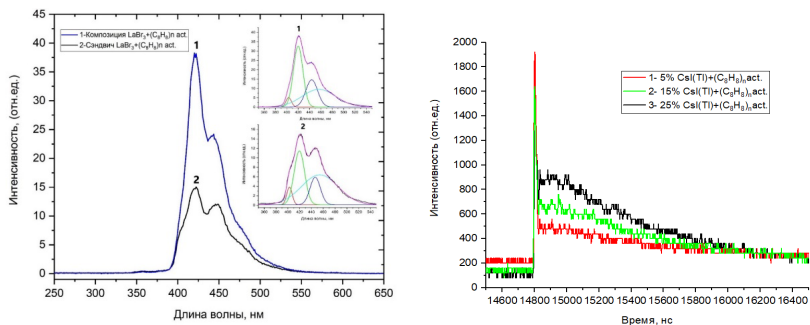


Рис. 1. Слева — сопоставление спектров рентгенолюминесценции молекулярно-кластерной композиции, полученной ультразвуковым перемешиванием порошка бромида лантана с раствором активированного полистирола (кривая 1) и такого же количества бромида лантана и полистирола, приготовленных в виде сэндвича (порошок между двумя пленками, кривая 2). Справа — импульсная рентгенолюминесценция композиции из полистирола с разными концентрациями наполнителя из йодида цезия

Отчетливо видно двукратное превышение интегральной интенсивности рентгенолюминесценции композиции по сравнению с сэндвичем. Это можно объяснить тем, что в сэндвиче (кривая 2) передача энергии от неоргаников к органике идет только путем излучения и перепоглощения фотонов. А в композиции (кривая 1) наряду с переизлучением включается новый механизм вибронного возбуждения люминесценции сразу при вылете фотоэлектрона. На рисунке 1 справа показано импульсная рентгенолюминесценция композиции из полистирола с разными концентрациями наполнителя из йодида цезия. Обращает на себя внимание такая особенность этих зависимостей кинетики сцинтилляций от концентрации йодида цезия. Амплитуды коротковолновых компонент (с длительностями порядка 10 нс) практически не изменяются при изменениях концентраций наполнителя от 5 до 25 %. Но параллельно с этим фактом заметно возрастает интегральная интенсивность медленной компоненты высвечивания йодида цезия (приблизительно в три раза).

Полученные факты о наблюдении насыщения активаторов быстро высвечивания и перепоглощения света органикой указывают на то, что в этих процессах молекулы активатора действуют значительно эф-

фактивнее равнению с молекулами основного полистирола. По массе одна молекула наполнителя соответствует приблизительно трем ароматическим кольцам. То есть эффекты насыщения органических перехватов энергии от неоргаников, наблюдаемые при массовых концентрациях последней порядка 10 %, показывают, что при этом на одну молекулу неорганики приходится порядка 30 ароматических колец органики. Такое соотношение легко понять, в процессах с трансформациями энергии главную роль играют молекулы активаторов, а полистирол выполняет функции матрицы-носителя.

Список литературы

- [1] I. S. Cebruk, A. P. Pokidov, V. V. Kedrov, N. V. Klassen. (2019), Dynamical forming and applications of nanocomposites from organic and inorganic components for new trends in material research and technologies // J. Phys.: Conf. Ser. 1309 012002 (2019).
- [2] Классен Н. В., Провоторов П. В., Цебрук И. С. Корреляции оптических и структурных превращений при многофотонном возбуждении молекулярных сред // Сборник тезисов XIX конференции «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления». ФИАН, г. Москва, 2022, стр. 255–257.

Корреляционная энергия с поправкой на самодействие в функционале от плотности электронов и самосогласованного потенциала

А. Я. Шульман

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

В теории функционала плотности (ТФП) Хоенберга-Кона не используется понятие самосогласованного поля и отсутствует уравнение Пуассона для самосогласованного с распределением электронов потенциала. Под самосогласованием в теории Кона-Шэма имеется в виду на-

хождение такого эффективного потенциала V_{eff} , что порождённые им одночастичные волновые функции воспроизводят V_{eff} . Вклад дальнегодействующего кулоновского взаимодействия электронов в функционал энергии выделяется формулой Хартри ($e = 1$)

$$U_H = 2\pi \iint d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' G_0(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}'),$$

где $n(\mathbf{r})$ — средняя плотность электронов, $G_0 = 1/4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ — функция Грина оператора Лапласа в свободном пространстве. Формула для V_H была предложена Хартри из физических соображений, содержит вклад самодействия электронов и плохо определена в бесконечной системе или при наличии металлического затвора из-за изменения краевых условий. В [1] показано, что энергию Хартри для выделенного объема бесконечной системы можно преобразовать в энергию заряда с плотностью $q(\mathbf{r}) = N_+(\mathbf{r}) - n(\mathbf{r})$, помещённого в средний потенциал $\phi(\mathbf{r})$

$$U_H^* = \int_{\Omega} d\mathbf{r} \left[q(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) + \frac{1}{8\pi} \phi(\mathbf{r}) \Delta \phi(\mathbf{r}) \right].$$

Граничные условия на потенциал порождаются взаимодействием с остальной частью бесконечной системы, задаются на поверхности, ограничивающей выделенный объем Ω , и остаются постоянными в процессе варьирования. В [2] было показано, что в исходном микроскопическом гамильтониане неограниченной многоэлектронной системы можно точно выделить взаимодействие со средним потенциалом в виде U_H^* . При этом вычитание самодействия из полной энергии описывается формулой

$$2\pi \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \left\{ \lim_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} [\tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G_0(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)] n(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right\},$$

где функция $\tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ есть функция Грина краевой задачи для линеаризованного уравнения Пуассона с учётом поляризуемости электронной системы. Уравнения Кона–Шэма и Пуассона получаются как вариационные производные функционала энергии по одночастичным орбиталам и потенциалу.

В качестве частных случаев применения полученных формул обосновано введение экранированного межэлектронного взаимодействия

в расчёт обменной энергии однородного электронного газа, что, как известно, улучшает согласие рассчитанных значений ширины запрещённой зоны с экспериментальными. Получена поправка к корреляционной энергии электронного газа за счёт устранения самодействия в формуле для энергетического функционала. На примере расчёта энергии электростатического взаимодействия в ионном кристалле проиллюстрирован способ исключения самодействия из энергии классической системы зарядов, находящихся в самосогласованном потенциале. Оценено влияние устранения самодействия на поверхностную энергию простых металлов, которая при расчёте в рамках обычной ТФП оказывается отрицательной в области, где уже существуют реальные металлы [3].

Список литературы

- [1] Shul'man A. Ya . Genuine converging solution of self-consistent field equations for extended many-electron systems // J. Phys.: Conf. Ser. **35** 163 (2006).
- [2] Шульман А. Я. Обменно-корреляционная энергия многоэлектронной системы в приближении самосогласованного поля // XII Российская конференция по физике полупроводников: тезисы докладов, 2015, с. 258.
- [3] Посвянский Д. В., Шульман А. Я. Самосогласованное решение уравнений Кона–Шэма для неограниченных систем с неоднородным электронным газом // ЖЭТФ, **136**, 169 (2009).

Научное издание

**XXII Конференция
«Сильно коррелированные электронные
системы и квантовые критические явления»**

ФИАН, г. Москва
22 мая 2025 г.

Сборник тезисов

Подписано в печать 05.05.2025. Формат 60×84¹/₁₆.
Усл. печ. л. 11,51. Уч.-изд. л. 11,97. Гарнитура «Таймс».
Бумага для цифровой печати. Печать цифровая. Заказ № 25-24.

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».
