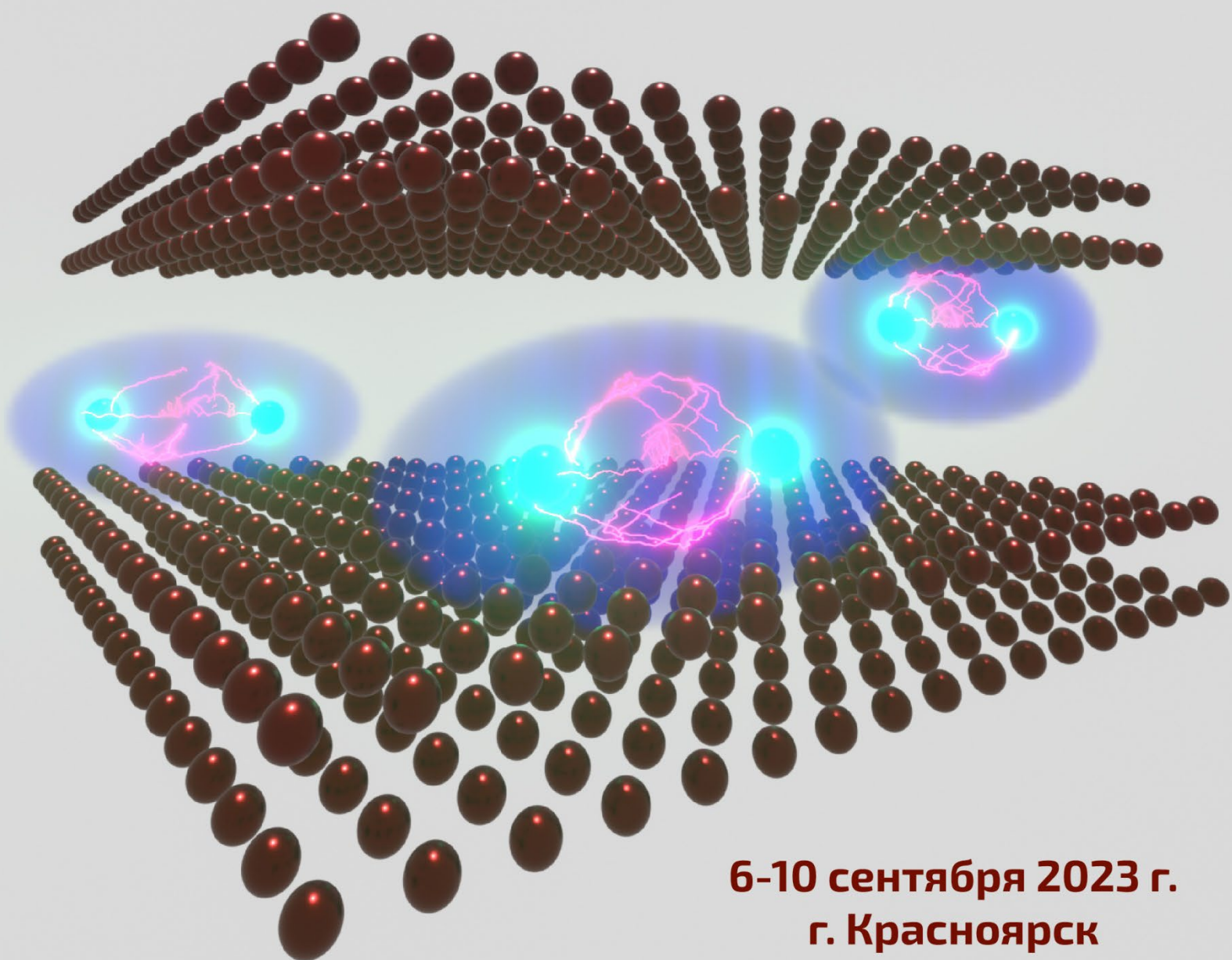


**ХIV СИБИРСКИЙ СЕМИНАР  
ПО ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ  
И ФИЗИКЕ НАНОСТРУКТУР**

**ОКНО-2023**

# **СБОРНИК ТЕЗИСОВ**



**6-10 сентября 2023 г.  
г. Красноярск**

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

Сибирский федеральный университет, г. Красноярск

Федеральный исследовательский центр

«Красноярский научный центр

Сибирского отделения Российской академии наук»

Институт неорганической химии СО РАН, г. Новосибирск

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

**XIV Сибирский семинар  
по высокотемпературной сверхпроводимости  
и физике наноструктур  
ОКНО-2023**

**СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ**

6-10 сентября 2023 года

г. Красноярск

Красноярск, ИФ СО РАН, 2023 г.

Сборник тезисов докладов XIV Сибирского семинара по высокотемпературной сверхпроводимости и физике наноструктур ОКНО-2023 / ИФ СО РАН, г. Красноярск, 2023 г., 97 с.

Сборник содержит тезисы докладов XIV Сибирского семинара по высокотемпературной сверхпроводимости и физике наноструктур ОКНО-2023, проходившего на базе Института физики им. Л.В. Киренского СО РАН (ФИЦ КНЦ СО РАН) и Сибирского федерального университета в г. Красноярске с 6 по 10 сентября 2023 г.. Материалы семинара содержат в краткой форме результаты исследований различных научных школ из Красноярска, Москвы, Новосибирска, Омска, Екатеринбурга, Томска и Санкт-Петербурга. Тематика семинара объединяет фундаментальные и прикладные проблемы, связанные со сверхпроводящими материалами (включая наноструктуры), природой сверхпроводимости, физикой наноструктур, магнитных плёнок и спинтроники. Тезисы докладов представлены в авторской редакции.

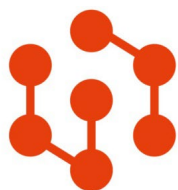
## ОРГАНИЗАТОРЫ



**Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского  
отделения Российской академии наук - обособленное  
подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, г. Красноярск**



**Федеральный исследовательский центр  
«Красноярский научный центр  
Сибирского отделения Российской академии наук»**



**С И Б И Р С К И Й  
Ф Е Д Е Р А Л Ь Н Ы Й  
У Н И В Е Р С И Т Е Т**

**S I B E R I A N  
F E D E R A L  
U N I V E R S I T Y**

**Сибирский федеральный  
университет,  
г. Красноярск**



**Омский  
государственный  
университет  
им. Ф.М. Достоевского**

**Омский государственный университет  
им. Ф.М. Достоевского**



**Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО  
РАН, г. Новосибирск**

## ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

- Овчинников Сергей Геннадьевич (д.ф.-м.н., профессор, ИФ СО РАН, СФУ, г. Красноярск)
- Балаев Дмитрий Александрович (д.ф.-м.н., ИФ СО РАН, г. Красноярск)
- Коршунов Максим Михайлович (член-корреспондент РАН, ИФ СО РАН, г. Красноярск)
- Шнейдер Елена Игоревна (к.ф.-м.н., доцент, ИФ СО РАН, г. Красноярск)
- Николаев Сергей Викторович (к.ф.-м.н., доцент, СФУ, г. Красноярск)
- Макаров Илья Анатольевич (к.ф.-м.н., ИФ СО РАН, г. Красноярск)
- Кузнецов Виталий Анатольевич (к.т.н., доцент, ИНХ СО РАН, НГТУ, г. Новосибирск)
- Прудников Павел Владимирович (д.ф.-м.н., профессор, ОмГУ, г. Омск)

## ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

- Овчинников Сергей Геннадьевич (д.ф.-м.н., профессор, ИФ СО РАН, СФУ, г. Красноярск)
- Дерягина Ирина Леонидовна (к.т.н., ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург)
- Коршунов Максим Михайлович (член-корреспондент РАН, ИФ СО РАН, г. Красноярск)
- Николаев Сергей Викторович (к.ф.-м.н., доцент, СФУ, г. Красноярск)
- Макаров Илья Анатольевич (к.ф.-м.н., ИФ СО РАН, г. Красноярск)
- Кузнецов Виталий Анатольевич (к.т.н., доцент, ИНХ СО РАН, НГТУ, г. Новосибирск)
- Прудников Павел Владимирович (д.ф.-м.н., профессор, ОмГУ, г. Омск)

## ФИНАНСОВАЯ ПОДДЕРЖКА



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



С И Б И Р С К И Й  
Ф Е Д Е Р А Л Ь Н Ы Й  
У Н И В Е Р С И Т Е Т

S I B E R I A N  
F E D E R A L  
U N I V E R S I T Y



ФАНПАРК  
БОБРОВЫЙ ЛОГ

ВСЕСЕЗОННЫЙ ПАРК СПОРТА И ОТДЫХА

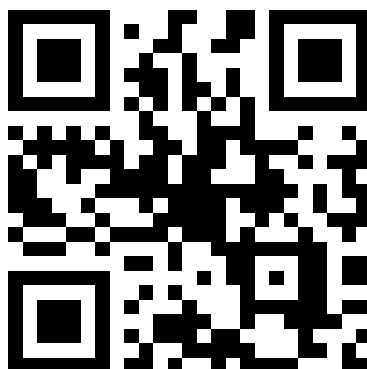
## **Страница семинара:**

[http://kirensky.ru/ru/info/konferencii/konferencii-2023/okno\\_2023](http://kirensky.ru/ru/info/konferencii/konferencii-2023/okno_2023)



## **Телеграм-канал семинара**

<https://t.me/okno2023>



## **e-mail:**

[org-okno2023@mail.ru](mailto:org-okno2023@mail.ru)



## СОДЕРЖАНИЕ

*ВТСП купраты – от рождения до возраста зрелости*

Коршунов М.М.....16

*Высокие значения плотности критического тока и сильный пиннинг в длинномерных высокотемпературных лентах 2-го поколения*

Дегтяренко П.Н.....17

*Развитие концепции эффективного поля в межгранульной среде гранулярного высокотемпературного сверхпроводника. Различное воздействие внутригранульных токов Мейсснера и вихрей Абрикосова на магнитотранспортные свойства Y-Ba-Cu-O*Балаев Д.А., Семенов С.В., Гохфельд Д.М......19*Захват магнитного потока в пористых сверхпроводниках*

Гохфельд Д.М.....20

*Анализ угловых зависимостей критического тока технических сверхпроводников*Гурьев В.В., Федоров М.А., Шавкин С.В., Круглов В.С......21*Прикладная сверхпроводимость: этапы развития, современные достижения и перспективы*Дерягина И.Л., Попова Е.Н......22



*Исследование релаксации захваченного магнитного потока в цилиндрических субмикронных ВТСП*

Михайлов А.А., Максимова А.Н., Мороз А.Н., Кашурников В.А. 24

*Процессы перемангничивания в слоистом ВТСП в присутствии градиента температуры*

Мартьянов М.М., Максимова А.Н., Мороз А.Н., Кашурников В.А.  
..... 25

*Намагниченность и захват потока в кольце из ВТСП ленты*

Чикуров Д.С., Волков М.П., Рудоминский А.Е. .... 27

*Структурный ближний порядок и электронные свойства углеродных нанотрубок*

Пономарев А.Н., Егорушкин В.Е., Бобенко Н.Г. .... 29

*Рост, микроструктура и сверхпроводящие свойства монокристаллов  $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$  и  $\text{SrCsFe}_4\text{As}_4$*

Дегтяренко А.Ю., Власенко В.А., Гаврилкин С.Ю.,  
Цветков А.Ю., Перваков К.С., Кузьмичев С.В., Кузьмичева Т.Е.  
..... 30

*Влияние термической обработки на структуру и критические свойства проводов на основе пниктида семейства 122, полученных методом «порошок в трубе»*

Савельев И.И., Цаплева А.С., Терица М.Д., Лукьянов П.В.,  
Абдюханов И.М., Алексеев М.В., Михалев А.В., Потапенко М.М.  
..... 31

Трехщелевая сверхпроводимость  $\text{LiFeAs}$  по данным спектроскопии планарных контактов на микротрещине

Кузьмичев С.А., Кузьмичева Т.Е., Морозов И.В., Болталин А.И., Шилов А.И. ....32

Туннельная спектроскопия пниктидов  $\text{Na(Fe,Co)As}$  на основе щелочного металла в сверхпроводящем и нормальном состоянии

Кузьмичева Т.Е., Кузьмичев С.А., Морозов И.В., Шилов А.И., Рахманов Е.О. ....34

Исследование поведения сверхпроводящего параметра порядка вблизи перехода  $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$  в ферропниктидах

Шестаков В.А., Коршунов М.М. ....36

Поверхность Ферми в нематической фазе сверхпроводников на основе железа

Казанина С.Д., Коршунов М.М. ....37

Влияние спин-орбитального взаимодействия на поверхность Ферми в трёхорбитальной модели пниктидов железа

Иванов Д.А., Коршунов М.М. ....39

Магнитная восприимчивость в многозонной модели сверхпроводящих соединений железа

Ларионов Е.А., Коршунов М.М. ....41

Вихревая фазовая диаграмма супергидрида иттрия  $\text{YH}_6$  при мегабарном давлении

Садаков А.В., Власенко В.А., Троян И.А., Соболевский О.А., Семенов Д.В., Ди Чжоу, Пудалов В.М. ....43

Зонная структура новейшего практически при нормальных условиях сверхпроводника  $\text{LiH}_{3-x}\text{N}_x$

Павлов Н.С., Шейн И.Р., Перваков К.С., Пудалов В.М., Некрасов И.А. ....45

Электронная структура и минимальные модели плоских и гофрированных  $\text{SiO}$  монослоев

Слободчиков А.А., Некрасов И.А., Бегунович Л.В., Макаров И.А., Коршунов М.М., Овчинников С.Г. ....47

Эффект гигантской диэлектрической проницаемости в поликристаллическом оксиде меди  $\text{CuO}$

Федоров Л.Ю., Ушаков А.В., Карпов И.В. ....49

Определение критических свойств диборида магния с легирующими добавками с помощью пакета **QUANTUM ESPRESSO**

Дихтиевская К.К., Коновалов П.В., Цаплева А.С., Карцев А.И., Абдюханов И.М. ....50

Топологическая сверхпроводимость: от теоретических предсказаний к экспериментальной реализации

Злотников А.О. ....52

Структура майорановских возбуждений в зонах флуктуационных состояний цепочки Китаева

Шустин М.С. ....53

Фермионная четность в фазах с множеством майорановских мод в сверхпроводящей нанопроволоке

Гамов А., Злотников А.О. ....54

*Insight into the electronic structure of the centrosymmetric skyrmion magnet  $GdRu_2Si_2$*

*(Электронная структура спирального антиферромагнетика  $GdRu_2Si_2$ )*

Еремеев С.В., Глазкова Д., Пёльхен Г., Крайкер А., Али К., Тарасов А.В., Шульц С., Климт К., Чулков Е.В., Столяров В.С., Эрнст А., Креллнер К., Усачев Д.Ю., Вялых Д.В.....56

*Аналитические профили двумерных скирмионов сложной морфологии*

Шустин М.С., Енькова Е.О.....58

*Эффекты старения в спин-вентильных структурах*

Шляхтич М.А., Прудников П.В., Егорина А.С.....59

*Первопринципные расчеты магнитных свойств одноосного гелимагнетика*

Евсин Д.В., Прудников П.В., Мамонова М.В., Борзилов В.О.....61

*Исследование магнитной анизотропии плёнок кобальта с медной прослойкой в зависимости от толщины слоев*

Сухачев Р.А., Мамонова М.В.....62

*Исследование скейлингового поведения спиновых систем методами машинного обучения*

Чубарова А.А., Прудников П.В. ....64

*Предсказание критического поведения низкоразмерных неупорядоченных систем сверточной нейросетью*

Хорошев Е.И., Прудников П.В. ....66

<u>Проявление медленной динамики в мультислойных наноструктурах с различными толщинами магнитных пленок</u>	
Друзьев Д.А., Прудников В.В., <u>Хитринцева В.В.</u> .....	68
<u>Первопринципные расчеты обменного интеграла для пленки железа</u>	
<u>Макеев М.Ю.</u> , Мамонова М.В. ....	70
<u>Моделирование методом Монте-Карло магнитных свойств усложненных спиновых вентилях</u>	
<u>Егорина А.С.</u> , Прудников П.В. ....	72
<u>Численное моделирование динамического фазового перехода в тонких Гейзенберговских пленках во внешнем осциллирующем поле</u>	
<u>Ейхлер А.В.</u> , Прудников П.В. ....	74
<u>Спектр спиновых волн и намагниченность в ферримагнетике на треугольной решётке с одноионной анизотропией</u>	
Вальков В.В., <u>Мартынов А.С.</u> , Дзедзисашвили Д.М. ....	76
<u>Одно- и двухчастичные корреляционные функции в кластерной теории возмущений купратов</u>	
<u>Кузьмин В.И.</u> , Николаев С.В., Коршунов М.М., Овчинников С.Г. ....	77
<u>Устройство защиты от мощного радиоимпульса с двумя рабочими полосами</u>	
Александровский А.А., Афонин А.О., <u>Говорун И.В.</u> , Лексиков А.А., Угрюмов А.В. ....	78

Степень локализации и плотность состояний носителей заряда в ансамбле двухузельных коррелированных систем с переходом Андерсона

Стрельцов Я.П., Шнейдер Е.И. .....80

Степень локализации и плотность состояний носителей заряда в ансамбле двухузельных коррелированных систем с переходом Андерсона

Зотова М.В., Шнейдер Е.И. .....82

Взаимосвязь морфологии и механизмов транспорта носителей заряда в полимерных композитах

Кузнецов В.А......84

Электронная и магнитная структура системы графен/Fe(110)

Бакулин А.В., Кулькова С.Е., Хокер С......85

Синтез вертикально ориентированных массивов УНТ на алюминии

Кондранова А.М., Городецкий Д.В., Окотруб А.В......87

Механизмы электропроводности в теплостойких полимерных композитах с углеродными нанотрубками

Федоров А.А., Кузнецов В.А., Холхоев Б.Ч., Бурдуковский В.Ф...88

Влияние химической функционализации поверхности углеродных наноматериалов на их оптические и термические свойства

Гурова О.А., Седельникова О.В., Шляхова Е.В., Окотруб А.В.....89

*Влияние морфологии на механизмы электропроводности в полимерных композитах сегрегированной сетчатой структуры с восстановленным оксидом графена*

Ермаков В.А., Кузнецов В.А., Шиянова К.А. , Гудков М.В. ....90

*Исследование магнитных свойств интеркалированных соединений фторированных графитов*

Гребёнкина М.А., Чехова Г.Н., Пинаков Д.В., Лавров А.Н.,  
Булусева Л.Г., Окотруб А.В.....91

*Взаимосвязь между тензорезистивными характеристиками и механизмами электропроводности в биосовместимых полимерных композитах*

Гапич Д.И., Кузнецов В.А., Буинов А.С., Холхоев Б.Ч.,  
Бурдуковский В.Ф. ....93

*Туннелирование электронов через андерсоновский квантовый дот с произвольно сильным взаимодействием*

Ключанцев А.Б., Дзедзисашвили Д.М.. ....94

Авторский указатель.....95



# ТЕЗИСЫ

## ВТСП КУПРАТЫ – ОТ РОЖДЕНИЯ ДО ВОЗРАСТА ЗРЕЛОСТИ

**М.М. Коршунов<sup>1\*</sup>**<sup>1</sup>Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036, Красноярск, Россия\*e-mail: [mkor@iph.krasn.ru](mailto:mkor@iph.krasn.ru)

В 2011 году исполнилось 100 лет с момента открытия явления сверхпроводимости. Потребовалось полвека после 1911 года, чтобы понять причины возникновения данного сугубо квантового явления. Сверхпроводящее состояние является одним из фундаментальных основных состояний твёрдого тела точно так же, как и магнитное. Долгое время считалось, что сверхпроводник должен быть хорошим металлом при высоких температурах. Тем удивительнее было сообщение в 1986 году об открытии сверхпроводимости в купратах [1], которые в некоторой области допирования были диэлектриками и имели слоистую структуру. Соединения этого класса быстро стали бить рекорды критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние  $T_c$ . И они же стали первыми, преодолевшими температуру сжижения азота. Это было соединение  $YBa_2Cu_3O_7$  с  $T_c=90$  К. Рекордсменом стало синтезированное в 1993 году соединение  $HgBa_2Ca_2Cu_3O_{8+x}$  с  $T_c=135$  К. Благодаря высоким значениям критической температуры, купраты стали называть высокотемпературными сверхпроводниками, ВТСП.

Долгое время купраты были единственными ВТСП. Синтезировать сверхпроводники другого состава с подобными  $T_c$  не удавалось. Стало даже высказываться мнение, что купраты могут быть уникальны, одни в своём роде. Однако, достигнуть зрелого возраста, единолично «сидя на троне ВТСП», купратам не удалось. В 2008 году были синтезированы соединения железа и мышьяка или фосфора, так называемые ферропниктиды [2]. Они, подобно купратам, поражали исследователей рядом необычных свойств. Объёмные образцы ферропниктидов обладали максимальной  $T_c$  порядка 56 К, что позволило купратам сохранить лидерство по этому параметру. Но ненадолго. Синтез гидрида серы при давлении в 155 ГПа позволил создать кристалл, обладающий сверхпроводимостью с  $T_c=203$  К [3], вплотную приблизившись к званию комнатно-температурных сверхпроводников (КТСП).

Так что к своему возрасту зрелости, 37 лет, купраты подходят не в лучшей форме. У них не самая высокая  $T_c$ , они не единственные представители класса необычных сверхпроводников, из-за их слоистой структуры с ними не так удобно работать при развитии технологических применений. С теоретической точки зрения, единой принятой концепции объяснения явления высокотемпературной сверхпроводимости в купратах на сегодняшний день нет. Но это и интересно. Самая загадочная область фазовой диаграммы купратов – псевдощелевое состояние, в котором достигается максимальная  $T_c$ . При этом, чем больше различных классов ВТСП открыто, тем больше возможностей увидеть новое, возможно, пропущенное ранее в, казалось бы, давно изученном классе купратов. Например, обнаружение явления нематичности в ферропниктидах [4] привело к тому, что это явление впоследствии было обнаружено и в купратах [5,6]. Притом, именно в загадочном псевдощелевом состоянии. Поэтому списывать «со счетов» купраты пока рано. Они вполне могут преподнести немало сюрпризов. Особенно, если изучать их комплексно, совместно с другими необычными сверхпроводниками.

[1] J.G. Bednorz, K.A. Muller, Z. Phys. B **64**, 189 (1986)[2] Y. Kamihara et al., J. Am. Chem. Soc. **130**, 3296 (2008)[3] A.P. Drozdov, M.I. Erements, I.A. Troyan, V. Ksenofontov, S.I. Shylin, Nature **525**, 73 (2015)[4] J.-H. Chu et al., Science **329**, 824 (2010)[5] J. Wu, A.T. Bollinger, X. He, I. Božović, Nature **547**, 432 (2017)[6] N.K. Gupta et al., PNAS **118**, e2106881118 (2021)

## ВЫСОКИЕ ЗНАЧЕНИЯ ПЛОТНОСТИ КРИТИЧЕСКОГО ТОКА И СИЛЬНЫЙ ПИННИНГ В ДЛИННОМЕРНЫХ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ЛЕНТАХ 2-ГО ПОКОЛЕНИЯ

**П.Н. Дегтяренко<sup>1,2\*</sup>**

<sup>1</sup>ООО «С-Инновации», 117246, Москва, Россия

<sup>2</sup>ОИВТ РАН, 125412, Москва, Россия

\*e-mail: p.degtyarenko@s-innovations.ru

В последние годы спрос со стороны частных компаний, разрабатывающих сверхпроводящие магнитные системы для установок термоядерного синтеза, привел к необходимости увеличения производства высокотемпературных сверхпроводящих (ВТСП) лент 2-го поколения более чем в десять раз [1]. Компания «С-инновации» стала лидером в производстве ВТСП лент второго поколения, предлагая высокопроизводительный и надежный продукт на основе YBCO (см. Рис. 1).

Пиннинг вихревой структуры при низких температурах в сильном магнитном поле в ВТСП лентах обусловлен присутствием в матрице YBCO случайно распределенных наночастиц  $Y_2O_3$ . Эпитаксиальные наночастицы  $Y_2O_3$  являются полукогерентными по отношению к матрице YBCO и порождают множество точечных дефектов, таких как дислокации несоответствия, нанодеформация и, возможно, локальная кислородная нестехиометрия, которые, как полагают, являются эффективными центрами пиннинга для вихрей Абрикосова.

Использование  $Y_2O_3$  для улучшения пиннинга отличается от существующих подходов в создании лент, в котором традиционно используют способ создания искусственных центров пиннинга (ИЦП) в REBCO на основе BaZrO<sub>3</sub> (BZO) [2]. В дополнение к общей сложности подхода, ИЦП также являются сложными наноструктурами, так как имеют тенденцию к самоорганизации в нанокolonны, предпочтительно ориентированные вдоль направления c-оси YBCO, что приводит и к изменению анизотропии. В результате, лента с ИЦП представляет собой серьезную проблему в производстве, требующем чрезвычайно строгого контроля процесса и сужения диапазона оптимальных параметров обработки, поскольку даже незначительные отклонения состава и/или условий роста могут привести к резким изменениям наночастиц в ВТСП пленке.

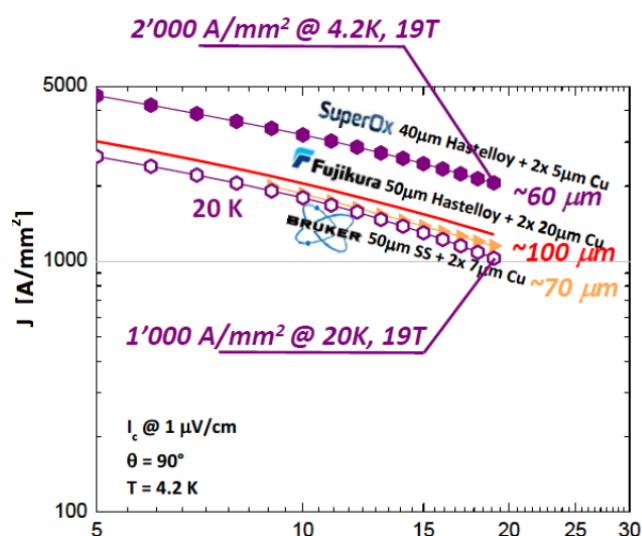


Рис 1. Полевая зависимость критической плотности тока при температурах 20 и 4,2K промышленных ВТСП лент 2-го поколения разных производителей [3].

Отсутствие дополнительных усложнений в слое ВТСП в виде дополнительных химических соединений и организации центров пиннинга на наноструктурном уровне позволило организовать надежное крупносерийное производство ВТСП-лент на основе YBCO со случайно распределёнными наночастицами  $Y_2O_3$ , что обеспечило лидерство компании «С-инновации» [4]. В докладе представлены примеры реальных производственных характеристик лент, с очень высокими характеристиками инженерной плотности тока – более  $750 \text{ A/mm}^2$  при 20 К в магнитном поле 20 Тл по сравнению с другими производителями. После успешного завершения недавнего расширения производства, нынешняя мощность компании составляет более 700 км ВТСП лент 2-го поколения шириной 12 мм в год.

- [1] Y Zhai *et al*, IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng., **1241**, 012023 (2022)
- [2] V. Chepikov *et al*, Supercond. Sci Technol., **30**, 124001 (2017)
- [3] C. Senatore *et al*. In abstract book: EUCAS-2019, September 1-5.
- [4] A. Molodyk *et al*, Sci. Rep, **11**, 2084 (2021)

**РАЗВИТИЕ КОНЦЕПЦИИ ЭФФЕКТИВНОГО ПОЛЯ В МЕЖГРАНУЛЬНОЙ СРЕДЕ  
ГРАНУЛЯРНОГО ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СВЕРХПРОВОДНИКА.  
РАЗЛИЧНОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ ВНУТРИГРАНУЛЬНЫХ ТОКОВ МЕЙССНЕРА И  
ВИХРЕЙ АБРИКОСОВА НА МАГНИТОТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА Y-Ba-Cu-O**

**Д.А. Балаев<sup>1\*</sup>, С.В. Семенов<sup>1</sup>, Д.М. Гохфельд<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия*

\*e-mail: [dabalaev@iph.krasn.ru](mailto:dabalaev@iph.krasn.ru)

Гранулярные высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП) демонстрируют гистерезисное поведение магнитосопротивления  $R(H)$  и критического тока  $I_c(H)$ . Описание этих гистерезисных эффектов основывается на концепции эффективного поля в межгранульной среде. Эффективное поле является суперпозицией внешнего магнитного поля  $H$ , и поля, наведённого магнитными моментами сверхпроводящих гранул, в межгранульные промежутки (межгранульные границы) [1]. Намагниченность сверхпроводящих гранул определяется двумя вкладами – мейсснеровскими (экранирующими) токами и захваченным магнитным потоком (вихрями Абрикосова). С целью развития концепции эффективного поля в межгранульной среде в данной работе проведено сопоставление магнитотранспортных свойств ( $R$  и  $I_c$ ) для двух случаев: (АВ) намагниченность сверхпроводящих гранул определяется только захваченным магнитным потоком (в нулевом внешнем поле) и (МС) ВТСП гранулы находятся в мейсснеровском состоянии (внешнее поле меньше первого критического поля гранул) [2]. В результате ряда экспериментальных исследований проиллюстрированы основные черты гистерезисного поведения зависимостей  $R(H)$  и  $M(H)$  и определены внешние условия реализации состояний (АВ) и (МС). Обнаружено, что воздействие абрикосовских вихрей и внутригранульных мейсснеровских токов на эффективное поле в межгранульной среде заметно различается (при одинаковых значениях намагниченности для случаев (АВ) и (МС)) [2]. Это является нетривиальным фактом, требующим детального рассмотрения влияния анизотропии сверхпроводящих свойств гранул на конфигурацию мейсснеровских токов в гранулах, а также на ориентацию вихрей как внутри гранул, так и вблизи поверхности гранул. Предложено объяснение полученного результата, в котором воздействие мейсснеровских токов на межгранульную среду заметно сильнее, чем воздействие вихрей Абрикосова.

[1] S.V. Semenov, A.D. Balaev, D.A. Balaev, J. Appl. Phys. **125** 033903 (2019)

[2] D.A. Balaev, S.V. Semenov, M.A. Pochekutov, J. Appl. Phys. **122** 123902 (2017).

## ЗАХВАТ МАГНИТНОГО ПОТОКА В ПОРИСТЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ

Д.М. Гохфельд<sup>1\*</sup><sup>1</sup>Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия\*e-mail: [gokhfeld@iph.krasn.ru](mailto:gokhfeld@iph.krasn.ru)

Пористые сверхпроводники являются особым классом материалов, в которых возможно наблюдать свойства, характерные как для объемных трехмерных, так и для квазидвухмерных систем [1]. Поры – это дефекты с большой удельной поверхностью. Дефекты выступают в роли центров пиннинга вихрей Абрикосова, так что плотность критического тока сверхпроводника зависит от концентрации дефектов, их формы и размеров. Основные теоретические исследования концентрировались ранее на исследовании пиннинга на дефектах с размерами, сравнимыми с длиной когерентности сверхпроводника [2,3]. Считалось, что крупные дефекты в сверхпроводнике ухудшают сверхпроводящие характеристики материала из-за искажения траекторий протекания токов [4]. В то же время, для доступа хладагента и улучшения окислораживания образцов желательно создание отверстий с диаметром до одного миллиметра.

Несмотря на большой размер, поры могут удерживать магнитный поток благодаря поверхностному барьеру. Поле входа вихрей в сверхпроводник, характеризующее барьер,

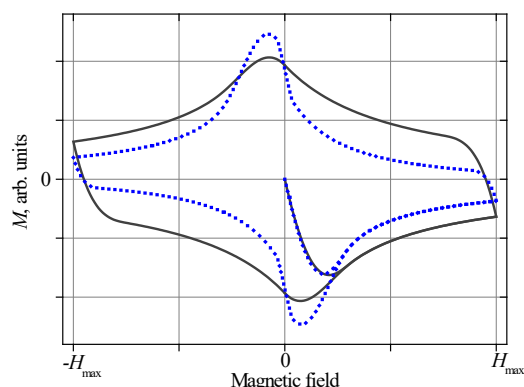


Рис 1. Петля гистерезиса намагниченности сверхпроводника без пор (сплошная линия) и пористого сверхпроводника (точечная линия).

сравнимо по величине с термодинамическим критическим полем [7]. При увеличении пористости растет удельная поверхность материала, что приводит к увеличению вклада от поверхностной равновесной намагниченности и к усилению асимметрии петли гистерезиса намагниченности (см. Рис. 1).

В недавних работах [5,6] показано существование оптимальной суммарной площади отверстий для максимизации захваченного магнитного потока. В настоящей работе данный подход, использующий модель критического состояния, был применен для пористой структуры в сверхпроводниках.

В ранее исследованных пенах YBCO [8,9] значение  $\phi$  было около 0.75.

Анализ влияния пористости на захват магнитного потока показал, что максимальный магнитный поток удерживается при низких значениях пористости  $\phi \approx 0.036$ , что значительно меньше пористости исследованных образцов.

- [1] D.M. Gokhfeld, M. R. Koblishka, and A. Koblishka-Veneva, Phys. Met. Metallogr. **121**, 936 (2020)
- [2] S. Eley, A. Glatz, and R. Willa, J. Appl. Phys. **130**, 050901 (2021)
- [3] R. Willa, A. E. Koshelev, I. A. Sadovskyy, et al, Supercond. Sci. Technol. **31**, 014001 (2018)
- [4] E. Bartolomé, X. Granados, T. Puig, et al, IEEE Trans. Appl. Supercond. **15**, 2775 (2005)
- [5] A.N. Maksimova, V.A. Kashurnikov, A.N. Moroz, et al, J. Supercond. Nov. Magn. **35**, 283 (2022)
- [6] D. M. Gokhfeld, A. N. Maksimova, V. A. Kashurnikov, A. N. Moroz, Physica C **600**, 1354106 (2022)
- [7] J. R. Clem, *Low Temperature Physics-LT 13* (Springer 1974), pp. 102–106
- [8] M. R. Koblishka, S. P. K. Naik, A. Koblishka-Veneva, et al, Materials. **16**, 853 (2019)
- [9] M. R. Koblishka, S. Pavan Kumar Naik, A. Koblishka-Veneva, et al, Supercond. Sci. Technol. **33**, 044008 (2020)

## АНАЛИЗ УГЛОВЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ КРИТИЧЕСКОГО ТОКА ТЕХНИЧЕСКИХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ

**В.В. Гурьев<sup>\*</sup>, М.А. Федоров, С.В. Шавкин, В.С. Круглов**

*НИИЦ «Курчатовский институт», 123182, Москва, Россия*

<sup>\*</sup>e-mail: [GuryevVV@mail.ru](mailto:GuryevVV@mail.ru)

Для современной технической сверхпроводимости, особенно для ВТСП лент второго поколения, важной задачей является анализ зависимостей критического тока от ориентации внешнего магнитного поля. Появление такой анизотропии связано с особенностями системы дефектов сверхпроводника, называемых центрами пиннинга, а также с направлением движения квантов магнитного потока (вихрей). Исследование анизотропии преследует двоякую цель. Во-первых, на этапе развития сверхпроводниковой технологии, выявление корреляций между угловыми зависимостями критического тока и дефектной структурой является ключевым для разработки методов управления анизотропией. Во-вторых, при практическом использовании сверхпроводников в электротехнических устройствах, очевидно, необходим учет фактической анизотропии токонесущей способности уже на стадии проектирования. Однако, не смотря на всю значимость, на данный момент нет удовлетворительной методики анализа угловых зависимостей критического тока  $I_c(\theta)$ .

В данной работе проанализированы угловые зависимости  $I_c(\theta)$  экспериментальных ВТСП лент  $ReBa_2Cu_3O_x$  (ReBCO), где Re - редкоземельный элемент или смесь редкоземельных элементов. Критический ток  $I_c$  определялся из транспортных испытаний в т.н. конфигурации максимальной силы Лоренца: направления тока и поля всегда перпендикулярны с изменением угла  $\theta$  между полем и нормалью к ленте. Испытания проведены в среде жидкого азота (77К) и диапазоне внешних полей 0 – 1,5 Тл. Угловые зависимости построены с шагом в 5 градусов и разворотом на 360 градусов.

Показано, что угловые зависимости  $I_c(\theta)$  существенно отличаются при использовании различных сочетаний редкоземельных элементов в составе ReBCO. Так на некоторых образцах был обнаружен дополнительный пик при ориентации поля по нормали к ленте. Некоторые пики демонстрируют выраженную асимметрию. Изменение направления движения вихрей, вызванное инверсией направления тока или магнитного поля, приводит к изменению величины критического тока.

Для анализа экспериментальных угловых зависимостей  $I_c(\theta)$  привлекались, как модели известные из литературы [1 – 2], так и недавно предложенный нами метод [3]. Проведено сравнение точности описания экспериментальных данных с учетом количества подгоночных параметров. Обсуждаются физические основания и отличия использованных при построении моделей предположений.

[1] X. Xu, J. Fang, X. Cao, K. Li, W. Yao, Z. Qi Solid State Commun. 92, 501–504 (1994).

[2] S.C. Wimbush, N.J. Long New J. Phys. 14 083017 (2012).

[3] V.V. Guryev, S.V. Shavkin and V.S. Kruglov J. of Phys.: Conf. Ser. 2103 012096 (2021)



## ПРИКЛАДНАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ: ЭТАПЫ РАЗВИТИЯ, СОВРЕМЕННЫЕ ДОСТИЖЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ

**И.Л. Дерягина\*, Е.Н. Попова**

*Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН, 620108, Екатеринбург, Россия*

\*e-mail: [deryagina@mail.ru](mailto:deryagina@mail.ru)

Со времени открытия явления сверхпроводимости прошло более ста лет, а с момента создания первых сверхпроводящих проводов – более 60 лет. Тем не менее, количество прикладных задач, которые необходимо решать с помощью сверхпроводников в современном мире не только не сокращается, а растет. Сверхпроводники с более высокими характеристиками требуются для создания медицинских томографов повышенного разрешения, магнитных систем ТОКАМАК, предназначенных для термоядерного синтеза, ускорителей частиц, необходимых для решения фундаментальных задач физики высоких энергий [1].

В рамках доклада авторы представят базовые этапы истории развития прикладной сверхпроводимости, сконцентрировавшись на типах и основных свойствах материалов, применяемых для этих целей. Современное материаловедение выделяет два больших семейства сверхпроводящих материалов, условно разделяя их по температурной области, в которой материал проявляет свои сверхпроводящие свойства и, соответственно, типу хладагента, при котором материал может эксплуатироваться: низкотемпературные сверхпроводники (НТСП), с критической температурой перехода в сверхпроводящее состояние  $T_c$  ниже 30 К и высокотемпературные (ВТСП) с  $T_c$  выше 30 К. Для НТСП хладагентом служит жидкий гелий, для ВТСП – в основном, жидкий азот, но – для некоторых ВТСП с  $T_c$  35-40 К – жидкий водород.

В настоящее время, несмотря на огромное количество исследований по синтезу ВТСП и промышленному получению изделий на их основе (лент и проводов), «рабочей лошадкой» прикладной сверхпроводимости все еще остаются НТСП материалы, в основном – NbTi и Nb<sub>3</sub>Sn. NbTi используется в современных томографах и ЯМР приборах, в катушках полоидального поля магнитов проекта ИТЭР, в магнитных диполях ускорителей Большого адронного коллайдера (БАК) - в его исходном варианте, до текущей модернизации с целью увеличения светимости. Для ускорителей FAIR (Facility for Antiproton and Ion Research), не имеющих аналогов по целому комплексу требований, были разработаны NbTi провода нового класса, конструкция которых обеспечивала сочетание высокой токнесущей способности и минимально возможных энергетических потерь, способные обеспечить стабильную работу провода в циклическом магнитном поле, меняющемся со скоростью от 4 Тл/с до 1-1,5 Тл/с при амплитуде поля 2 Тл и 6 Тл, соответственно [2]. Сплав NbTi оптимизированного состава имеет  $T_c$  около 9 К и верхнее критическое поле около 11,5 Тл. Для научных проектов, требующих более высоких магнитных полей разрабатываются и производятся провода на основе сверхпроводящего интерметаллида Nb<sub>3</sub>Sn. Этот тип сверхпроводников используется, например, в центральном солениоде и катушке тороидального поля ИТЭР, в высокополевых магнитах с полем выше 12 Тл. В рамках текущего проекта по модернизации БАК (с целью увеличения светимости) в ЦЕРНе запланировано заменить большую часть NbTi проводов проводами на основе Nb<sub>3</sub>Sn. Критическая плотность тока  $J_c$  в проводниках на основе Nb<sub>3</sub>Sn зависит от морфологии и размера зерен в сверхпроводящей фазе, которые, в свою очередь, зависят от конструкции стренда и условий отжига [4], [5]. Поэтому для повышения токовых и полевых характеристик провода, всякий раз необходимо совершенствование его конструкции и оптимизация режимов отжига. Так, для создания – в рамках модернизации БАК - MQXF квадруполь с высоким градиентом поля (140 Т/м), а также диполей на 11 Т потребовалась разработка нового усовершенствованного типа проводников на основе Nb<sub>3</sub>Sn,

обеспечивающих высокую  $J_c$  – до 3000 А/мм<sup>2</sup> (при 4.2 К) в поле 12 Т и рабочий ток не менее 360 А в поле 15 Т [3]. Высокие эксплуатационные требования к проводникам на основе Nb<sub>3</sub>Sn для проекта FCC (Future Circular Collider) также потребовали значительной модернизации их конструкции [6], [7].

Что касается термоядерной энергетики, то следующим за ИТЭР шагом должно стать создание и запуск (2050 год) экспериментальной установки DEMO, способной продемонстрировать возможность получения положительной мощности от термоядерной реакции. Для магнитной системы DEMO планируется использовать, в том числе, и кабели на основе ВТСП. Заметим, что применение любого из НТСП материалов для электроэнергетики экономически не оправдано из-за чрезвычайно высокой стоимости системы охлаждения на основе жидкого гелия. Открытие ВТСП не только стимулировало «бум» научного интереса к этим материалам, но и показало перспективы вполне реального использования ВТСП линий для энергетики. В последние годы в ряде стран, включая Россию, начался коммерческий выпуск ВТСП второго поколения – длинномерных лент, на которые вместе с буферными и защитными слоями наносится слой пленки ВТСП. При этом стоимость самого ВТСП материала невелика, но технология настолько сложна, что стоимость готового ВТСП провода пока остается на высоком уровне. Однако вполне обоснованно прогнозируется, что с увеличением масштабов производства ВТСП лент их цена снизится до стоимости медных проводников [8].

Все крупные проекты, основанные на применении сверхпроводников и решающие чрезвычайно сложные научные задачи современной физики, мегазатратны как по аккумулируемым для решения задач знаниям и инженерным решениям, так и по финансовым расходам, необходимым для их воплощения. Естественно, что такие проекты реализуются международными усилиями. Европейское сообщество по прикладной сверхпроводимости ESAS (European Society for Applied Superconductivity) регулярно проводит конференции EUCAS (European Conference on Applied Superconductivity), на которых руководителями ведущих международных проектов в области сверхпроводимости и учеными из разных стран озвучиваются основные результаты, достигнутые к моменту проведения конференции, анализируются необходимые изменения в маршрутных картах международных проектов, представляются современные конструкции сверхпроводниковых кабелей и устройств, организуются экскурсии на предприятия крупных научных центров, занимающихся созданием и испытанием установок для сверхпроводниковой индустрии. 14-я конференция EUCAS проходила в 2021 году в Москве, 15-ая пройдет в сентябре текущего года в Болонье (Италия). Авторы доклада не раз участвовали в работе конференций EUCAS, в том числе и в конференции 2021 года. В рамках доклада мы представим также обзор основных наиболее актуальных направлений прикладной сверхпроводимости, обсуждавшихся на EUCAS-2021.

Исследование авторов по влиянию морфологии и размера зерен в слоях фазы Nb<sub>3</sub>Sn на токовые характеристики сверхпроводящих проводников, результаты которого будут представлены в отдельном разделе доклада «Материаловедение низкотемпературных сверхпроводников», выполнены в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Давление», номер госрегистрации 122021000032-5).

- [1] Martin N. Wilson, IEEE Trans. Appl. Supercond., **26**, No. 4, 0501309, (2016)
- [2] Губкин И.Н., Зубко В.В., Карасёв Ю.В. и др., Кабели и провода, **384**, № 4, 3-13 (2020)
- [3] Giorgio Ambrosio, IEEE Trans. Appl. Supercond., **25**, 4002107 (2015)
- [4] I. Deryagina, E. Popova, E. Patrakov, E. Valova-Zaharevskaya, J. Appl. Phys. **121**, 233901 (2017)
- [5] I.L. Deryagina\*, E.N. Popova, E.I. Patrakov, E.G. Valova-Zaharevskaya, J. MMM **440**, 119–122 (2017)
- [6] D. S. Novosilova, M.V. Polikarpova, I.M. Abdyukhanov, I.L. Deryagina, E.N. Popova, E.I. Patrakov, A.S. Tsapleva, M.V. Alekseev, Phys. Met. Metallogr., **122**, No 4, 33-39 (2021)
- [7] I. Deryagina, E. Popova, and E. Patrakov, IEEE Transact. Appl. Supercond, **32**, No 4, 6000505 (2022)
- [8] Высоцкий В.С., Электричество, № 11, 4-16 (2014)

# ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЛАКСАЦИИ ЗАХВАЧЕННОГО МАГНИТНОГО ПОТОКА В ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ СУБМИКРОННЫХ ВТСП

**А.А. Михайлов\*, А.Н. Максимова, А.Н. Мороз, В.А. Кашурников**

Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, 115409, Москва, Россия

\*e-mail: [ar.mixailovv@yandex.ru](mailto:ar.mixailovv@yandex.ru)

Методом Монте-Карло в рамках модели слоистого высокотемпературного сверхпроводника [1]  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_1\text{Cu}_2\text{O}_{8+x}$  в геометрии цилиндра в параллельном поле выполнены расчёты кривых релаксации захваченного магнитного потока для диапазона докритических температур и диаметра диска в несколько микрон. Температура постоянна по всей площади образца. Плотность дефектов сохранялась  $10^{11} \text{ см}^{-3}$  с гауссовым распределением по глубине 0.01-0.05 эВ. Шаг МК оценивается как  $10^{-8}$ - $10^{-9}$  с.

Релаксационные характеристики важны при построении магнитов, таких как в работе [2]. Результаты исследования стопок сверхпроводящих лент в поле от его угла наклона представлены в [3]. [4] о применимости подобных устройств в синхротронных исследованиях. Подобранные нами размеры могут быть использованы при изготовлении СП датчиков.

Запись захваченного магнитного потока начиналось после мгновенного отключения перпендикулярного СП слою внешнего магнитного поля в 3000 Гс. Исследовались два участка релаксационной кривой, соответствующие различным режимам выхода Абрикосовских вихрей. Из релаксационных кривых получены зависимости скорости выхода магнитного потока от температуры и размеров образца.

Выявлен различный характер зависимостей для двух режимов релаксации, Рис.1.

Продемонстрирован ступенчатый характер остаточной намагниченности при больших температурах и малых образцах спустя длительное время релаксации, Рис.2, что противоречит модели коллективного крипа [5].

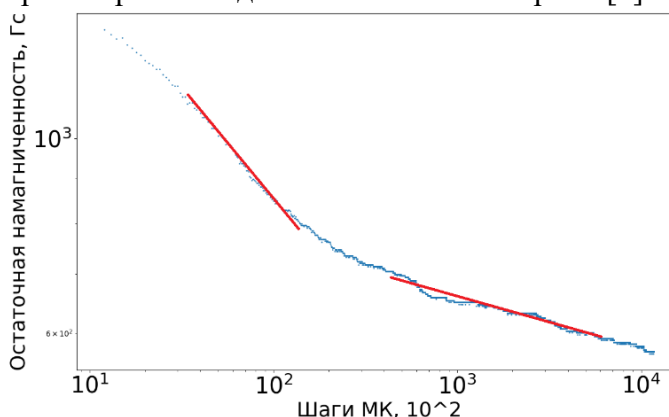


Рис. 1 Логарифм релаксации захваченного магнитного потока. Диаметр 3 мкм, температура 10 К

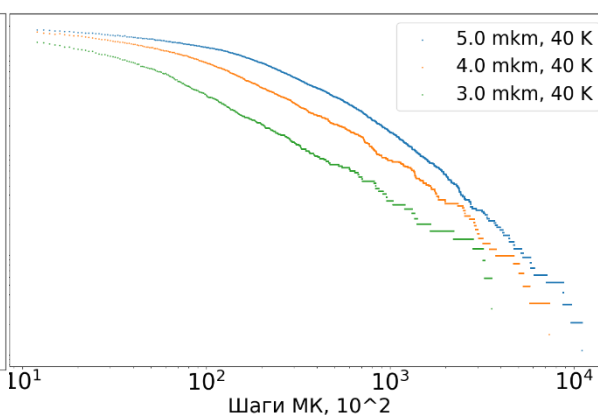


Рис. 2 Логарифм релаксации захваченного магнитного потока. Диаметр 3, 4, 5 мкм, температура 40 К

Исследование выполнено при поддержке программы НИЯУ МИФИ «Приоритет-2030».

- [1] I.A. Rudnev, D.S. Odintsov, V.A. Kashurnikov, // Phys. Lett. A 2008 372, P. 3934-3936.
- [2] A Baskys // Supercond. Sci. Technol. 2018. 31 065011
- [3] L. Tomkow, A. Smara1, V. Climente-Alarcon, B. A. Glowacki1. Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. 2019. URL: <https://doi.org/10.1007/s10948-019-05375-3>
- [4] V. Climente-Alarcon and A. Smara and L. Tomków and B.A, Glowacki and T. Reis // IEEE Transactions on Applied Superconductivity 2020. V. 30, № 5
- [5] Yeshurun Y., Malozemo A. P., Shaulov A. Magnetic relaxation in high-temperature superconductors // Rev. Mod. Phys. 1996. Jul. Vol. 68. P. 911-949. URL: <https://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.68.911>

## ПРОЦЕССЫ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ В СЛОИСТОМ ВТСП В ПРИСУТСТВИИ ГРАДИЕНТА ТЕМПЕРАТУРЫ

**М.М. Мартьянов<sup>1\*</sup>, А.Н. Максимова<sup>1</sup>, А.Н. Мороз<sup>1</sup>, В.А. Кашурников<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", 115409, Москва, Россия

\*e-mail: [x0l0dec@yandex.ru](mailto:x0l0dec@yandex.ru)

В данной работе, в рамках модели слоистого высокотемпературного сверхпроводника методом Монте-Карло [1,2] были исследованы процессы перемагничивания в высокотемпературном сверхпроводнике при постоянной температуре вдоль образца и при линейном градиенте температуры. Было произведено сравнение вихревых конфигураций, возникающих при разных температурных условиях. Кроме того, была исследована зависимость поля необратимости сверхпроводника для разных размеров и градиентов температуры. Также было произведено исследование повышения намагниченности при больших полях в малых системах методом расчёта удельной энергии в таких системах и сравнение его с удельной энергией для больших систем.

Поле необратимости является важной для практики величиной, поскольку определяет магнитное поле, при котором ширина петли и, как следствие, критический ток, обращается в 0 В. Релаксация вихревой системы также имеет большое значение для практического применения, поскольку помогает установить связь указанных расчётов с временем. Исследования повышения намагниченности помогают понять, почему в малых системах намагниченность не выходит на постоянную величину, а начинает линейно увеличиваться с ростом внешнего магнитного поля (данный эффект наблюдается экспериментально [3] и при численном моделировании). Численные методы в применении к данной задаче приобретают важное значение, поскольку позволяют задавать в расчёте градиент температуры, изменять характер и концентрацию дефектов в широких диапазонах и анализировать влияние различных факторов.

Модель слоистого ВТСП развита на основе модели Лоренса-Дониака [4] и описывает вихревую нить как стопку двумерных слоевых вихрей – панкейков. Для большинства задач допустимо пренебречь межплоскостным взаимодействием и рассматривать один ВТСП-слой. Алгоритм расчета включает подпроцессы движения, рождения и уничтожения на границе вихревых нитей, а также аннигиляцию вихрей противоположного знака. В настоящей работе в модель также было введено неоднородное распределение температуры по образцу.

Для расчёта были выбраны параметры, соответствующие параметрам слоистого ВТСП  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ :  $\delta = 2,7\text{\AA}$  – толщина сверхпроводящего слоя,  $\lambda(T = 0) = 1800\text{\AA}$  – глубина проникновения внешнего магнитного поля в сверхпроводник,  $T_c = 84\text{K}$  – критическая температура,  $\xi = 20\text{\AA}$  – длина когерентности. Максимальная амплитуда внешнего поля при перемагничивании составила 1200 Гс. Дефекты вводились в расчет в виде одинаковых потенциальных ям размером  $\sim \xi$ .

В ходе работы были рассчитаны кривые намагниченности при различной ширине образца (от 1.8 мкм до 5 мкм) и при постоянной и линейно возрастающей температурных зависимостях. Кроме того, были рассчитаны удельные энергии для систем с различными размерами (от 1.8 мкм до 8 мкм) при различных температурах. Произведено сравнение полученных результатов. Была посчитана релаксация систем в разных градиентах температур.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что поведение системы, имеющей линейный градиент температуры, гораздо больше приближено к поведению системы нижней температурной границе, чем при высокой. Например, релаксация намагниченности системы с температурой, переменной от 1 К до 60 К, в бездефектном случае гораздо лучше совпадает с релаксацией при 1 К, чем при 60 К (Рис. 2)

Исследование выполнено при поддержке программы НИЯУ МИФИ «Приоритет-2030».

- [1] В.А. Кашурников, А.В. Красавин, Вычислительные методы в квантовой физике: Учебное пособие, Троицк: Типография издательства «Торвант», 412, (2005)
- [2] В.В. Шмидт, Введение в физику сверхпроводников. Изд. 2-е, испр. И доп., М.:МЦНМО, 402, (2000)
- [3] Sánchez-Zacate, F.E., Conde-Gallardo, A. The Particle Size Effect on the Irreversible Magnetization and Critical Current Density in Low Fields for Polycrystalline SmFeAsO<sub>0.91</sub>F<sub>0.09</sub> Superconductors. *J Supercond Nov Magn* **34**, 3141–3149 (2021)
- [4] W.E. Lawrence, S. Doniach, Proceedings of LT12, 361 Tokyo: Keigaku, 1971, (1971)



## БЕСКОНТАКТНЫЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ КРИТИЧЕСКОГО ТОКА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ ПО ЗАХВАЧЕННОМУ В КОЛЬЦЕ ИЗ ВТСП ПОТОКУ

**Д.С. Чикуров<sup>1\*</sup>, М.П. Волков<sup>1</sup>, А.Е. Рудоминский<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> *Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021, Санкт-Петербург, Россия*

<sup>\*</sup> e-mail: d.chikurov@yandex.ru

Запуск коммерческого производства современных надежных кабелей второго поколения на основе высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) открыл новые перспективы в области сверхпроводимости. ВТСП кабели стали использоваться в токоограничительных устройствах, которые уже внедрены в эксплуатацию [1], а также в магнитоплазменном динамическом двигателе [2]. В настоящее время разрабатываются прототипы сверхпроводящих двигателей для авиации [3]. Важным аспектом в создании устройств на основе ВТСП является точное определение характеристик сверхпроводящих лент, таких как критический ток, зависимость критического тока от внешнего магнитного поля и угла его приложения. Одной из основных характеристик лент, важных для потенциальных применений, являются величина критического тока при температуре 77 К и его однородность по длине ленты. Для различных применений ВТСП важно не только знать характеристики, указанные производителем, но и иметь возможность контроля и измерения непосредственно перед использованием.

Согласно модели критического состояния, в каждом месте сверхпроводящего образца течет либо критическая плотность тока, либо нулевая [4]. Одним из методов измерения критического тока сверхпроводника является резистивный метод. Однако его реализация сопряжена с определенными сложностями, такими как создание надежных контактов, защита от перегорания при переходе в нормальное состояние, тепловые потери в криогенную область через массивные тоководы и использование мощного источника тока. Поэтому для более удобного измерения критических токов предпочтительны бесконтактные методы.

Нами был модифицирован метод определения критического тока кольца из ВТСП по захваченному потоку. В кольцо из ВТСП с помощью соленоида вводится поток, создающий экранирующие токи в сверхпроводнике, а затем поток соленоида снижается до нуля и регистрируется сигнал экранирующих токов. Значения критического тока в магнитном поле получались следующим образом – к участку ленты прикладывалось магнитное поле, которое локально понижало критический ток. При этом существует возможность ориентации локального магнитного поля под углом к поверхности ленты, что позволяет получать данные об анизотропии критического тока.

Измерения проводились на ВТСП ленте 2 поколения фирмы SuperOx, состава YBCO, шириной 12мм, критический ток, заявленный производителем ~514 А. На отрезке данной ленты длиной 11 см. был сделан разрез вдоль ленты, не доходящий до краев. В разрез был вставлен соленоид, создающий поток внутри получившегося кольца. В центре соленоида находится датчик Холла, регистрирующий магнитное поле, создаваемое экранирующими токами ВТСП. Локальное магнитное поле создается постоянными магнитами NdFeB с возможностью поворота вокруг кольца на 180 градусов.

На рис. 1 представлена зависимость критического тока ВТСП ленты в магнитном поле 1500 Ое в зависимости от угла приложения поля относительно поверхности (0° – продольная ориентация, 90° – поперечная). Видно, что максимум критического тока достигается при ориентации внешнего магнитного поля на 22-23 градуса относительно поверхности. Причины такого поведения угловой зависимости критического тока обсуждаются и требуют дополнительного исследования.

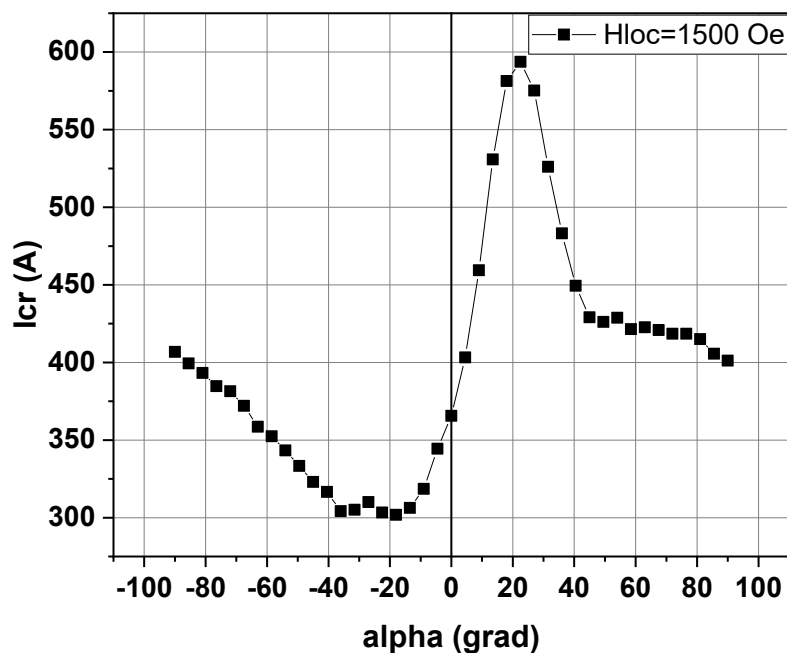


Рис. 1. Зависимость критического тока ВТСП ленты фирмы СуперОкс от угла приложения локального магнитного поля  $H=1500$  Ое при температуре 77 К.

Таким образом, был продемонстрирован простой и удобный способ контроля значений критического тока и измерения анизотропии критического тока ВТСП ленты второго поколения.

Авторы выражают благодарность компании SuperOx за предоставленные образцы. Исследования проводились при поддержке РНФ (проект № 23-29-00390).

- [1] М. Е. Мойзых, С. В. Самойленков, А. П. Вавилов, Е. С. Прохоров, А. С. Пучков, А. В. Майоров, Р. Л. Байбеков, О. В. Токарева, А. В. Жуков, *Электричество* **4**, (2021).
- [2] A.S. Voronov et al, *J. Phys.: Conf. Ser.* **1686** 012023 (2020).
- [3] Francesco Grilli et al, *J. Phys.: Conf. Ser.* **1590** 012051 (2020).
- [4] C.P. Bean, *Rev. Mod. Phys.* **36**, 31 (1964).



## СТРУКТУРНЫЙ БЛИЖНИЙ ПОРЯДОК И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

**А.Н. Пономарев<sup>1,2\*</sup>, В.Е. Егорушкин<sup>1</sup>, Н.Г. Бобенко<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 634055, Томск, Россия  
<sup>2</sup>Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, 634050,  
Томск, Россия

\* e-mail: [alex@ispms.ru](mailto:alex@ispms.ru)

Для описания низкотемпературного поведения электронных и тепловых свойств металлизированных углеродных нанотрубок с учетом особенностей их структуры, предложена модель электронного переноса в неупорядоченных металлических системах с примесями и областями локального ближнего порядка на основе метода температурных функций Грина. Качественной и количественной характеристикой дефектности структуры в данном подходе является параметр ближнего порядка. Метод расчета параметра ближнего порядка для углеродных наносистем с конкретными типами дефектов и функциональных групп основан на теории Кривоглаза-Кацнельсона. В рамках предложенной модели исследованы электронные транспортные свойства и электронные характеристики углеродных нанотрубок, одно- и двухслойного графена. Показано, что наличие областей ближнего порядка ответственно за открытие щели в плотности электронных состояний, величину которой возможно регулировать изменениями в атомной структуре – формируя определенные функциональные группы [1]. Описано изменение типа температурной зависимости проводимости [2], формирование пиков в теплоемкости и энтропии [3], изменение знака термоэдс углеродных нанотрубок [4]. Получены температурные зависимости исследуемых свойств УНТ с учетом экспериментально наблюдаемых атомных конфигураций дефектов. Обнаружена корреляция между изменением исследованных свойств и формированием в процессе синтеза и постобработки УНТ различных типов функциональных групп и примесей в атомной структуре.

*Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема FWRW-2022–0002.*

- [1] N.G. Bobenko, V.V. Bolotov, V.E. Egorushkin, P.M. Korusenko, N.V. Melnikova, S.N. Nesov, A.N. Ponomarev, S.N. Povoroznyuk, Carbon **153**, 40 (2019)
- [2] N.G. Bobenko, V.E. Egorushkin, N.V. Melnikova, A.N. Ponomarev, Physica E **60**, 11 (2014)
- [3] A.N. Ponomarev, N.G. Bobenko, V.E. Egorushkin, N.V. Melnikova, Physica E **66**, 13 (2015)
- [4] N.V. Melnikova, V.E. Egorushkin, N.G. Bobenko, A.N. Ponomarev, Russ. Phys. **55**, 1266 (2013)

# РОСТ, МИКРОСТРУКТУРА И СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ и $\text{SrCsFe}_4\text{As}_4$

**А.Ю. Дегтяренко<sup>1\*</sup>, В.А. Власенко<sup>1</sup>, С.Ю. Гаврилкин<sup>1</sup>, А.Ю. Цветков<sup>1</sup>, К.С. Перваков<sup>1</sup>,  
С.В. Кузьмичев<sup>2</sup>, Т.Е. Кузьмичева<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Центр высокотемпературной сверхпроводимости и квантовых материалов им. В.Л. Гинзбурга, ФИАН, 119991, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Физический факультет, МГУ им. М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Россия*  
\*e-mail: degtyarenkoayu@lebedev.ru

Новая система сверхпроводников на основе железа 1144, открытая в 2016 году [1] активно исследуется научными группами по всему миру. Прежде всего интерес вызван сосуществованием магнитного упорядочения при  $T_m \approx 15$  К и сверхпроводящего перехода при  $T_c \approx 36$  К в соединениях, содержащих европий, а также высоким значением верхнего критического поля  $\sim 100$  Т. В данной работе были исследованы монокристаллы магнитного  $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$  и немагнитного  $\text{SrCsFe}_4\text{As}_4$  сверхпроводников выращенные из расплава собственного компонента CsAs, так называемым методом “self-flux” [2]. В качестве исходных компонентов использовались высокочистые материалы Eu, Cs, Sr, Fe и As, из которых были синтезированы необходимые прекурсоры: EuAs, SrAs,  $\text{Fe}_2\text{As}$ , CsAs. Далее прекурсоры помещались в корундовые тигли в необходимом стехиометрическом соотношении, заваривались в танталовые контейнеры, после чего проводилась длительная многоступенчатая термообработка в атмосфере аргона. Варьируя температурные режимы роста и количество флюса CsAs, успешно выращены монокристаллы  $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$  и  $\text{SrCsFe}_4\text{As}_4$  со следовыми включениями родственной фазы 122. Измерения  $\chi(T)$ ,  $M(H)$  и  $R(T)$  демонстрируют объемную сверхпроводимость и довольно резкий сверхпроводящий переход. Микроструктурные исследования свидетельствуют о наличии планарных дефектов в виде фаз 122:  $\text{SrFe}_2\text{As}_2$ ,  $\text{EuFe}_2\text{As}_2$ ,  $\text{CsFe}_2\text{As}_2$  [3, 4, 5]. Это подтверждает предположение о том, что фаза 1144 конкурирует с родственной фазой 122 во время роста кристаллов.

Работа выполнена в рамках проекта Российского научного фонда №22-22-00776. Измерения проведены с использованием оборудования Центра коллективного пользования ФИАН.

- [1] A.J. Iyo et al, Am. Chem. Soc. **138**, 3410–3415 (2016).
- [2] S. A. Kuzmichev et al, JETP LETTERS **116**, 10 (2022).
- [3] V. A. Vlasenko et al, Supercond. Sci. Technol. **33**, 084009 (2020).
- [4] S. Ishida, et al, NPJ Quantum Mater. **4**, 272019 (2019).
- [5] A. Y. Degtyarenko et al, Nanomaterials, **12**, 3801 (2022).

# ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И КРИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРОВОДОВ НА ОСНОВЕ ПНИКТИДА СЕМЕЙСТВА 122, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ «ПОРОШОК В ТРУБЕ»

**И.И. Савельев**<sup>\*</sup>, А.С. Цаплева, М.Д. Терина, П.В. Лукьянов, И.М. Абдюханов,  
М.В. Алексеев, А.В. Михалев, М.М. Потапенко  
АО «ВНИИИМ», 123098, Москва, Россия  
<sup>\*</sup>e-mail: [iligsav@gmail.ru](mailto:iligsav@gmail.ru)

Открытие в 2008 году сверхпроводимости в железосодержащих соединениях [1] и их дальнейшие исследования дали основания считать, что они в перспективе могут рассматриваться для применения в сильнопольных магнитах, в том числе, установок физики высоких энергий. Высокие критические магнитные поля (до 200 Тл), меньшая по сравнению с купратными сверхпроводниками анизотропия, слабая зависимость критического тока от магнитного поля, а также более высокая температура перехода в сверхпроводящее состояние по сравнению низкотемпературными сверхпроводниками дало толчок к поиску практической реализации их в магнитных системах. Для этого сверхпроводники должны представлять собой композиционные провода, которые можно было бы использовать в изготовлении кабелей для намоток в индукционных катушках. Помимо высокой токонесущей способности (плотности критического тока  $J_c \sim 10^5$  А/см<sup>2</sup> в магнитных полях до 10 Тл при температуре 4,2 К), они должны иметь высокую механическую прочность, чтобы выдерживать электромагнитные и термические нагрузки в процессе эксплуатации, состоять из волокон, распределённых в металлической матрице для защиты от скачков потока, иметь достаточную длину в сотни/тысячи метров для масштабного применения [2]. На данный момент заметный прогресс был достигнут для пниктидов семейства 122. Так, например, для  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  (Ba-122) характерны критические температуры ( $T_c$ ) до 38 К, верхние критические магнитные поля ( $H_{c2}$ ) более 100 Тл, низкая анизотропия свойств ( $\gamma \sim 2$ ) и значения плотности критического тока ( $J_c$ )  $\sim 10^6$  А/см<sup>2</sup>. Также они стабильны при комнатных условиях и могут быть образованы при любом виде допирования (например, при электронном допировании никеля в подрешётку железа или дырочном допировании натрия в подрешётку бария).

В рамках исследования были изготовлены образцы одноволоконных проводов  $\sim \varnothing 1,0$  мм с порошковой сердцевинкой на основе  $\text{BaFe}_{1,9}\text{Ni}_{0,1}\text{As}_2$ , полученных методом «порошок в трубе». Определение коэффициента заполнения (КЗ) порошком по сечению и измерение микротвёрдости позволило оценить уплотнение порошковой сердцевинки в процессе деформирования провода. Методом ЭРМ анализа был определён состав порошковой сердцевинки и изучены границы её раздела с металлической оболочкой после термической обработки. Проведён качественный и количественный фазовый анализ, а также определён параметр кристаллической решётки пниктида. Для оценки влияния термической обработки на критические свойства проведены электрофизические испытания образцов для определения  $T_c$  и  $J_c$  при температуре 4,2 К в магнитных полях до 10 Тл.

- [1] Kamihara Y., Watanabe T., Hirano M. and Hosono H. Iron-based layered superconductor  $\text{La}[\text{O}_{1-x}\text{F}_x]\text{FeAs}$  ( $x = 0.05-0.12$ ) with  $T_c = 26$  K. – 2008. – J. Am. Chem. Soc. – 130. – P.3296–3297
- [2] Larbalestier D.C., Gurevich A., Feldmann D.M., and Polyanskii A. High  $T_c$  superconducting materials for electric power applications. – 2001a. – Nature. – 414. – P.368–377

## ТРЕХЩЕЛЕВАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ LiFeAs ПО ДАННЫМ СПЕКТРОСКОПИИ ПЛАНАРНЫХ КОНТАКТОВ НА МИКРОТРЕЩИНЕ

**С.А. Кузьмичев<sup>1,2\*</sup>, Т.Е. Кузьмичева<sup>2,1</sup>, И.В. Морозов<sup>3</sup>, А.И. Болталин<sup>3</sup>, А.И. Шилов<sup>3,2</sup>**

<sup>1</sup>Физический факультет, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,  
Ленинские горы, 1, Москва, 119991, Россия

<sup>2</sup>Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Ленинский пр-т, 53, Москва, 119991, Россия

<sup>3</sup>Химический факультет, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,  
Ленинские горы, 1, Москва, 119991, Россия

\*e-mail: [kuzmichev@lt.phys.msu.ru](mailto:kuzmichev@lt.phys.msu.ru)

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

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

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

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

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

Планарные SnS-контакты создавались при 4.2 K с помощью техники «break-junction». Данный метод позволяет локально и напрямую определять величины и температурные зависимости объемных СП параметров порядка. Преимущества и недостатки методики, детали эксперимента подробно описаны в обзоре [6].

Проведены исследования более 100 SnS-контактов в монокристаллах LiFeAs, полученных из одной закладки [1,7,8]. В нормальном состоянии вплоть до  $T = 80\text{--}100\text{ K}$  транспортные характеристики  $I(V)$  и  $dI(V)/dV$  получаемых контактов воспроизводимо демонстрировали сильную нелинейность, вызванную *объемными* свойствами и не связанную со сверхпроводимостью. Данная нелинейность может быть следствием пика плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми в LiFeAs.

На  $I(V)$ -характеристиках ниже  $T_c$  наблюдался избыточный андреевский ток и отсутствовал гистерезис и сверхтоковая ветвь, что говорит о реализации IMARE [4,5].

Андреевские структуры на  $dI(V)/dV$ -спектрах соответствуют как минимум трем СП параметрам порядка [1,7,8]. Для большой  $\Delta_\Gamma$  и средней  $\Delta_L$  СП щелей воспроизводимо наблюдались дублетные  $dI(V)/dV$ -минимумы, предположительно связанные с анизотропией  $\Delta_\Gamma$  и  $\Delta_L$  в  $k_x k_y$ -плоскости импульсного пространства. Напрямую определенные при  $T \ll T_c$  экстремумы анизотропных СП щелей в среднем составляют  $\Delta_\Gamma^{\text{out}} \approx 5.8$  мэВ и  $\Delta_\Gamma^{\text{in}} \approx 5.0$  мэВ (анизотропия  $\sim 14\%$ ),  $\Delta_L^{\text{out}} \approx 3.2$  мэВ и  $\Delta_L^{\text{in}} \approx 2.2$  мэВ (анизотропия  $\sim 32\%$ ). Для малой сверхпроводящей щели  $\Delta_S \approx 1.2$  мэВ признаков анизотропии не наблюдалось. По данным ARPES [2], большая СП щель открывается на внутреннем цилиндре поверхности Ферми в  $\Gamma$ -точке, средняя щель – в электронных зонах, а малая – на внешнем  $\Gamma$ -цилиндре.

Разброс значений  $\Delta_j(0)$ , наблюдаемый на верхней панели Рис. 1, вызван разбросом локальных  $T_c = 15.0\text{--}17.5$  К исследованных SnS-контактов, что может быть связано с локальным дефицитом  $\text{Li}_{1-\delta}$  в контактной области. В то же время, разброс характеристических отношений  $2\Delta_j(0)/(k_B T_c)$  (нижняя панель Рис. 1) значительно меньше, что говорит о скейлинге  $\Delta_j(0)$  и  $T_c$  в исследованном диапазоне  $T_c$ .

Напрямую полученные температурные зависимости СП щелей, приведенные на Рис. 2, лежат ниже однозонных БКШ-образных функций (показана пунктиром для  $\Delta_\Gamma^{\text{out}}$ ) и типичны для случая умеренного межзонного взаимодействия. Степени анизотропии  $\Delta_L$  и  $\Delta_\Gamma$  остаются примерно постоянными вплоть до  $T_c$  [7,8].

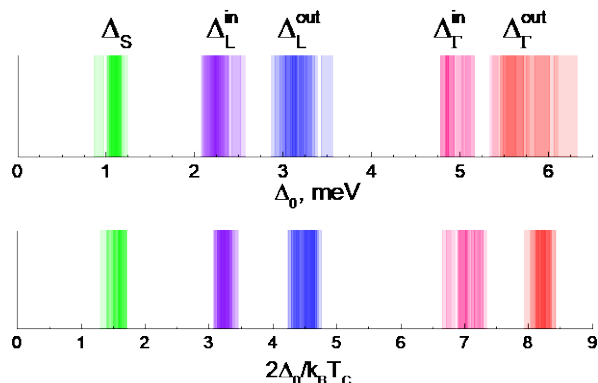


Рис. 1. Гистограммы величин СП энергетических параметров  $\Delta_j(0)$  при  $T \ll T_c$ . Локальные  $T_c = 15.0\text{--}17.5$  К. Интенсивность цвета соответствует вероятности наблюдения величин  $\Delta_j(0)$  и  $2\Delta_j(0)/(k_B T_c)$ .

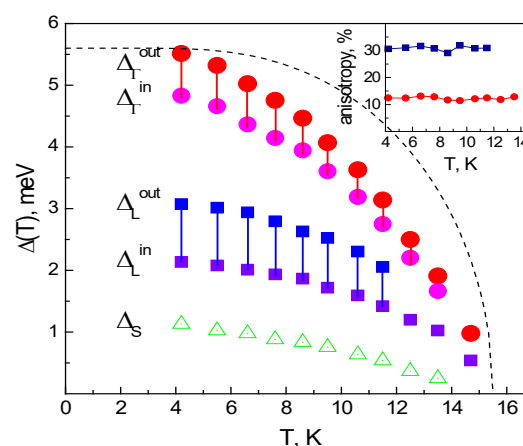


Рис. 2. Температурные зависимости СП энергетических параметров  $\text{LiFeAs}$ . Цвета для  $\Delta_j$  соответствуют таковым с Рис. 1. **Вставка** – температурные зависимости анизотропии большой  $\Gamma$ - (красные кружки) и средней  $L$ - (синие квадраты) СП щелей.

- [1] T.E. Kuzmicheva, S.A. Kuzmichev, JETP Lett. **114**, 630 (2021)
- [2] S.V. Borisenko, *et al.*, Symmetry **4**, 251 (2012)
- [3] I. Morozov, *et al.*, Cryst. Growth Des. **10**, 4428 (2010)
- [4] M. Octavio, *et al.*, Phys. Rev. B **27**, 6739 (1983)
- [5] R. Kümmel, *et al.*, Phys. Rev. B **42**, 3992 (1990)
- [6] S.A. Kuzmichev, T.E. Kuzmicheva, Low Temp. Phys. **42**, 1008 (2016)
- [7] T.E. Kuzmicheva, *et al.*, JETP Lett. **111**, 350 (2020)
- [8] S. Kuzmichev, *et al.*, SN Applied Sciences **4**, 189 (2022)



# ТУННЕЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПНИКТИДОВ Na(Fe,Co)As НА ОСНОВЕ ЩЕЛОЧНОГО МЕТАЛЛА В СВЕРХПРОВОДЯЩЕМ И НОРМАЛЬНОМ СОСТОЯНИИ

**Т.Е. Кузьмичева<sup>1\*</sup>, С.А. Кузьмичев<sup>2,1</sup>, А.Д. Ильина<sup>1,4</sup>, И.А. Никитченков<sup>2</sup>,  
И.В. Морозов<sup>3</sup>, А.И. Шилов<sup>1,3</sup>, Е.О. Рахманов<sup>1,3</sup>**

<sup>1</sup>Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, 119991, Москва, Россия

<sup>2</sup>Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Россия

<sup>3</sup>Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Россия

<sup>4</sup>Московский физико-технический институт, 141701, Долгопрудный, Россия

\* e-mail: [kuzmichevate@lebedev.ru](mailto:kuzmichevate@lebedev.ru)

Пниктиды Na(Fe,Co)As семейства 111 железосодержащих сверхпроводников (СП) по сей день остаются относительно малоизученными. Из-за наличия щелочного металла свойства этих соединений быстро деградируют в присутствии даже следовых количеств H<sub>2</sub>O и O<sub>2</sub>, поэтому подготовку, монтаж и эксперимент с кристаллами Na(Fe,Co)As необходимо проводить в защитной атмосфере.

В отличие от большинства железосодержащих СП, NaFeAs сверхпроводит в стехиометрическом составе с неоптимальной  $T_c \approx 10$  К; выше  $T_c$  NaFeAs демонстрирует антиферромагнитный (АФМ) и нематический порядок. При электронном допировании Na(Fe,Co)As АФМ и нематичность подавляются, а СП фаза образует «колокол» с максимальной  $T_c \approx 23$  К [1]. Уровень Ферми пересекают несколько зон вблизи перехода Лифшица, образуя дырочные цилиндры вокруг Г-точки зоны Бриллюэна и электронные цилиндры вокруг М-точки, на которых ниже  $T_c$  образуются несколько СП конденсатов [1].

С помощью метода «раствор в расплаве» мы синтезировали крупные монокристаллы Na(Fe,Co)As недодопированного состава, номинально содержащие 2% Co, с  $T_c \approx 21$ -22 К. Для исследования структуры СП параметра порядка использовался метод спектроскопии эффекта некогерентных многократных андreeвских отражений (IMARE) туннельных наноконтактов типа СП – тонкий нормальный металл – СП (SnS). Эффект вызывает избыточный ток и отсутствие сверхтоковой ветви на вольтамперной характеристике (ВАХ) SnS-контакта, а также серию минимумов динамической проводимости  $dI(V)/dV$ , положение которых напрямую определяет величину и температурную зависимость СП щели  $\Delta$  [2]. Планарные механически регулируемые SnS-контакты создавались с помощью техники «break-junction» [3].

В нормальном состоянии выше  $T_c$  мы воспроизводимо наблюдали остаточную нелинейность  $I(V)$  и  $dI(V)/dV$ -характеристик, не связанную напрямую со СП свойствами (четыре верхние кривые на рис. 1). Мы показали, что нелинейность не может быть вызвана перегревом контактной области измерительным током, геометрическими резонансами или случайными эффектами [4]. Ниже  $T_c$  на фоне этой нелинейности появляются андreeвские особенности (пик  $dI(V)/dV$  при  $eV = 0$ , а также щелевые минимумы; см. две нижние кривые на рис. 1). Согласно классическому подходу [5],  $dI(V)/dV$ -спектр туннельного контакта в нормальном состоянии определяется распределением плотности электронных состояний  $N(E)$  вблизи уровня Ферми. Следовательно, можно предположить наличие особенностей  $N(E_F)$  в Na(Fe,Co)As, вызванных топологией зонной структуры или перенормировкой на взаимодействие с характерными бозонными модами (например, нематическими флуктуациями).

Ниже  $T_c$  нами наблюдается многощелевая СП. Напрямую определены величины трех СП параметров порядка  $\Delta_L^{in}$ ,  $\Delta_L^{out}$  и  $\Delta_S$  при  $T \ll T_c$ ; их характеристические отношения  $2\Delta(0)/k_B T_c$  составляют примерно 6, 4 и 2, соответственно [4]. Предположительно,  $\Delta_L^{in}$  и  $\Delta_L^{out}$  относятся к одному и тому же СП конденсату и являются «экстремумами» единого СП параметра порядка  $\Delta_L$  с расширенным s-волновым типом симметрии без точек нулей: минимальной и максимальной энергиями связи куперовских пар в данной зоне в зависимости от

направления импульса. Оцененная степень предположительной анизотропии большой СП щели составляет  $A_L \approx 30\text{--}40\%$ .

Три полученных характеристических отношения воспроизводятся и остаются примерно постоянными в диапазоне локальных  $T_c \approx 18\text{--}22\text{ K}$  (температур перехода контактной области размером  $10\text{--}50\text{ nm}$  в нормальное состояние), что означает скейлинг соответствующих СП щелей с  $T_c$  в этом диапазоне температур.

Напрямую измеренные температурные зависимости СП параметров порядка  $\Delta(T)$  типичны для случая умеренного межзонного взаимодействия (рис. 2). Степень предположительной анизотропии  $A_L$  практически не меняется с увеличением температуры вплоть до  $T_c$ , как показано на вставке к рис. 2, что означает примерно постоянное отношение  $\Delta_L^{\text{in}}(T)/\Delta_L^{\text{out}}(T)$ . Вместе с тем, малая СП щель закрывается с температурой чуть быстрее: на это указывает резкий рост отношения  $\Delta_L^{\text{out}}/\Delta_S$ , показанный на нижней панели рис. 2. Отличное от  $\Delta_L$  температурное поведение указывает на то, что  $\Delta_S$  является отдельным объемным СП параметром порядка.

Работа поддержана грантом РНФ № 22-72-10082.

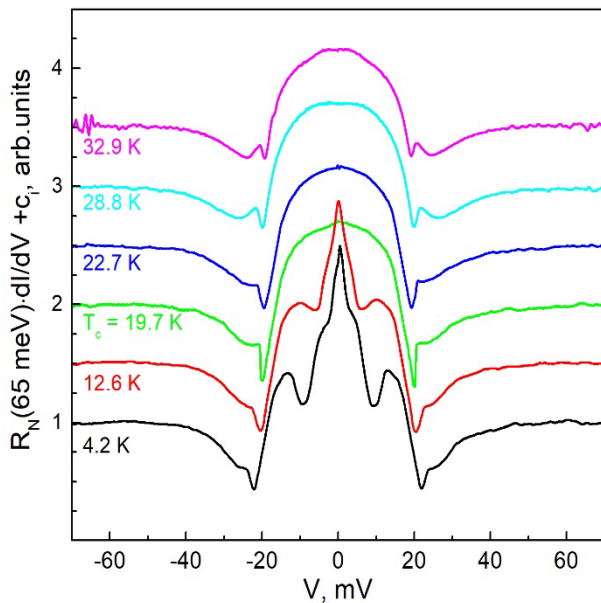


Рис 1.  $dI(V)/dV$ -спектр SnS-контакта в СП и нормальном состоянии (две нижние и четыре верхние кривые, соответственно).

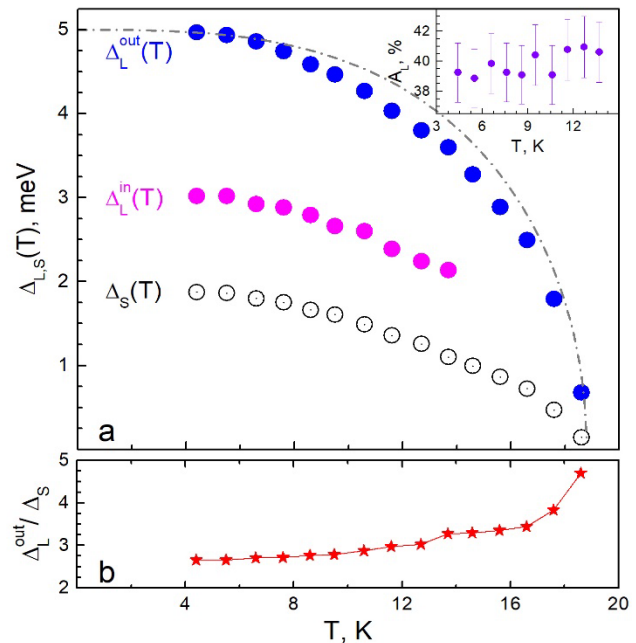


Рис. 2. Температурные зависимости трех СП параметров порядка (кружки). Однозонная БКШ-образная зависимость показана для сравнения. Снизу приведено отношение большой и малой СП щелей, на вставке – предположительная анизотропия  $\Delta_L$  в зависимости от температуры.

- [1] Т.Е. Кузьмичева, С.А. Кузьмичев, Письма в ЖЭТФ **114**, 685 (2021) [мини-обзор]
- [2] R. Kümmel, et al., Phys. Rev. B **42**, 3992 (1990)
- [3] С.А. Кузьмичев, Т.Е. Кузьмичева, Физ. Низк. Темп. **42**, 1284 (2016) [обзор]
- [4] С.А. Кузьмичев и др., Письма в ЖЭТФ **117**, 614 (2023)
- [5] I. Giaever, K. Megerle, Phys. Rev. **112**, 1101 (1961).



# ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА ВБЛИЗИ ПЕРЕХОДА $S_{\pm} \rightarrow S_{++}$ В ФЕРРОПНИКТИДАХ

**В.А. Шестаков<sup>1\*</sup>, М.М. Коршунов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия

\*e-mail: [v\\_shestakov@iph.krasn.ru](mailto:v_shestakov@iph.krasn.ru)

Отличительной чертой ферропниктидов среди обширного семейства необычных сверхпроводников является устойчивость к полному подавлению сверхпроводимости при наличии в них немагнитного беспорядка [1]. Данная устойчивость обусловлена существенно многозонной электронной структурой данных материалов [2] и возможностью смены структуры сверхпроводящего параметра порядка (сверхпроводящей щели) при внесении немагнитных примесей в систему [1]. Смена структуры сверхпроводящей щели проявляется в переходе от меняющего знак между зонами параметра порядка  $s_{\pm}$ -типа к  $s_{++}$ -параметру порядка, сохраняющему один и тот же знак в пределах различных зон. Характер такого перехода не одинаков для примесей с различной величиной рассеивающего потенциала: для слабо рассеивающей примеси в борновском пределе (и вблизи него) смена знака параметра порядка происходит скачком. С ростом величины потенциала примеси этот скачок сглаживается [3, 4].

Исследовано в двухзонной модели ферропниктидов поведение сверхпроводящих щелей (сверхпроводящего параметра порядка) в области вызванного немагнитным беспорядком перехода между  $s_{\pm}$ - и  $s_{++}$ -состояниями вблизи борновского предела. Эффективное сечение рассеяния в расчётах не превышает значений  $\sigma = 0,5$ .

В уравнениях Элиашберга для двухзонного необычного сверхпроводника с  $s_{\pm}$ -структурой параметра порядка в представлении Намбу рассмотрен учёт компонент собственно-энергетических поправок, пропорциональных матрицам Паули, как  $\tau_1$ , так и  $\tau_2$ .

[1] М.М. Коршунов, Ю.Н. Тогущова, О.В. Долгов, УФН, Т. 186, № 12 (2016)

[2] P.J. Hirschfeld, M.M. Korshunov, I.I. Mazin, Rep. Prog. Phys. 74 (2011)

[3] V.A. Shestakov, M.M. Korshunov, Yu.N. Togushova2, D.V. Efremov, O.V. Dolgov, Supercond. Sci. and Technol. 31 (2018)

[4] V.A. Shestakov, M.M. Korshunov, O.V. Dolgov, Symmetry 10 (2018)

# ПОВЕРХНОСТЬ ФЕРМИ В НЕМАТИЧЕСКОЙ ФАЗЕ СВЕРХПРОВОДНИКОВ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА

С.Д. Казанина<sup>2\*</sup>

Научный руководитель М.М. Коршунов<sup>1,2</sup>

доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент РАН  
<sup>1</sup>Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия  
<sup>2</sup>Сибирский федеральный университет, 660041, Красноярск, Россия

e-mail: [sonyakazaneena@gmail.com](mailto:sonyakazaneena@gmail.com)

Концепция нематических фаз исходит из жидких кристаллов, где неупорядоченные аморфные массивы стержнеобразных частиц расположены в одном направлении, нарушая вращательную симметрию. В кристаллах термин нематический применяют при понижении симметрии электронной подсистемы до наступления структурного фазового перехода, при котором ионы смещаются в новые равновесные позиции. Например, в простой тетрагональной структуре порядок симметрии электронной подсистемы понижается до орторомбической структуры.

Объектом исследования является трёхорбитальная модель сверхпроводников на основе железа. Для сверхпроводников на основе железа нематичность возникает из-за спиновых флуктуаций. Интерес представляет взаимодействие сверхпроводящего и нематического порядков и их взаимное влияние.

Из основ квантовой механики и физики твёрдого тела найдена энергия трёхорбитальной модели, используемой для описания соединений железа, гамильтониан которой записывается в виде [1]

$$H_0 = \sum_{k,\sigma,l,m} \varepsilon_k^{lm} c_{kl\sigma}^+ c_{km\sigma} \quad (1)$$

В данной модели рассматривается квазидвумерный случай, поэтому импульс  $\vec{k}$  имеет компоненты  $k_x$  и  $k_y$ ,  $c_{kl\sigma}^+$  и  $c_{kl\sigma}$  – операторы рождения и уничтожения электрона с орбитальным индексом  $l$  и спином  $\sigma$ .

Матрица одноэлектронной модели выглядит следующим образом:

$$\hat{\varepsilon}_k = \begin{pmatrix} \varepsilon_{1k} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{2k} & \varepsilon_{4k} \\ 0 & \varepsilon_{4k} & \varepsilon_{3k} \end{pmatrix} \quad (2)$$

Для исследования энергии в нематической фазе введём гамильтониан [2]:

$$H_{nem} = \sum_{k,\sigma,l,m} F_k^{lm} c_{kl\sigma}^+ c_{km\sigma} \quad (3)$$

Здесь введена матрица, зависящая от констант связи  $V_{1,2,3}$  нематической фазы и структурного фактора  $f_k = F(\cos k_x - \cos k_y)$ :

$$\hat{F}_k = \begin{pmatrix} V_1 & 0 & 0 \\ 0 & V_2 & 0 \\ 0 & 0 & V_3 \end{pmatrix} f_k \quad (4)$$

Полный гамильтониан

$$H = H_0 + H_{nem} \quad (5)$$

Были получены собственные значения данного гамильтониана

$$\begin{aligned} E_{1k} &= \varepsilon_{1k} + V_1 f_k \\ E_{2,3k} &= \frac{1}{2}(\varepsilon_{2k} + \varepsilon_{3k} + f_k(V_2 + V_3) \pm \sqrt{D_k}) \end{aligned} \quad (6)$$

где  $D_k = (\varepsilon_{2k} - \varepsilon_{3k} + f_k(V_2 + V_3))^2 + 4\varepsilon_{4k}^2$ .

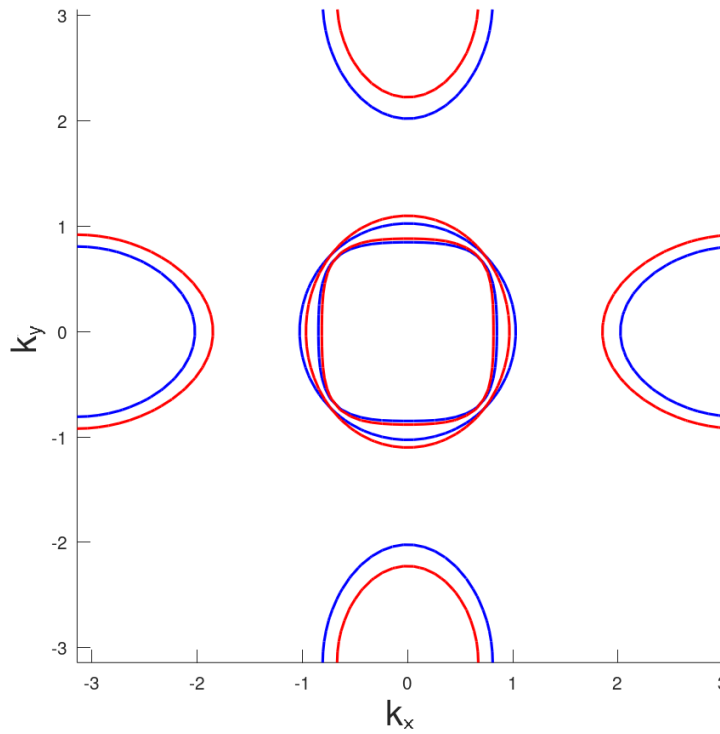


Рис 1. Поверхности Ферми без нематических искажений – синим цветом и при наличии нематичности – красным цветом

На Рис 1 представлены поверхности Ферми без нематических искажений с такими параметрами  $F = 0$   $V_i = 0$  и при наличии нематичности с  $F = 0,07$  и  $V_1 = V_2 = V_3 = 1$ .

При изменении параметра  $F$  и соотношения между  $V_1, V_2, V_3$  сделан вывод о том, что деформация поверхности Ферми для полного гамильтониана данной трёхорбитальной модели происходит при увеличении параметр  $F$  и изменении знака перед параметрами  $V_1, V_2, V_3$ .

Таким образом, нами рассмотрена трёхорбитальная модель, в которой при появлении нематичности изменяется поверхность Ферми.

[1] M. M. Korshunov, Y.N. Togushova, I. Eremin, Three-orbital Model for Fe-Pnictides, J Supercond Nov Magn. **26**: 2665-2668, (2013)

[2] Sourav Sen Choudhur, Sean Peterson, Yves Idzerda, Thermal transport in two-dimensional nematic superconductor, Phys.Rev. B **105**, 214515, (2022)

# ВЛИЯНИЕ СПИН-ОРБИТАЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ПОВЕРХНОСТЬ ФЕРМИ В МОДЕЛИ ПНИКТИДОВ ЖЕЛЕЗА

**Д.А. Иванов<sup>1\*</sup>, М.М. Коршунов<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> Сибирский федеральный университет, 660041, Красноярск, Россия

<sup>2</sup> Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия

\*e-mail: [danik.aliw@gmail.com](mailto:danik.aliw@gmail.com)

В данной работе рассматривается влияние спин-орбитального взаимодействия на ферми-поверхность в модели пниктидов железа в зоне Бриллюэна, соответствующей двум атомам железа на элементарную ячейку [[1]]. В первом из рассмотренных вариантов используется только лишь z-компонента спин-орбитального взаимодействия [[2], во втором же учтены сразу все его компоненты. Ниже представлены гамильтонианы, учитывающие спин-орбитальное взаимодействие: (1) – z-компонента, (2) – все компоненты [[1]].

$$\hat{H}_z = \begin{pmatrix} \hat{\varepsilon}_k + i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^z & 0 & i\frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^z & 0 \\ 0 & \hat{\varepsilon}_k - i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^z & 0 & -i\frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^z \\ i\frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^z & 0 & \hat{\varepsilon}_{k+Q} + i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^z & 0 \\ 0 & -i\frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^z & 0 & \hat{\varepsilon}_{k+Q} - i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^z \end{pmatrix}, \quad (1)$$

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{\varepsilon}_k + i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^z & i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^x + \frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^y & i\frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^z & i\frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^x + \frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^y \\ i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^x - \frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^y & -i\frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^z & i\frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^x - \frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^y & -i\frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^z \\ i\frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^z & i\frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^x + \frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^y & \hat{\varepsilon}_{k+Q} + i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^z & i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^x + \frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^y \\ i\frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^x - \frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^y & -i\frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^z & i\frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^x - \frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^y & \hat{\varepsilon}_{k+Q} - i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^z \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$\hat{\varepsilon}^z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\varepsilon}^x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\varepsilon}^y = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Здесь  $\hat{\varepsilon}_k$  и  $\hat{\varepsilon}_{k+Q}$  – матрицы  $3 \times 3$ , описывающие дисперсию электронов в трёхорбитальной модели [1],  $Q = (\pi, \pi)$ ,  $\lambda$  и  $\lambda'$  – константы спин-орбитального взаимодействия внутри одного атома железа и между двумя атомами железа в элементарной ячейке, соответственно. На рисунке Рис. 2. показан первый вариант для трех наборов параметров, зависящих от значений. Чем больше значения этих величин, тем сильнее происходит расщепление, и тем отчетливее проявляется нарушение первоначальной симметрии.

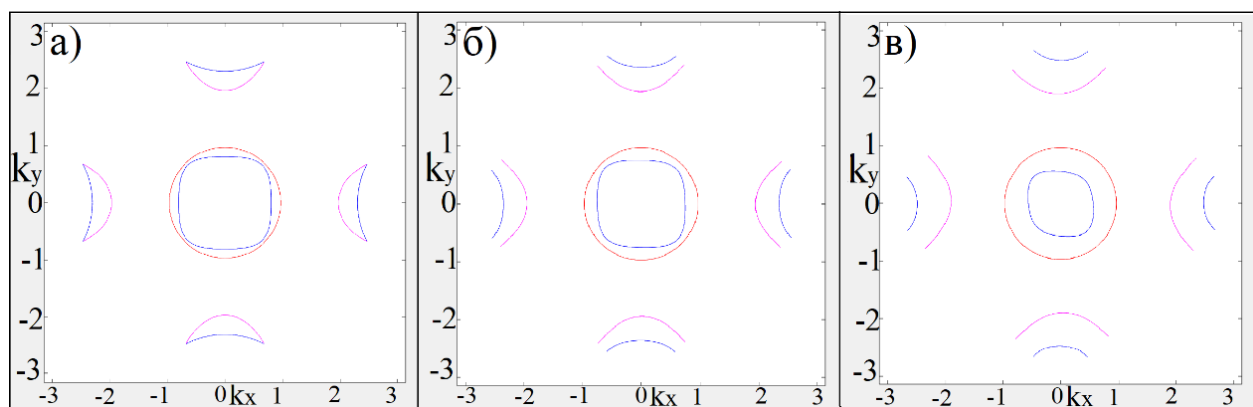


Рис. 2. Ферми-поверхность пниктида железа при наличии z-компоненты спин-орбитального взаимодействия: а)  $\lambda = \lambda' = 0$ ; б)  $\lambda = \lambda' = 0,2$ ; в)  $\lambda = \lambda' = 0,4$ .

Аналогичным образом, на рисунке [Ошибка! Источник ссылки не найден.](#) представлен второй вариант, соответствующий учёту всех компонент спин-орбитального взаимодействия.

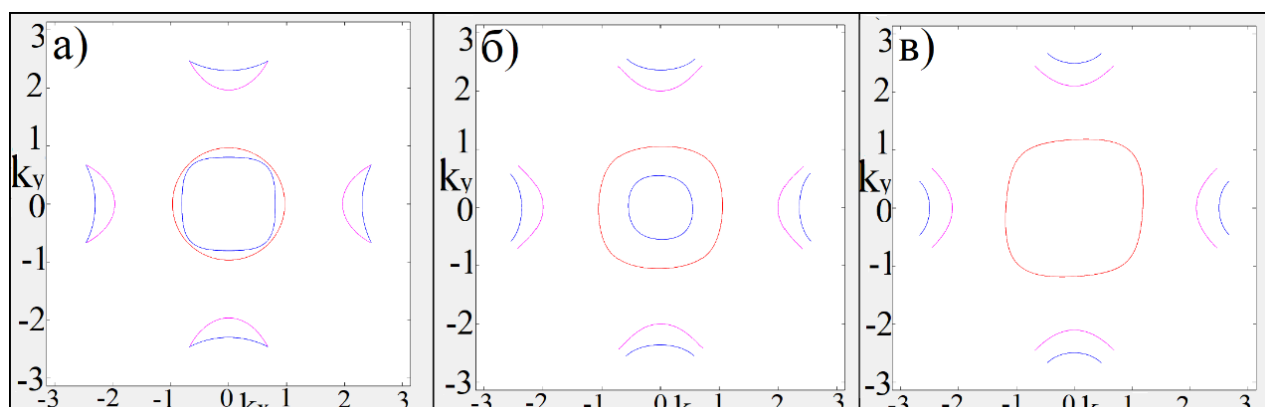


Рис. 3. Ферми-поверхность пниктида железа при наличии всех компонент спин-орбитального взаимодействия: а)  $\lambda = \lambda' = 0$ ; б)  $\lambda = \lambda' = 0,2$ ; в)  $\lambda = \lambda' = 0,4$ .

Видно, что в обоих случаях межатомное спин-орбитальное взаимодействие приводит к топологическому переходу – контуры листов поверхности Ферми вблизи точек  $(\pi, 0)$  и  $(0, \pi)$  из замкнутых становятся открытыми.

[1] Korshunov M.M., Togushova Y.N. Band Structure Modification Due to the Spin-orbit Coupling in the Three-orbital Model for Iron Pnictides // Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics 2018, 11(4), 430–437 (2018)

[2] Eremin I., Manske D., Bennemann K.H. Electronic theory for the normal-state spin dynamics in Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub>: Anisotropy due to spin-orbit coupling // Phys. Rev. B 65, 220502(R) (2002).

# МАГНИТНАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ В МНОГОЗОННОЙ МОДЕЛИ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СОЕДИНЕНИЙ ЖЕЛЕЗА

**Е.А. Ларионов<sup>2,3\*</sup>, М.М. Коршунов<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН 660036, Красноярск, Россия

<sup>2</sup>Сибирский федеральный университет, 660041, Красноярск, Россия

<sup>3</sup>ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036, Красноярск, Россия

\*email: egor.larionov\_rp@mail.ru

Интерес к высокотемпературной сверхпроводимости в соединениях железа определяется как практическим применением исследуемых соединений, так и наличием нерешенных проблем, связанных с описанием таких систем. В работе представлена спиновая восприимчивость для соединений железа. Расчет был сделан в реалистичной десятиорбитальной модели из работы [1]. Параметры модели подбирались для получения поверхности Ферми, повторяющей экспериментально наблюдаемую из работы [2]. Восприимчивость  $\chi(q, \omega)$  вычислялась как спиновый коррелятор в приближении случайных фаз (RPA) с учётом многоробитального одноузельного кулоновского взаимодействия, параметры которого включали внутриорбитальное и межорбитальное хаббардовское отталкивание  $U$  и  $U'$ , хундовский обмен  $J$  и межорбитальный перескок  $J'$  [3]. Установлено, что пик в действительной части  $\chi(q, \omega = 0)$  находится вблизи вектора  $q \approx (\pi, \pi)$ . Рост величины хаббардовского отталкивания приводит к росту спинового коррелятора, см. Рис.1.

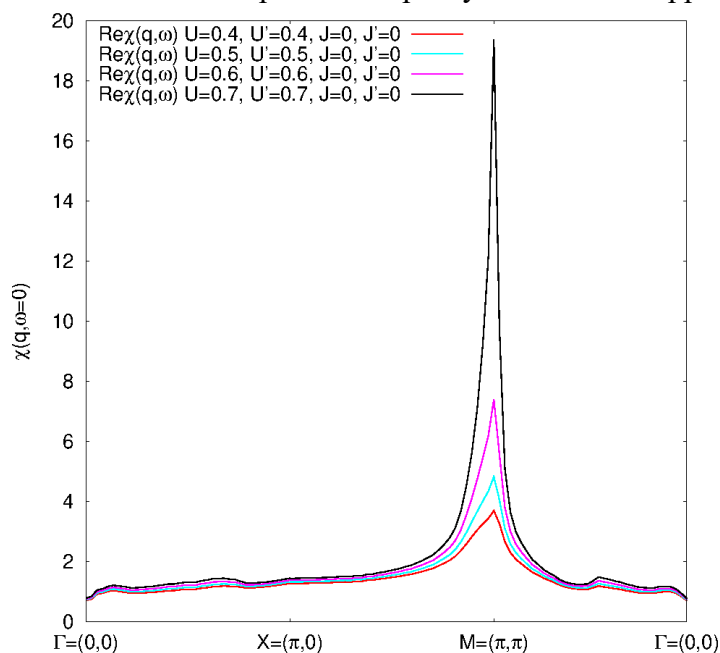


Рис 1. –  $\text{Re}(\chi)$  на нулевой частоте  $\omega = 0$  эВ как функция волнового вектора  $q \in \text{ГХГМ}$  для различных значений параметра хаббардовского отталкивания

Был сделан расчет для двух наборов параметров – один приводит к появлению электронных карманов на поверхности Ферми, а второй – нет. Сравнение показывает, что основной вклад от малых карманов проявляется в увеличении восприимчивости на малых волновых векторах, что видно на Рис. 2.

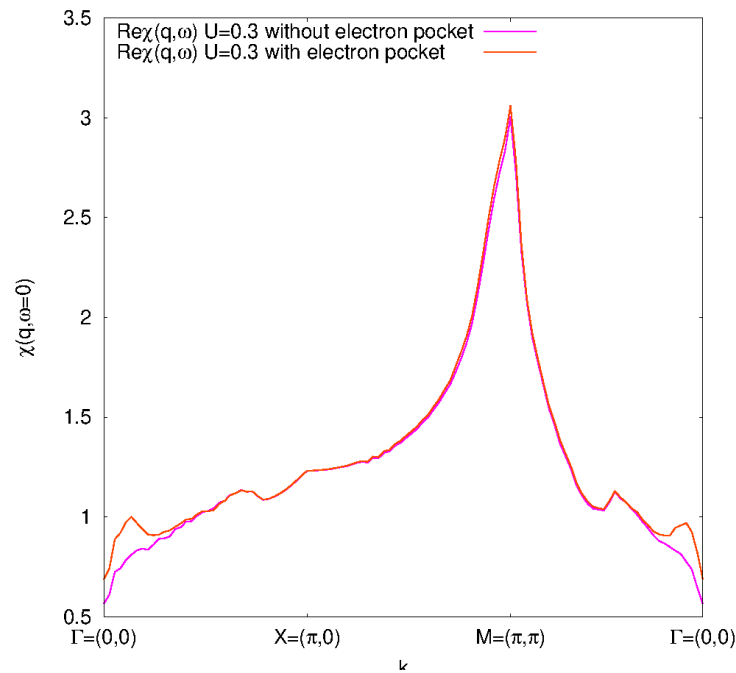


Рис 2. –  $\text{Re}(\chi)$  при  $\omega = 0$  как функция  $q \in \text{ГХГМ}$  для двух разных наборов параметров

### Список литературы

- [1] H. Eschrig, K. Koepernik, Physical Review B. Vol. 80 104503, P. 6-7. (2009)
- [2] A.A. Kordyuk, V.B. Zabolotnyy, D.V. Evtushinsky, A.N. Yaresko, B. Büchner, S.V. Borisenko Journal of superconductivity and novel magnetism Vol. 26, P. 2837-2841. (2013)
- [3] М.М Коршунов Успехи физических наук Т. 184, С. 882–888. (2014)



# ВИХРЕВАЯ ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА СУПЕРГИДРИДА ИТТРИЯ YH<sub>6</sub> ПРИ СВЕРХВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

**Садаков А.В.<sup>1\*</sup>, Власенко В.А.<sup>1</sup>, Троян И.А.<sup>2</sup>, Соболевский О.А.<sup>1</sup>, Семенов Д.В.<sup>3</sup>, Ди Чжоу<sup>3</sup>, Пудалов В.М.<sup>1,4</sup>**

<sup>1</sup>*P. N. Lebedev Physical Institute, Russian Academy of Sciences, Moscow 119991, Russia*

<sup>2</sup>*Shubnikov Institute of Crystallography, Federal Scientific Research Center Crystallography and Photonics, Russian Academy of Sciences, 59 Leninsky Prospekt, Moscow 119333, Russia*

<sup>3</sup>*Center for High Pressure Science & Technology Advanced Research, Bldg. #8E, ZPark, 10 Xibeiwang East Rd, Haidian District, Beijing, 100193, China*

<sup>4</sup>*National Research University Higher School of Economics, Moscow, 101000, Russia.*

\*e-mail: [andrey.sadakov@gmail.com](mailto:andrey.sadakov@gmail.com)

Проведено тщательное исследование вихревых фаз и вихревой динамики недавно открытого высокотемпературного сверхпроводника YH<sub>6</sub> с T<sub>c</sub> (по началу перехода) 215 K при давлении 200 ГПа [1]. Энергия термической активации вихрей Абрикосова (U<sub>0</sub>) определена в рамках теории термически активированного движения потока вихрей Абрикосова (TAFF). Энергия активации дает степенную зависимость  $U_0 \propto H^{-\alpha}$  от магнитного поля с возможной сменой режима пиннинга в поле около 8-10 Тл. Кроме того, мы обнаружили фазовый переход из состояния вихревого-стекла в состояние вихревой жидкости согласно теории вихревого стекла (VG). На основании полученных экспериментальных данных, для супергидридов впервые построена вихревая фазовая диаграмма. Очень высокие оценочные значения барьеров потока  $U_0(H) = 1,5-7 \cdot 10^4$  К вместе с высокими полями кроссовера выделяют супергидрид YH<sub>6</sub> в сравнении с большинством купратов и систем на основе железа. Число Гинзбурга для YH<sub>6</sub>  $Gi = 3-8 \times 10^{-3}$  указывает на то, что тепловые флуктуации не столь сильны и не могут уширить сверхпроводящие переходы в слабых магнитных полях.

Согласно теории вихревого стекла, удельное сопротивление сверхпроводника II рода вблизи перехода вихревая жидкость - вихревое стекло изменяется по степенному закону.  $\rho = \rho_0 \cdot (T/T_g - 1)^s$  [2]. Поэтому в координатах  $(d \ln R / dT)^{-1}$  vs T линейный участок вблизи нуля будет соответствовать режиму фазового перехода. Нижняя граница этого линейного участка дает значение T<sub>g</sub>, ниже которого вихри перешли в состояние стекла, при этом сопротивление сверхпроводника становится равным нулю. Верхняя граница критической области, описываемого степенным законом обозначена как T\*. Наклон линейного участка критической области дает величину критической экспоненты s.

Поведение сопротивления выше критической области хорошо описывается при помощи термически активированного движения потока (TAFF) [3]. Показано, что в узкой области, с шириной в 1-2K движение вихрей вызывают сопротивление

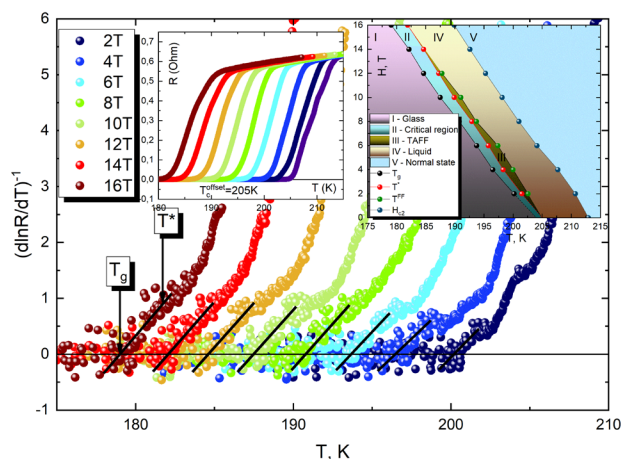


Рис 1. Основная панель: зависимость обратной производной логарифма сопротивления YH<sub>6</sub> в магнитных полях 2-16 Тесла. Определяемые величины T<sub>g</sub> и T\* - это нижняя и верхняя границы критического региона фазового перехода вихревое стекло-вихревая жидкость. Левая вставка: сверхпроводящие переходы в магнитных полях. Правая вставка: вихревая фазовая диаграмма YH<sub>6</sub>.

образца по закону  $\rho \sim \exp(-U(H,T)/T)$ , где  $U(H, T)$  - энергия активации. В простейшем представлении по модели Аррениуса было показано, что энергия активации линейно зависит от температуры и степенным образом зависит от магнитного поля  $U(H, T) = H^{-\alpha} \cdot (1 - T/T_c)$ , где показатель степени  $\alpha = 0.34-0.40$  в интервале магнитных полей 2-10 Тесла, после чего этот показатель испытывает излом, что может быть связано с перестройкой механизма пиннинга.

- [1] Troyan, I. A.; Semenok, D. V.; Kvashnin, A. G.; Sadakov, A. V.; Sobolevskiy, O. A.; Pudalov, V. M.; Ivanova, A. G.; Prakapenka, V. B.; Greenberg, E.; Gavriluk, A. G., et al. Anomalous High-Temperature Superconductivity in YH6. *Adv. Mater.* 2021, 33, 2006832.
- [2] Fisher, D. S.; Fisher, M. P. A.; Huse, D. A. Thermal fluctuations, quenched disorder, phase transitions, and transport in type-II superconductors. *Phys. Rev. B* **1991**, 43, 130-159.
- [3] Vinokur, V. M.; Feigel'man, M. V.; Geshkenbein, V. B.; Larkin, A. I. Resistivity of high- $T_c$  superconductors in a vortex-liquid state. *Phys. Rev. Lett.* **1990**, 65, 259-262.

# АНАТОМИЯ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО НОВЕЙШЕГО КОМНАТНОТЕМПЕРАТУРНОГО СВЕРХПРОВОДНИКА $\text{LuH}_{3-x}\text{N}_x$

**Н.С. Павлов<sup>1,2\*</sup>, И.Р. Шеин<sup>3</sup>, К.С. Перваков<sup>2</sup>, В.М. Пудалов<sup>2</sup>, И.А. Некрасов<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

<sup>3</sup>Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия

\*e-mail: [pavlovns@gmail.com](mailto:pavlovns@gmail.com)

Экспериментальное обнаружение сверхпроводимости при рекордно высокой критической температурой  $T_c=203$  К в водородсодержащей системе  $\text{H}_3\text{S}$  при экстремальных давлениях 100-250 ГПа [1] стимулировала новые экспериментальные и теоретические исследования (см. например обзоры [2,3,4]). Открытие околоромнатной сверхпроводимости в гидридах возвращает к классическому электрон-фононному сверхпроводящему спариванию в рамках теории Бардина-Купера-Шрифера (БКШ). Появление различных классов гидридов под давлением в том числе способствовало успешное предсказание расчетов в рамках теории функционала электронной плотности DFT (см. например [5,6]). Важным с точки зрения дальнейшего применения данного класса сверхпроводников является снижение значения внешнего давления, при котором возникает сверхпроводимость.

В этом году было наблюдение сверхпроводимости в легированном азотом гидриде лютеция  $\text{LuH}_{3-x}\text{N}_y$  с  $T_c=294$  К при 10 кбар [7]. Что стимулировало большое количество исследований. В данной работе мы рассмотрели подробно электронную зонную структуру в

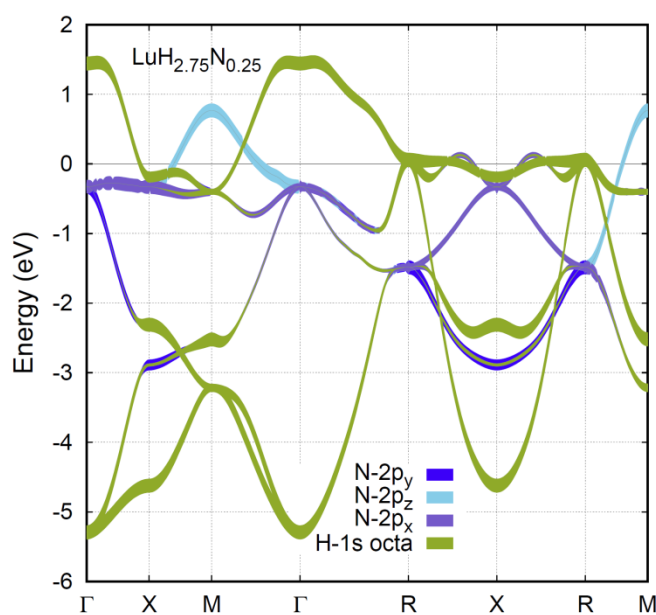


Рис 1. Зонная структура  $\text{LuH}_{2.75}\text{N}_{0.25}$  при минимальном наборе электронных состояний, полученная при проектировании на функции Ванье. Нуль энергии - уровень Ферми.

рамках DFT+U для одного из вариантов концентраций  $\text{LuH}_{2.75}\text{N}_{0.25}$ , которое возможно реализовалось экспериментально в первой работе [7]. Получены и сопоставлены с нелегированным случаем  $\text{LuH}_3$  зонная структура, плотность состояний и поверхности Ферми. Показано, что в стехиометрической системе состояния Lu-5d пересекают уровень Ферми, а состояния H-1s практически не дают вклада на уровне Ферми. Однако, при легировании азотом состояния N-2p попадают на уровень Ферми и приносят значительный вклад состояний H-1s.

Так же определена минимальная модель для воспроизведения электронной зонной структуры вблизи уровня Ферми. Она включает в себя H-1s состояния ионов водорода в октаэдрическом окружении и N-2p состояния азота (см. Рис. 1). Наличие состояний N-2p и H-1s на уровне Ферми в

легированном соединении может обеспечить лучшие условия для возникновения сверхпроводимости. Например, при легировании азотом полная плотность состояний на уровне Ферми увеличивается в два раза. Простой анализ для  $\text{LuH}_{2.75}\text{N}_{0.25}$  в рамках БКШ теории дал величину  $T_c=110$  К, которая в два раза больше чем в расчётах для  $\text{LuH}_3$ , и она может быть увеличена при дальнейшем легировании дырками за счёт роста плотности состояний на уровне Ферми.

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

- [1] A.P. Drozdov, M.I. Eremets, I.A. Troyan, V. Ksenofontov, S.I. Shylin, *Nature* **525**, 73 (2015)
- [2] M.I. Eremets, A.P. Drozdov, *Phys. Usp.* **59**, 1154 (2016)
- [3] L.P. Gor'kov, V.Z. Kresin, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 011001 (2018)
- [4] C.J. Pickard, I. Errea, M.I. Eremets, *Annual Review of Condensed Matter Physics* **11**, 57 (2020)
- [5] H. Liu, I. Naumov, R. Hoffmann, N.W. Ashcroft, R.J. Hemley, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **114**, 6990 (2017)
- [6] I. Kruglov, R. Akashi, S. Yoshikawa, A.R. Oganov, M.M.D. Esfahani, *Phys. Rev. B* **96**, 220101 (2017)
- [7] N. Dasenbrock-Gammon, E. Snider, R. McBride, H. Pasan, D. Durkee, N. Khalvashi-Sutter, S. Munasinghe, S.E. Dissanayake, K.V. Lawler, A. Salamat, R.P. Dias, *Nature* **615**, 244 (2023)

# ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И МИНИМАЛЬНЫЕ МОДЕЛИ ПЛОСКИХ И ГОФРИРОВАННЫХ CuO МОНОСЛОЕВ

**А.А. Слободчиков<sup>1\*</sup>, И.А. Некрасов<sup>1</sup>, Л.В. Бегунович<sup>2,3</sup>, И.А. Макаров<sup>3</sup>, М.М. Коршунов<sup>3</sup>, С.Г. Овчинников<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Институт электрофизики УрО РАН, 620016, Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Федеральный исследовательский центр КНЦ СО РАН, Академгородок, 660036, Красноярск, Россия

<sup>3</sup>Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия

\*e-mail: [slobodchikov@iep.uran.ru](mailto:slobodchikov@iep.uran.ru)

Оксиды меди стоят особняком среди прочих соединений переходных металлов. Прежде всего они привлекают большое внимание из-за их широкого прикладного применения – в высокотемпературной сверхпроводимости [1], в качестве нанесенных катализаторов [2], фотоэлементов [3].

Среди всех двумерных кристаллов монослои оксидов особенно интересны, потому как к степеням свободы, имеющимся в трехмерном материале (заряд, спин, решетка), добавляются квантовые ограничения. Следовательно, можно ожидать наличия широкого спектра разнообразных электронных и магнитных свойств с фундаментальной точки зрения и возможность их прикладного применения.

Мы изучили электронные свойства плоского и гофрированного монослоев CuO при помощи первопринципных расчетов, основанных на теории функционала плотности (DFT) в рамках обобщенного градиентного приближения (GGA) [4].

Электронная структура плоского монослоя CuO в целом похожа на массивный CuO с моноклинной кристаллической структурой или на типичные ВТСП на основе меди типа  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ . Гофрирование приводит к значительному сдвигу зон Cu- $3d_{xz,yz}$  на -0.7 эВ и снятию вырождения зоны Cu- $d_{x^2-y^2}$ . Кроме этого гофрированный монослой энергетически более выгоден и скорее будет образовываться в качестве верхнего слоя в образцах.

Изучая микронапряжения в кристаллической решетке был обнаружен топологический переход Лифшица: при увеличении параметра  $a$  на 0.7% в плоском mCuO и на 35% в гофрированном монослое. Интересно отметить возникновение возможных плоских зон в направлении G-X рядом с уровнем Ферми.

Сравнивая известные массивные системы оксидов меди и рассмотренные нами монослои, было установлено значительное разногласие в параметрах кристаллических решеток – на 11.5% (плоский) и 5.1% (гофрированный). Оказалось, что монослой, рассчитанный методом DFT на основе экспериментального массивного соединения с моноклинной кристаллической структурой, имеет щель на уровне Ферми без использования DFT+U или гибридных потенциалов.

Кроме того, мы предложили набор минимальных моделей для плоского и гофрированного монослоев CuO, рассчитанных с помощью функций Ванье. Простейшая модель, содержащая только Cu- $d_{x^2-y^2}$  состояния, хорошо описывает GGA зоны на уровне Ферми. Для одно- и трехзонных моделей мы приводим соответствующие матричные элементы гамильтонианов

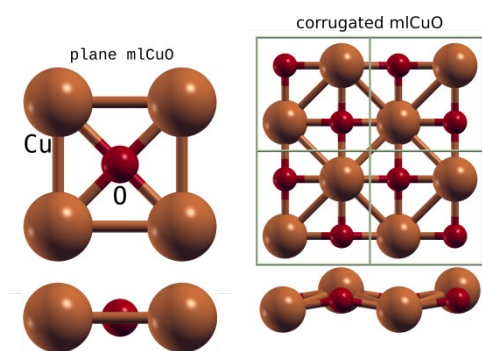


Рис 1. Кристаллическая структура плоского (слева) и гофрированного монослоев CuO (справа).

- [1] Ruiz E. et al., Phys. Rev. B **56**, 7189–96 (1997).
- [2] Reitz J.B. et al., J. Am. Chem. Soc. **120**, 11467–78 (1998).
- [3] Nakaoka K. et al., J. Electrochem. Soc. **151**, C661–5 (2004).
- [4] Slobodchikov, A.A.; Nekrasov, I.A.; Begunovich, L.V.; Makarov, I.A.; Korshunov, M.M.; Ovchinnikov, S.G. Electronic Structure and Minimal Models for Flat and Corrugated CuO Monolayers: An Ab Initio Study. Materials **2023**, 16, 658. <https://doi.org/10.3390/ma16020658>

# ЭФФЕКТ ГИГАНТСКОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ОКСИДЕ МЕДИ CuO

**Д.Ю. Федоров\*, А.В. Ушаков, И.В. Карпов**

Федеральный исследовательский центр Красноярский научный центр СО РАН, 660036,

Красноярск, Россия

\* e-mail: [1401-87@mail.ru](mailto:1401-87@mail.ru)

Материалы с высокой диэлектрической проницаемостью и низкими диэлектрическими потерями являются востребованными в микроэлектронике, позволяя миниатюризировать компоненты. Проблемой наиболее распространенного диэлектрика SiO<sub>2</sub> остается то, что уменьшение толщины слоев приводит к увеличению тока утечки вследствие туннелирования электронов. Явление высокого значения диэлектрической проницаемости ( $\epsilon' \sim 2 \times 10^4$ ) хорошо изучено для несегнетоэлектрических перовскитов  $ACu_3Ti_4O_{12}$ , где  $A = Ca, Sr, Cd, Bi_{2/3}$  [1]. Оно опосредовано наличием в данных керамических системах полупроводниковых зерен, разделенных изолирующими границами. Литературные данные, а также предшествующие исследования авторов обнаруживают схожее поведение  $\epsilon$  в оксиде меди CuO.

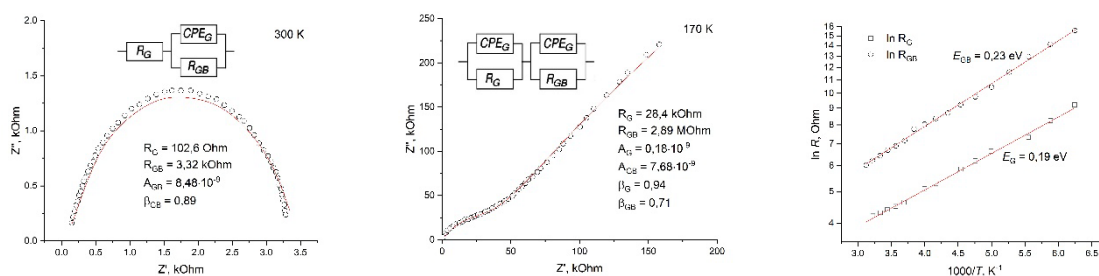


Рис 1. Импедансные спектры образцов оксида меди CuO, графики Аррениуса  $R_G$  и  $R_{GB}$ .

На рис. 1 показаны графики комплексного импеданса  $|Z| = Z' - jZ''$  керамики CuO при двух различных температурах 300 и 170 K с соответствующими эквивалентными схемами, включающими емкостной и резистивный вклад от зерен (G) и границ зерен (GB). В рассмотренном частотном диапазоне (0,1-1 МГц) при 300 K виден только отклик GB. При понижении температуры (170 K) сопротивления G и GB становятся выше, и в области высоких частот хорошо видна часть полуокружности от G, а на более низких частотах, просматривается отклик от границ зерен. Такая конфигурация спектров связана с тем, что время релаксации границ зерен значительно превышает время релаксации зерна.

Для аппроксимации экспериментальных спектров использовано уравнение Коул-Коула  $|Z| = R / (1 + AR(j\omega)^\beta)$  хорошо описывающее импеданс поликристаллического CuO.  $R_G$  и  $R_{GB}$ , полученные из подгонки графиков  $|Z|$  подчиняются закону Аррениуса, а границы зерен более резистивны, чем зерна.

Таким образом, как показывают исследования импедансной спектроскопии, на гигантское значение диэлектрической проницаемости оказывает влияние наличие электрически неоднородной микроструктуры как внутри каждого зерна CuO, окруженного изолирующими зернограницными областями, так и на самих границах зерен. Это могут быть дефекты, кислородные вакансии, присутствие незначительного количества  $Cu^{3+}$ , формирующих барьеры Шоттки благодаря области пространственного заряда на границах. Предполагается, что такая комбинация областей зерен и границ ведет себя как емкостные элементы барьерного слоя внутри керамики оксида меди.

Работа выполнена в рамках госзадания ES-2021-0026.

[1] O.Z. Yanchevskii, O.I. V'yunov, A.G. Belous, et.al. J of Alloys and Compounds 874, 159861 (2021).



## ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ДИБОРИДА МАГНИЯ С ЛЕГИРУЮЩИМИ ДОБАВКАМИ С ПОМОЩЬЮ ПАКЕТА QUANTUM ESPRESSO

**К.К. Дихтievская<sup>1,2</sup>, П.В. Коновалов<sup>1</sup>, А.С. Цаплева<sup>1</sup>, А.И. Карцев<sup>2,3</sup>, И.М. Абдюханов<sup>1</sup>**  
<sup>1</sup>АО «ВНИИНМ», 123098

<sup>2</sup>НИТУ МИСИС, лаборатория функциональных квантовых материалов, 119049, Москва

<sup>3</sup>Вычислительный центр Дальневосточного отделения Российской академии наук (ВЦ ДВО РАН), Россия, г. Хабаровск, ул. Ким Ю Чена, д. 65.

e-mail: [erbium68.167@gmail.com](mailto:erbium68.167@gmail.com)

Высокая критическая температура перехода ( $T_c$ ) 39 К в дибориде магния была обнаружена группой Акимицу в 2001 году [1]. С тех пор сверхпроводники на основе диборида магния нашли широкое применение в промышленности, включая устройства магнитно-резонансной томографии, гибридные водородные магистрали, элементы устройств физики высоких энергий и др.

Сверхпроводимость  $MgB_2$  обусловлена механизмом электрон-фононного взаимодействия, выходящим за рамки классической теории Бардина–Купера–Шриффера. Также принято считать, что в  $MgB_2$  впервые реализуется давно предсказанная теоретически, но ранее экспериментально не наблюдавшаяся двухщелевая сверхпроводимость. В рамках модели двухщелевой сверхпроводимости  $MgB_2$  постулируется существование двух различных s-волновых сверхпроводящих щелей (большой  $\Delta\sigma$  и малой  $\Delta\pi$ ), связанных с  $\sigma$ - и  $\pi$ -секциями поверхности Ферми [2]. Любые нарушения структуры диборида магния должны приводить к изменению свойств этого сверхпроводника в нормальном и сверхпроводящем состояниях.

Согласно существующим представлениям, соединение  $MgB_2$  обладает относительно высокой критической температурой благодаря сильному электрон-фононному взаимодействию. Очевидно, что любые нарушения идеальной кристаллической структуры диборида магния должны приводить к изменению свойств данного соединения в нормальном и сверхпроводящем состояниях. А технологически, чтобы получить сверхпроводящие системы на основе  $MgB_2$  с улучшенными критическими параметрами применяют легирование. Для диборида магния эффективными легирующими элементами могут быть редкоземельные металлы, которые внедряются в кристаллическую решётку и из-за большой разницы в размерах с атомами решётки диборида магния (для диспрозия порядка 6 раз) искажают её. В случае легирования элементами со схожим атомным размером (углерод, кремний) происходит процесс замещения атомов. Даже при относительно слабом внешнем воздействии на структуру  $MgB_2$  путем изотермического отжига при умеренно высокой температуре ( $\sim 900$  °С) происходит заметное изменение значений критической температуры, электропроводности и параметров кристаллической решетки [3]. Данные эффекты изменения критических характеристик имеют сложную микроскопическую природу. Для понимания и изучения механизмов возникновения данных эффектов было проведено первопринципное исследование влияния легирующих элементов на электрон-фонное взаимодействие в данном соединении.

В настоящей работе проводятся исследования по влиянию легирующих элементов на структуру и критические свойства  $MgB_2$  с целью повышения сверхпроводящих характеристик. Первопринципные расчеты проводились в рамках теории функционала плотности, используя первопринципный пакет Quantum Espresso [4]. Был проведен расчет

равновесных позиций атомов, параметров решётки, расчёт электронной структуры, включая зонную структуру и плотности состояний чистой и легированных систем.

Константа электрон-фононного взаимодействия и фононная дисперсия рассчитывались методом, основанным на теории возмущений функционала плотности (DFPT) [6] и уравнениях Элиашберга [7].

В дальнейшем планируется сравнение расчётных значений с фактическим для определения возможности дальнейшего применения расчётной модели для предсказания свойств сверхпроводников на основе  $\text{MgB}_2$ .

- [1] J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, J. Akimitsu. Superconductivity at 39 K in magnesium diboride. – 2001. – Nature 410, 63
- [2] S. Soltania et al. Effect of nano-carbon particle doping on the flux pinning properties of  $\text{MgB}_2$  superconductor. – 2003. – Physica – т.390 – в.3 – с.185-190.
- [3] M. Vignolo, G. Bovone, C. Bernini et al. High temperature heat treatment on boron precursor and PIT process optimization to improve the  $J_c$  performance of  $\text{MgB}_2$ -based conductors. – 2013. – Supercond. Sci. Technol. – т.26.
- [4] Paolo Giannozzi, Stefano Baroni, Nicola Bonini, Matteo Calandra, Roberto Car6, Carlo Cavazzoni, Davide Ceresoli, Guido L Chiarotti, Matteo Cococcioni, Ismaila Dabo. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. – 2009. – IOP Publishing Ltd Journal of Physics: Condensed Matter – Volume 21 – Number 39.
- [5] Erik Johansson, Ferenc Tasnádi, Annap Ektarawong, Johanna Rosen, and Björn Alling. The effect of strain and pressure on the electron-phonon coupling and superconductivity in  $\text{MgB}_2$ — Benchmark of theoretical methodologies and outlook for nanostructure design. – 2023. – J. Appl. Phys. 131.
- [6] V. Romaka, T. Prikhna, M. Eisterer, A. P. Shapovalov, W. Goldacker4, V. E. Moshchil, A. Kozyrev, M. Rindfleisch, M. Tompsic, E. E. Hellstrom. Structure and properties of  $\text{MgB}_2$  bulks: ab-initio simulations compared to experiment. – 2020. – Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 756.
- [7] H.J. Choi, S.G. Louie and M.L. Cohen, Anisotropic Eliashberg theory for superconductivity in compressed and doped  $\text{MgB}_2$ . – 2019. – Phys. Rev B 79.

## ТОПОЛОГИЧЕСКАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ: ОТ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ПРЕДСКАЗАНИЙ К ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ

**А.О. Злотников**

*Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия*

e-mail: [zlotn@iph.krasn.ru](mailto:zlotn@iph.krasn.ru)

В докладе будет дан обзор современных результатов, как теоретических, так и экспериментальных, по формированию топологической сверхпроводимости в твердотельных системах. К таким системам относятся различные структуры, состоящие из сверхпроводящего (не топологического) материала, с нанесенными на его поверхность квази-одномерными полупроводниковыми нанопроволоками [1], спиновыми цепочками с магнитными адатомами [2], магнитными монослоями [3], либо приведенного в контакт с топологическим изолятором [4]. Будет рассмотрен сверхпроводник на основе железа  $\text{FeTe}_{0.55}\text{Se}_{0.45}$  [5], в котором топологическая сверхпроводимость индуцируется за счет внутренних взаимодействий.

В большинстве топологических сверхпроводников формируются особые связанные состояния, обладающие нулевой энергией возбуждения и содержащие пространственно разделенные майорановские моды. Майорановские моды локализуются на концах 1D-, границах 2D- и 3D-систем, в том числе в углах и на ребрах в случае 2D и 3D топологических сверхпроводников высокого порядка, а также на топологических дефектах, таких как вихри Абрикосова, различные магнитные неоднородности и др. (см., например, обзорные статьи [6, 7] и [8]). Различные примеры реализации майорановских мод, а также попытки их экспериментального обнаружения, будут обсуждены в докладе. Будут отмечены отличия майорановских связанных состояний от «классических» связанных состояний в сверхпроводниках, таких как андреевские состояния, состояния Кароли-де Жена-Матрикона и Ю-Шиба-Русинова, а также рассмотрено их взаимное влияние в топологических сверхпроводниках.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 22-22-20076 и Красноярским краевым фондом науки.

- [1] J. Shen, G.W. Winkler, F. Borsoi, S. Heedt, V. Levajac, J.-Y. Wang, D. van Driel, D. Bouman, S. Gazibegovic, R.L.M. Op Het Veld, D. Car, J.A. Logan, M. Pendharkar, C.J. Palmstrøm, E.P.A.M. Bakkers, L.P. Kouwenhoven, B. van Heck, Phys. Rev. B **104**, 045422 (2021)
- [2] H. Kim, A. Palacio-Morales, T. Posske, L. Rózsa, K. Palotás, L. Szunyogh, M. Thorwart, and R. Wiesendanger, Science Advances **4**, eaar5251 (2018)
- [3] A. Palacio-Morales, E. Mascot, S. Cocklin, H. Kim, S. Rachel, D. K. Morr, and R. Wiesendanger, Science Advances **5**, eaav6600 (2019)
- [4] S. Ding, C. Chen, Z. Cao, D. Wang, Y. Pan, R. Tao, D. Zhao, Y. Hu, T. Jiang, Y. Yan, Z. Shi, X. Wan, D. Feng, T. Zhang, Science Advances **8**, eabq4578 (2022)
- [5] S. Zhu, L. Kong, L. Cao, H. Chen, M. Papaj, S. Du, Y. Xing, W. Liu, D. Wang, C. Shen, F. Yang, J. Schneeloch, R. Zhong, G. Gu, L. Fu, Y.-Y. Zhang, H. Ding, H.-J. Gao, Science **367**, 189 (2020)
- [6] A. O. Zlotnikov, M. S. Shustin, and A. D. Fedoseev, J Supercond Nov Magn **34**, 3053 (2021)
- [7] V. V. Val'kov, M. S. Shustin, S. V. Aksenov, A. O. Zlotnikov, A. D. Fedoseev, V. A. Mitskan, and M. Y. Kagan, Phys.-Usp. **65**, 2 (2022)
- [8] A. O. Zlotnikov, Phys. Rev. B **107**, 144513 (2023)

## СТРУКТУРА МАЙОРАНОВСКИХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В ЗОНЕ ФЛУКТУАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ ЦЕПочки КИТАЕВА

**М.С. Шустин<sup>1\*</sup>**<sup>1</sup>Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия\*e-mail: [mshustin@yandex.ru](mailto:mshustin@yandex.ru)

В последние годы активно исследуются квазиодномерные гибридные структуры типа Al-EuS-InAs содержащие полупроводниковую нанопроволоку InAs с напыленными на неё тонкими слоями сверхпроводника (Al) и ферромагнетика (EuS), которые индуцируют в системе наведенную сверхпроводимость со спин-поляризованными носителями заряда [1]. Более того, в условиях низкой концентрации носителей в системе могут развиваться сильные электронные корреляции [2]. Предполагается, что в главном приближении такая система может быть описана в рамках модели цепочки Китаева [3] с межузельным отталкиванием между фермионами на соседних узлах. Такая система является топологическим сверхпроводником, принадлежит к BDI классу симметрии Алтланда-Цирнбауэра [4] и может содержать майорановские моды (ММ) на краях цепочки. Однако, вопрос о структуре ММ в условиях развития сильных электронных корреляций остается открытым.

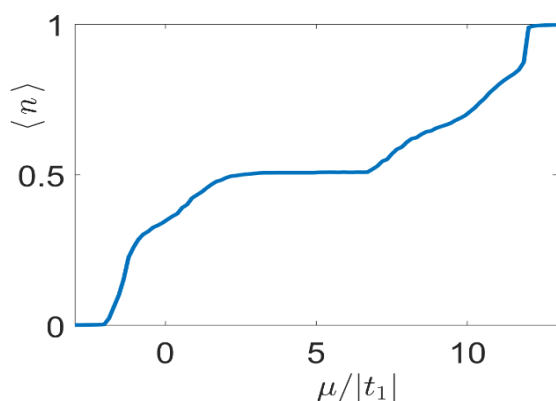


Рис 1. DMRG расчеты зависимости концентрации фермионов от химического потенциала в цепочке Китаева с сильным кулоновским межузельным отталкиванием фермионов. Расщепление затравочной зоны фермионов с образованием двух подзон свидетельствует о реализации в системе зоны флуктуационных состояний.

В настоящей работе исследуется структура майорановских возбуждений в рамках модели цепочки Китаева с сильным межузельным отталкиванием между фермионами. Анализ проводится при совместном использовании аналитических и численных методов. Так, структура майорановских возбуждений определяется в рамках метода уравнений движения для неприводимых функций Грина с использованием проекционной техники Цванцига-Мори [5]. Последняя позволяет спроецировать динамику ансамбля сильно коррелированных фермионов на базисный набор операторов, определяющих её основные спектральные свойства. При этом корреляционные функции, возникающие в таком подходе, вычисляются с использованием численного метода

ренорм-группы для матрицы плотности (DMRG) [6]. Такой гибридный подход позволил описать особенности конкуренции зарядовых флуктуаций и топологического порядка при реализации в системе т.н. зон флуктуационных состояний, см. Рис. 1 [7].

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ, проект МК-4687.2022.1.2, а также фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС», проект #23-1-3-52-1.

- [1] S. Vaitiekėnas, Y. Liu, P. Krogstrup, C. M. Marcus, Nature Physics **17**, 43–47 (2020).
- [2] Y. Sato et.al, Phys. Rev. B **99**, 155304 (2019).
- [3] A. Y. Kitaev, Phys.-Usp. **44**, 131 (2001).
- [4] A. Altland, M.R. Zirnbauer, Phys. Rev. B **55**, 1142 (1997).
- [5] H.Mori, Prog. Theor. Phys. **33**, 423 (1965).
- [6] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).
- [7] В. В.Вальков, М. М. Коровушкин, ЖЭТФ **139**, 126 (2011).

# ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ФАЗЫ С МНОЖЕСТВОМ МАЙОРАНОВСКИХ МОД В СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ НАНОПРОВОЛОКЕ ПРИ УЧЕТЕ ДАЛЬНИХ ПЕРЕСКОКОВ И СПАРИВАНИЙ

**А. Гамов<sup>1,2\*</sup>, А.О. Злотников<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия

<sup>2</sup>Сибирский федеральный университет, 660041, Красноярск, Россия

\*e-mail: [agamow96@gmail.com](mailto:agamow96@gmail.com)

В последнее время представляет интерес описание топологических фаз с множеством краевых майорановских мод, которые могут формироваться в сверхпроводящих нанопроволоках при учете взаимодействий [1, 2], цепочках с магнитными атомами [3] и под действием управляющих внешних полей периодических во времени [4].

В данной работе для модели полупроводниковой нанопроволоки с наведенной сверхпроводимостью и спин-орбитальной связью, помещенной в магнитное поле, определены топологические фазовые диаграммы при учете перескоков, в том числе с переворотом спина, и спариваний в первой и второй координационных сферах (КФ). Показано, что учет процессов во второй КФ приводит к возникновению новых нетривиальных фаз со значением топологического индекса  $N_{BDI} = 3$  и  $N_{BDI} = 4$  (см. Рис. 1 А)). Считается, что все параметры в пределах одной КФ равны и обозначаются  $\lambda_i$ , где  $i$  – номер КФ. Зависимость топологического индекса от отношения  $\lambda_2/\lambda_1$  приведено на Рис. 1 Б). Видно, что с ростом этого отношения реализуется серия квантовых топологических переходов. Проверено, что в нанопроволоке с открытыми граничными условиями число пар краевых майорановских мод соответствует значению  $N_{BDI}$ .

Доказано, что различные фазы на топологической фазовой диаграмме могут быть также характеризованы числом заполненных, обладающих отрицательной энергией однофермионных состояний (см. [5], [6]) в особых точках зоны Бриллюэна при учете дальних перескоков и спариваний. В данных точках либо сверхпроводящий параметр порядка, либо интеграл спин-орбитальной связи, зависящие от квазиимпульса, обращаются в нуль. Соответственно, на границах между различными фазами часть энергий однофермионных состояний меняет знак, проходя через 0. Показано, что фермионная четность (ФЧ) основного состояния замкнутой нанопроволоки в топологических фазах определяется четностью числа заполненных однофермионных состояний. Таким образом, при переходах со сменой ФЧ зануляется нечетное число энергий однофермионных состояний. На Рис. 1 А) желтым цветом отмечены области с нечетной ФЧ, бирюзовым – области с четной ФЧ.

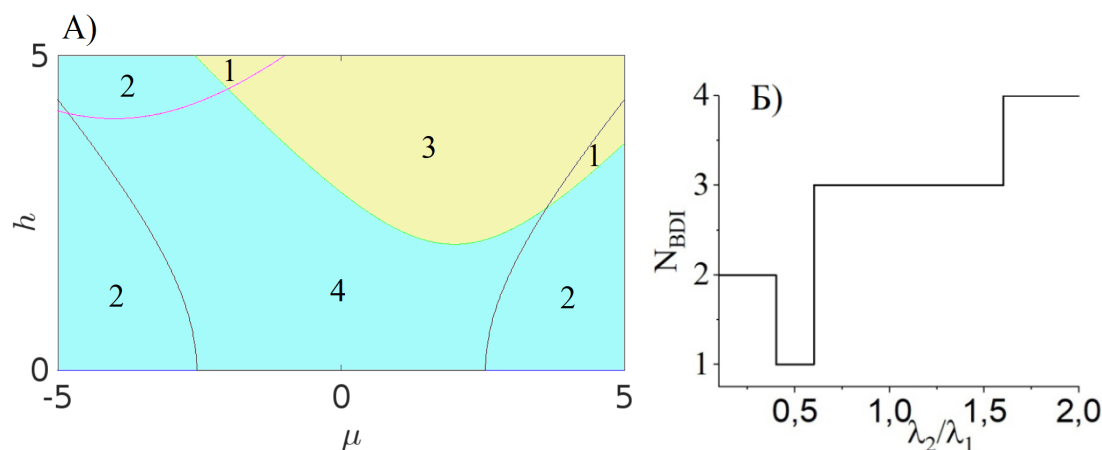


Рис. 1. А) – Топологическая фазовая диаграмма в переменных химпотенциал  $\mu$  – зеемановское

расщепление  $\hbar$  для амплитуды  $\lambda_2=2$  (все в единицах  $\lambda_1$ ); Б) – серия топологических переходов с изменением индекса  $N_{\text{BDI}}$  при увеличении отношения  $\lambda_2/\lambda_1$  для  $\hbar = 1.5$ ,  $\mu = 0$

Исследование выполнено при финансовой поддержке фонда развития теоретической физики и математики «Базис».

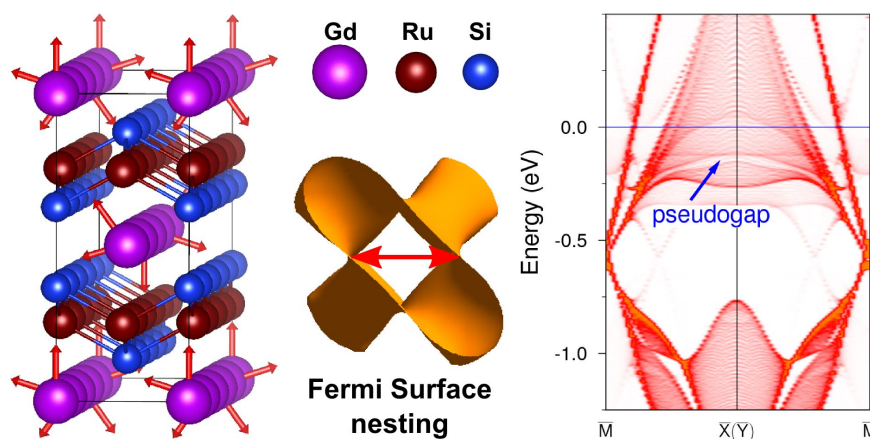
- [1] Y. Niu, S. B. Chung, C. - H. Hsu, I. Mandal, S. Raghu, S. Chakravarty, Phys. Rev. B **85**, 035110 (2012)
- [2] S. V. Aksenov, A. O. Zlotnikov, M. S. Shustin, Phys. Rev. B **101**, 125431 (2020)
- [3] A. A. Bespalov, Phys. Rev. B **106**, 134503 (2022)
- [4] H. Wu, S. Wu, L. Zhou, arXiv:2303.04674 (2023)
- [5] В. В. Вальков, В. А. Мицкан, М. С. Шустин, ЖЭТФ. Т **156**, 507 (2019)
- [6] В. В. Вальков, М. С. Шустин, С. В. Аксенов, А. О. Злотников, А. Д. Федосеев, В. А. Мицкан, М. Ю. Каган, УФН. Т **192**, 3 (2022)



## ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА СПИРАЛЬНОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА $\text{GdRu}_2\text{Si}_2$

**С.В. Еремеев, Д. Глазкова, Г. Пёльхен, А. Крайкер, К. Али, А.В. Тарасов, С. Шульц, К. Климт, Е.В. Чулков, В.С. Столяров, А. Эрнст, К. Креллнер, Д.Ю. Усачев, Д.В. Вялых**

Центросимметричный антиферромагнетик  $\text{GdRu}_2\text{Si}_2$  ( $T_N \sim 46$  К) (Рис.1), кристаллизующийся в структуре с симметрией  $I4/mmm$ , хорошо известен с начала 1980-х годов. В последнее время он снова вернулся в центр исследований с открытием квадратной магнитной скирмионной решетки [1]. Эта скирмионная фаза появляется во внешнем магнитном поле 2–2,5 Тл при температурах ниже 20 К. Данная скирмионная фаза имеет наименьший из найденных до сих пор размер скирмиона, 1.9 нм, что делает ее привлекательной для разработки устройств магнитной памяти следующего поколения с высокой плотностью и малой мощностью. В этой работе мы исследовали объемную и поверхностную электронную структуру  $\text{GdRu}_2\text{Si}_2$  с использованием фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) и расчетов в рамках теории функционала плотности (DFT) [2]. Мы показываем, как меняется электронная структура во время антиферромагнитного перехода, когда устанавливается спиральный порядок  $4f$  магнитных моментов в слоях Gd. Хорошее совпадение электронной структуры, полученной с помощью ARPES, с результатами DFT расчетов, позволило нам идентифицировать объемные состояния, характерные для спирального АФМ порядка. А именно, мы обнаружили псевдощель в состояниях объемного континуума, близких к уровню Ферми, которая видна как спектральная серповидная особенность в ARPES (Рис.1). Достаточно хорошее совпадение экспериментальных и теоретических результатов позволило нам детально охарактеризовать свойства и орбитальный состав поверхности Ферми  $\text{GdRu}_2\text{Si}_2$ .



Мы идентифицировали лист поверхности Ферми, обеспечивающий нестинг зон с сильной примесью  $5d$ -состояний Gd. Мы показываем, что растяжение или сжатие кристаллической решетки в плоскости  $ab$  существенно влияет на вектор нестинга и, следовательно, изменяет период магнитной спирали в спиновом канале Gd  $4f$ . Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что RKKY взаимодействие является наиболее вероятным механизмом, определяющим спиральный магнитный порядок в  $\text{GdRu}_2\text{Si}_2$  и является ответственным за появление скирмионов в этом материале. Наши результаты обеспечивают более глубокое понимание электронных и магнитных свойств этого материала, что имеет решающее значение для прогнозирования и разработки новых скирмионных систем.



Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, проект FWRW-2022-0001.

- [1] N. D. Khanh, T. Nakajima, X. Yu, S. Gao, K. Shibata, M. Hirschberger, Y. Yamasaki, H. Sagayama, H. Nakao, L. Peng, K. Nakajima, T. Takagi, R. Arima, Y. Tokura and S. Seki, Nanometric square skyrmion lattice in a centrosymmetric tetragonal magnet, *Nature Nanotechnology*, 15, 444–449 (2020).
- [2] S. V. Eremeev, D. Glazkova, G. Poelchen, A. Kraiker, K. Ali, A. V. Tarasov, S. Schulz, K. Kliemt, E.V. Chulkov, V. S. Stolyarov, A. Ernst, C. Krellner, D.Yu. Usachov, D.V. Vyalikh, Insight into the electronic structure of the centrosymmetric skyrmion magnet  $\text{GdRu}_2\text{Si}_2$ , arXiv preprint — arXiv: 2306.01370 (2023).

# АНАЛИТИЧЕСКИЕ ПРОФИЛИ ДВУМЕРНЫХ СКЕРМИОНОВ СЛОЖНОЙ МОРФОЛОГИИ

М.С. Шустин<sup>1\*</sup>, Е.О. Енькова<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия

<sup>2</sup>Сибирский федеральный университет, 660041, Красноярск, Россия

\*e-mail: [mshustin@yandex.ru](mailto:mshustin@yandex.ru)

Магнитные скирмионы (МС) представляют собой нетривиальные конфигурации намагниченности, для которых может быть введено понятие топологического заряда  $Q$ . При этом, если рассматривать МС как непрерывные текстуры, то конфигурации с различными  $Q$  не могут перейти друг в друга без преодоления существенного энергетического барьера [1]. Сочетание микроскопических размеров и устойчивости позволяет рассматривать МС как перспективные элементы для создания устройств магнитной записи нового поколения [2].

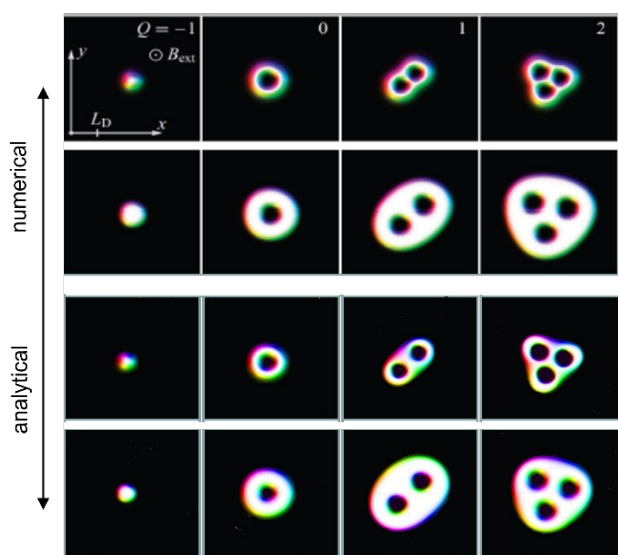


Рис 1. Пространственные профили скирмиона ( $Q=-1$ ), скирмионума ( $Q=0$ ), а также скирмионных мешков с  $Q=1,2$ . Верхние две строки – профили, полученные в работе [3] путем численного моделирования; нижние две строки – профили, построенные по аналитическим формулам. Черный цвет соответствует  $m_z=1$ , белый цвет –  $m_z = -1$ .

В течение последнего десятилетия наиболее активно исследовались МС с  $Q=-1$ . Это связано с тем, что стабилизирующее взаимодействие Дзялошинского-Мории не дает вклад в энергию аксиально-симметричных МС с  $|Q|>1$ . Однако, недавно были численно предсказаны [3] и открыты экспериментально [4] МС с  $|Q|>1$ , для которых формирование топологического заряда связано с морфологическими особенностями магнитных возбуждений. Такие структуры получили название скирмионных мешков [3].

В настоящей работе проводится построение аналитических профилей магнитных скирмионов с произвольными значениями топологических зарядов, в т.ч. скирмионума и скирмионных мешков, см. Рис. 1. В качестве основы построения используется двухпараметрический анзац магнитного скирмиона с  $|Q| = 1$ , который был апробирован экспериментально [5]. Далее, такой анзац был обобщен на случай

текстур с различными  $Q$ . Предложенная параметризация позволит в дальнейшем исследовать различные свойства скирмионных мешков, такие как их динамику, квантовые эффекты, а также возможность локализации на них майорановских возбуждений [6].

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ, проект МК-4687.2022.1.2. ШМС выражает благодарность фонду развития теоретической физики и математики «БАЗИС»

- [1] C. Moreau-Luchaire, C. Moutafis, N. Reyren et al. *Nature Nanotechnology*, **11**, 444 (2016).
- [2] G. Yu, P. Upadhyaya, Q. Shao et al. *Nano Letters*, **17**, 1, 261 (2017).
- [3] F. N. Rybakov, N. S. Kiselev. *Phys. Rev. B*, **99**, 064437 (2019).
- [4] J. Tang, Y. Wu, W. Wang et al., *Nature Nanotechnology* **16**, 1086–1091 (2021).
- [5] X. Wang, H. Yuan, and M. X. Wang, *Communications Physics* **1**, 1 (2018).
- [6] A. O. Zlotnikov, M. Shustin, and A. D. Fedoseev, *J. Sup. Nov. Magn.* **34**, 3053–3088 (2021).

## ЭФФЕКТЫ СТАРЕНИЯ В СПИН-ВЕНТИЛЬНЫХ СТРУКТУРАХ

М.А. Шляхтич<sup>1,2\*</sup>, П.В. Прудников<sup>2,3</sup>, А.С. Егорина<sup>2</sup><sup>1</sup> Сибирский федеральный университет, 660041, Красноярск, Россия<sup>2</sup> Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644077, Омск, Россия<sup>3</sup> Центр новых химических технологий ИК СО РАН, 644040, Омск, Россия

\*e-mail: mshlyakhtich@sfu-kras.ru

Спиновые вентили состоят из магнитных металлов (Fe, Co, Ni), разделенных немагнитной прослойкой. Направление намагниченности одной из ферромагнитных пленок фиксируется за счет прочной связи со слоем антиферромагнитного металла (IrMn, FeMn, FeO) в отличие от многослойных структур. Структура спинового вентиля в основном представлена как NiFe/NM/FM/FeMn, где одной из ферромагнитных пленок является сплав NiFe – пермаллой. Преимуществом спиновых вентилях является их высокая чувствительность к внешнему магнитному полю. Для сравнения, поля насыщения при комнатной температуре в многослойных структурах составляют 100 - 2000 Э, а в спиновых вентилях 5 - 50 Э. Это делает их наиболее выгодными для практического применения [1].

Одним из основных свойств спиновых вентилях является наличие магнитной анизотропии. Магнитная анизотропия возникает в результате нарушения симметрии на границах между ферромагнитными и немагнитными металлами и появления напряжений из-за несоответствия параметров кристаллической решетки. Магнитная анизотропия является одним из доминирующих факторов, влияющих на поведение и свойства магнитных материалов [2]. Нарушение симметрии на границах всегда присутствует при росте кристалла из-за влияния различных внешних и внутренних факторов. Отсюда возникает зависимость свойств ферромагнетика от направления вектора намагниченности. Таким образом, используя различные материалы, можно создавать наноструктуры из нескольких слоев. Магнитные моменты этих слоев будут направлены параллельно или перпендикулярно поверхности пленки. Для описания свойств таких структур удобно использовать анизотропную модель Гейзенберга [3], относящуюся к статистическим спиновым моделям с медленной динамикой. Гамильтониан анизотропной модели Гейзенберга:

$$H = -J \sum_{i,j} \{ [1 - \Delta(N)](S_{xi}S_{xj} + S_{yi}S_{yj}) + S_{zi}S_{zj} \} - h \sum_i S_{iz}, \quad (1)$$

где  $S_i = (S_{xi}, S_{yi}, S_{zi})$  – трехмерный единичный вектор в узле  $i$ ,  $J > 0$  характеризует обменное взаимодействие ближайших спинов, носящее ферромагнитный характер,  $\Delta(N)$  – параметр анизотропии. Значение  $\Delta = 0$  соответствует изотропной модели Гейзенберга, а  $\Delta = 1$  – модели Изинга. Периодические граничные условия накладывались в плоскости образца. Моделирование проводилось для систем с линейным размером  $L=32$  и числом слоев  $N$ .

Статистические системы с медленной динамикой в последнее время вызывают значительный теоретический и экспериментальный интерес в связи с большим числом явлений наблюдаемых в них: сильное замедление релаксационных процессов, эффекты памяти, эффекты старения и др. [4]. После возмущения система с медленной динамикой обычно не достигает равновесия даже по прошествии длительного времени, и ее динамика не инвариантна ни по отношению к сдвигам времени, ни к обращению времени, как это должно быть в тепловом равновесии. Во время этой нескончаемой релаксации происходит старение: двукратные величины, такие как отклик и корреляционные функции, зависят от двух времен: времени ожидания  $t_w$  и времени наблюдения  $t > t_w$ , и их релаксация происходит медленнее для больших  $t_w$ . Это явление называется старением.

Была исследована временная релаксация намагниченности  $m(t)$  из низкотемпературного ( $m_0 = 1$ ) начального состояния. Для исследования эффектов старения рассчитана двухвременная автокорреляционная функция. Обнаружены эффекты старения для неравновесного режима  $(t - t_w) \gg t_w$ . Были получены временные зависимости

автокорреляционной функции  
 $t_w = 10, 20, 30, 40, 60, 80, 100$  MCS/s.

$$C(t, t_w) = \left\langle \frac{1}{N_s} \sum_i \vec{S}_i(t) \vec{S}_i(t_w) \right\rangle - m(t) \cdot m(t_w) \quad \text{для}$$

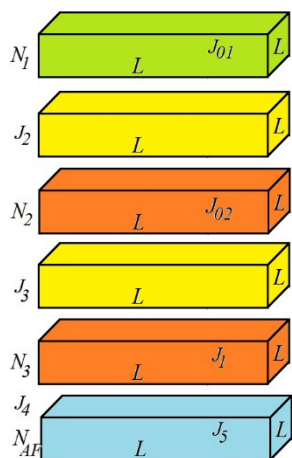


Рис 1. Модель сложного спинового вентиля.  $L$ ,  $N_1$ ,  $N_2$ ,  $N_3$ ,  $N_{AF}$  – линейные размеры.  $J_{01} > 0$ ,  $J_1 > 0$ ,  $J_2 > 0$ ,  $J_3 < 0$ ,  $J_4 < 0$ ,  $J_5 < 0$  – константы обменного взаимодействия.

Эффективная константа анизотропии  $\Delta(N)$  [5,6] в зависимости от толщины пленки  $N$  была выбрана из экспериментальных исследований температуры Кюри  $T_C$  для тонких пленок Ni(111)/W(110) [7] различной толщины пленки Ni. Мы рассмотрели систему размером  $N_s = L \times L \times N$ . Исследуемые структуры, изображенные на Рис.1, были с  $N_1 = 3$  МС,  $N_2 = 3$  МС,  $N_3 = 3$  МС (рис. 1). Обменный интеграл  $J_1$ , определяющий взаимодействие между соседними спинами. Этот обменный интеграл принимается равным  $J_1/kT = 1$ . Другой обменный интеграл между соседними спинами и междослоевым взаимодействием:  $J_{01} = 0,75J_1$ ,  $J_{02} = 0,4J_1$ ,  $J_2 = 0,01J_1$ ,  $J_3 = -3,0J_1$ ,  $J_4 = J_5 = -2,0J_1$ .

- [1] E.V. Drovorub, V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, Bulletin of the RAS: Physics. **86**(2), 109 (2022)
- [2] A.V. Ognev, A.S. Samardak, Vestnik of FEB of RAS. **4**, 70 (2006)
- [3] K. Binder, D.P. Landau, Phys. Rev. B **13**, 1140 (1976)
- [4] J.P. Bouchaud, E. Vincent, J. Hammann, M. Ocio, L.F Cugliandolo, Lect. Notes Phys. **492**, 184 (1997)
- [5] P.V. Prudnikov, V.V. Prundikov, M.A. Medvedeva, JETP Lett. **100**, 501 (2014)
- [6] P.V. Prudnikov, M.A. Menshikova et al., J. Magn. Magn. Mater. **387**, 77 (2015)
- [7] Y. Li, K. Baberschke, Phys. Rev. Lett. **68**, 1208 (1992)

## ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЁТЫ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ОДНООСНОГО КИРАЛЬНОГО ГЕЛИМАГНЕТИКА

**Д.В. Евсин<sup>1\*</sup>, П.В. Прудников<sup>1,2</sup>, М.В. Мамонова<sup>1</sup>, В.О. Борзилов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, 644077, пр-кт Мира, 55а, Омск, Россия

<sup>2</sup>Центр новых химических технологий ИК СО РАН, 644040, ул. Нефтезаводская 54, Омск, Россия

\*e-mail: [evsindv@stud.omsu.ru](mailto:evsindv@stud.omsu.ru)

Магнитные кристаллы со слоистой структурой, в которых наблюдается периодическое киральное гелимагнитное упорядочение, интересны в качестве материалов для устройств спинтроники [1]. К таким структурам относится гелимагнетик  $\text{CrNb}_3\text{S}_6$ , обладающий кристаллографической киральностью и одноосным взаимодействием Дзялошинского-Мория [2]. Экспериментальные исследования показали зависимость периода кирального гелимагнетика от внешнего магнитного поля при постоянной температуре, а именно переход к состоянию киральной солитонной решётки в тонких сколах [3].

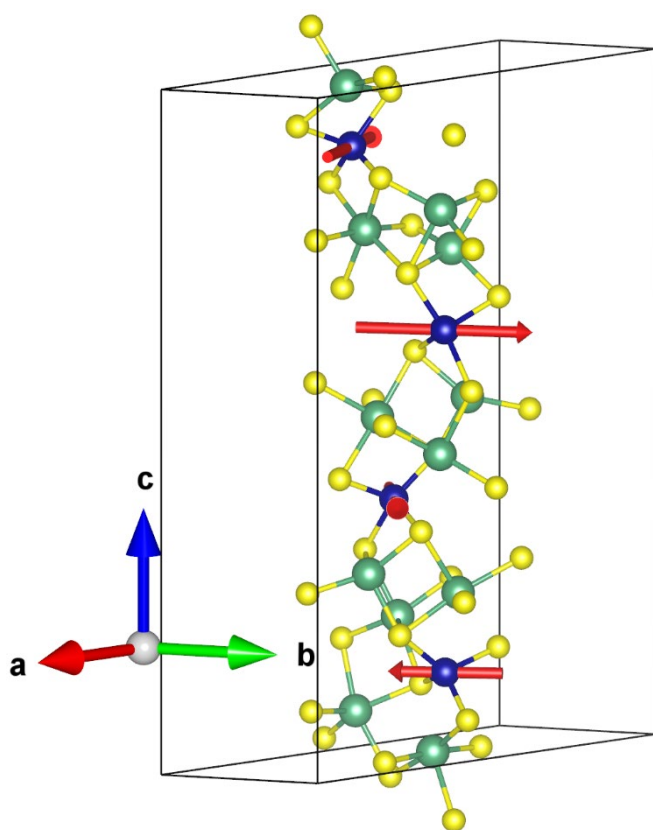


Рис. 1. Структура суперъчейки плёнки одноосного кирального гелимагнетика  $\text{CrNb}_3\text{S}_6$ . Синим цветом обозначены атомы хрома, зелёным – ниобия, жёлтым – серы. Красными стрелками указаны направления намагниченностей атомов хрома.

В данной работе исследуются магнитные свойства одноосного кирального гелимагнетика  $\text{CrNb}_3\text{S}_6$  путём первопринципных расчётов с применением программно-пакетного комплекса VASP [4]. Кристаллическая структура исследуемой системы представлена на Рис. 1. В расчётах использовалась 40-атомная суперъчейка плёнки с постоянной решетки  $a = 24.202 \text{ \AA}$  [5]. Количество k-точек сетки Монкхорста-Пака принималось равным  $1 \times 4 \times 4$ . Величина энергии обрезания устанавливалась равной 500 эВ. Для распространённой вдоль оси C суперъчейки вектор распространения спиновой спирали задавался  $q = 0.25a$  по направлению вдоль оси C. В ходе расчётов были получены значения проекций магнитных моментов атомов хрома. Также было получено значение полной энергии системы  $E_{\text{tot}} = -285.47803 \text{ эВ}$ .

Исследования проведены с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием «Центр обработки и хранения научных данных ДВО РАН», финансируемого Минобрнауки России по соглашению No 075-15-2021-663.

- [1] Y. Togawa, Y. Kousaka, K. Inoue, K. Kishine, J. Phys. Soc. Jpn **85**, 112001 (2016)
- [2] D. Song, et al., Phys. Rev. B **102**, 64432 (2020)
- [3] Y. Togawa, et al., Phys. Rev. L **122**, 017204 (2019)
- [4] G. Kresse, M. Marsman, J. Furthmuller, VASP the GUIDE, Wien: Universitat Wien, (2016)
- [5] Y. Ghimire, et al., Phys. Rev. B **87**, 104403 (2013)

# ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ ПЛЁНОК КОБАЛЬТА С МЕДНОЙ ПРОСЛОЙКОЙ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ТОЛЩИНЫ СЛОЕВ

Р.А. Сухачев\*, М.В. Мамонова,

<sup>1</sup>Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644065, Омск, Россия

\*e-mail: [sukhachevruslan@gmail.com](mailto:sukhachevruslan@gmail.com)

Магнетизм тонких пленок представляет собой активную область исследований, оказывающую особое влияние на технологический прогресс. Подобные материалы широко применяются в устройствах спинтроники, наноэлектроники и микроэлектроники. К примеру, они используются для хранения и записи информации в запоминающих устройствах, что позволяет получить высокую плотность и скорость записи информации [1].

Для численного моделирования методом Монте-Карло [2] и сравнения полученных результатов с экспериментом необходимо знать не только тип анизотропии, но и значение параметра анизотропии, входящего в гамильтониан системы с анизотропией.

$$H_{||} = -\sum_{i,j} J_{i,j} \{S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + (1 - \Delta_{||}) S_i^z S_j^z\}. \quad (1)$$

Найдем зависимость параметра дельта  $\Delta_{||}$  - параметра магнитной анизотропии от количества слоев магнитного материала кобальта.

Предположим, что все спины направлены вдоль оси x, тогда  $S_i^x = S_j^x = S$ ;  $S_i^y = S_j^y = 0$ ;  $S_i^z = S_j^z = 0$ . Подставим эти значения в (1) и получим:

$$E_{||} = -\sum_{i,j} J_{i,j} S^2 \quad (2)$$

Теперь направим спины вдоль оси z и, проделав аналогичные действия, получим:

$$E_{\perp} = -\sum_{i,j} J_{i,j} S^2 (1 - \Delta_{||}) \quad (3)$$

Выведем параметр анизотропии из полученных уравнений:

$$E_{||} < E_{\perp} \Rightarrow \Delta_{||} = \frac{E_{||} - E_{\perp}}{E_{||}} \quad (4)$$

Рассчитывалась ферромагнитная конфигурация системы для грани (100) с постоянной толщиной меди варьирующейся от 3 до 9 монослоев и толщиной кобальта от 1 до 8 монослоев. На рис. 1 и 2 приведены рассчитанные значения параметра магнитной анизотропии в зависимости от количества монослоев кобальта и меди в сравнении с экспериментальными данными других исследователей [3,4].

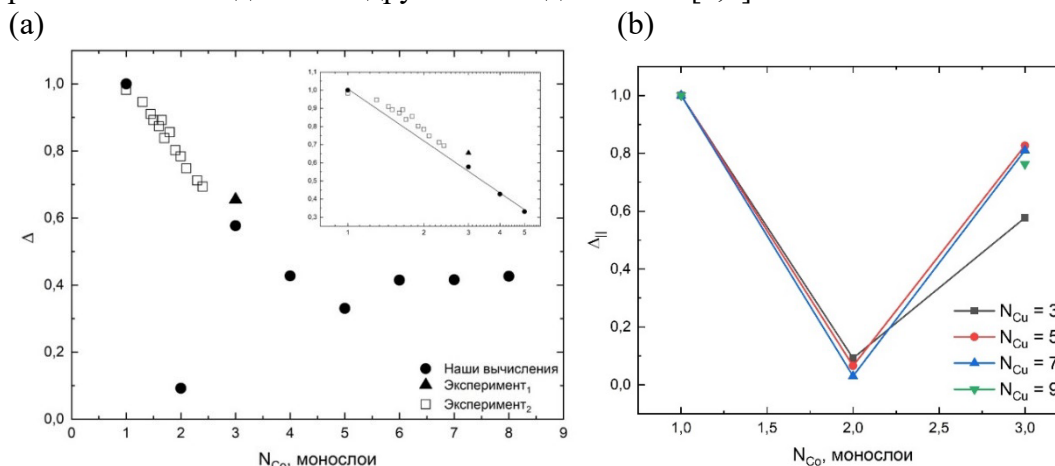


Рис 1. (а) Рассчитанные значения параметра анизотропии в зависимости от количества монослоев кобальта в сравнении со значениями  $\Delta = 1 - \frac{T_c(N)}{T_c(\infty)}$ , полученных из экспериментов  $T_c(N)$  для Co/Cu(100) [3] и [4]. Вкладка показывает аппроксимацию значений параметра магнитной анизотропии в зависимости от количества монослоев кобальта в логарифмическом масштабе. (б)



Рассчитанные значения параметра магнитной анизотропии в зависимости от количества монослоев кобальта и меди.

На рисунке 3 приведены значения энергий магнитной анизотропии, спин-орбитального взаимодействия и анизотропии. Энергия магнитной анизотропии может быть разделена на два вклада:  $E_{MA} = E_{MKA} + \Delta E_{dd}$ , один из которых – это энергия магнитокристаллической анизотропии  $E_{MKA} = \Delta E_{SOC}$ , индуцированная спин-орбитальной связью, а другой – это энергия анизотропии формы  $\Delta E_{dd}$ , обусловленная магнитными дипольными взаимодействиями. Энергию анизотропии формы можно представить в виде разности энергий диполь-дипольного взаимодействия:  $\Delta E_{dd} = E_{dd}(\vec{m}_{\perp}) - E_{dd}(\vec{m}_{\parallel})$ , в свою очередь выражение для нахождения энергии диполь-дипольного взаимодействия имеет следующий вид:

$$\Delta E_{dd} = \frac{1}{c^2} \sum_{i \neq j} \left[ \frac{\vec{M}_i \cdot \vec{M}_j}{|\vec{R}_{ij}|^3} - 3 \frac{(\vec{M}_i \cdot \vec{R}_{ij})(\vec{M}_j \cdot \vec{R}_{ij})}{|\vec{R}_{ij}|^5} \right] \quad (5)$$

В табл. 1 приведены рассчитанные в программном комплексе VASP с использованием методики [5] значения энергий магнитной анизотропии  $E_{MA} = E_{\perp} - E_{\parallel}$ , которую можно определить, как разность полных энергий системы при направлении магнитных моментов в плоскости пленки  $E_{\parallel}$  и перпендикулярно ей  $E_{\perp}$  и спин-орбитального взаимодействия при разном направлении магнитных моментов и их разность. Количество монослоев кобальта менялось от 1 до 8, толщина меди равнялась 3 монослоя.

Табл. 1. Значения энергий магнитной анизотропии, спин-орбитального взаимодействия и анизотропии формы в зависимости от количества слоев.

$N_{Co}$	$N_{Cu}$	$E_{MA}$ , мЭВ	$\Delta E_{SOC}$ , мЭВ	$\Delta E_{dd}$ , мЭВ
1	3	0,898	1,636	-0,01218
	5	0,944		
	7	0,899	1,560	-0,00195
	9	0,930	1,641	-0,00139
2	3	0,540	-0,133	0,337
	5	0,092	0,053	-0,080
	7	0,038	0,073	-0,077
	9	-0,104	0,043	-0,076
3	3	1,161	2,377	-0,442
	5	1,508	2,257	-0,422
	7	1,273	2,353	-0,415
	9	1,152	2,311	-0,412

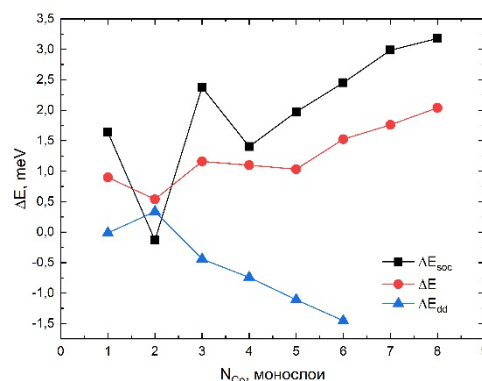


Рис. 3. Рассчитанные значения энергий магнитной анизотропии, спин-орбитального взаимодействия и анизотропии формы в зависимости от количества монослоев магнитного материала кобальта.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ (соглашение 23-22-00093). Были использованы вычислительные ресурсы Центра совместного пользования ДВО РАН (Хабаровск).

[1] B. Heinrich, J.A.C. Bland Ultrathin Magnetic Structures IV. Berlin, Heidelberg: Springer, (2005)

[2] М.А. Шляхтич, П.В. Прудников, Изв. РАН. Сер. физ. Т.87. № 3 (2023)

[3] П.Д. Ким, Ю.Х. Чен, И.А. Турпанов, В.К. Мальцев, Л.А. Ли, Т.Н. Исаева, А.Я. Бетенькова, М.М. Карпенко, Л.Е. Быкова, Е.С. Полуян, Письма в ЖЭТ. Т.64. С.341 (1996)

[4] F. Huang, M.T. Kief, G.J. Mankey, R.F. Willis, Phys. Rev. V.49. P.3962 (1994)

[5] S. Steiner, S. Khmelevskiy, M. Marsmann, G. Kresse, Phys. Rev. B.V.93. P.224425 (2016)



# ИССЛЕДОВАНИЕ СКЕЙЛИНГОВОГО ПОВЕДЕНИЯ СПИНОВЫХ СИСТЕМ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

А.А. Чубарова<sup>1\*</sup>, П.В. Прудников<sup>2,1</sup>

<sup>1</sup>Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского, 644077, Омск, Россия

<sup>2</sup>Центр новых химических технологий ИК СО РАН, 644040, Омск, Россия

\*e-mail: [ChubarovaAA@omsu.ru](mailto:ChubarovaAA@omsu.ru)

Методы машинного обучения получили широкое распространение благодаря своему применению к различным прикладным задачам [1-3]. В области физики методы машинного обучения используются для идентификации и классификации фазовых переходов, предполагая отсутствие предварительных знаний [3]. Для исследования фазовых переходов в спиновых системах традиционно используют отдельный класс алгоритмов машинного обучения - свёрточные нейронные сети [4-5].

В данной работе проведено исследование скейлингового поведения двумерной модели Изинга и трехмерной анизотропной модели Гейзенберга с использованием свёрточной нейронной сети. Проведена оценка критических температур, рассчитаны функции корреляционной длины для каждой из рассматриваемых спиновых моделей. С целью расчёта критических индексов строилась универсальная скейлинговая зависимость для исследуемых спиновых моделей.

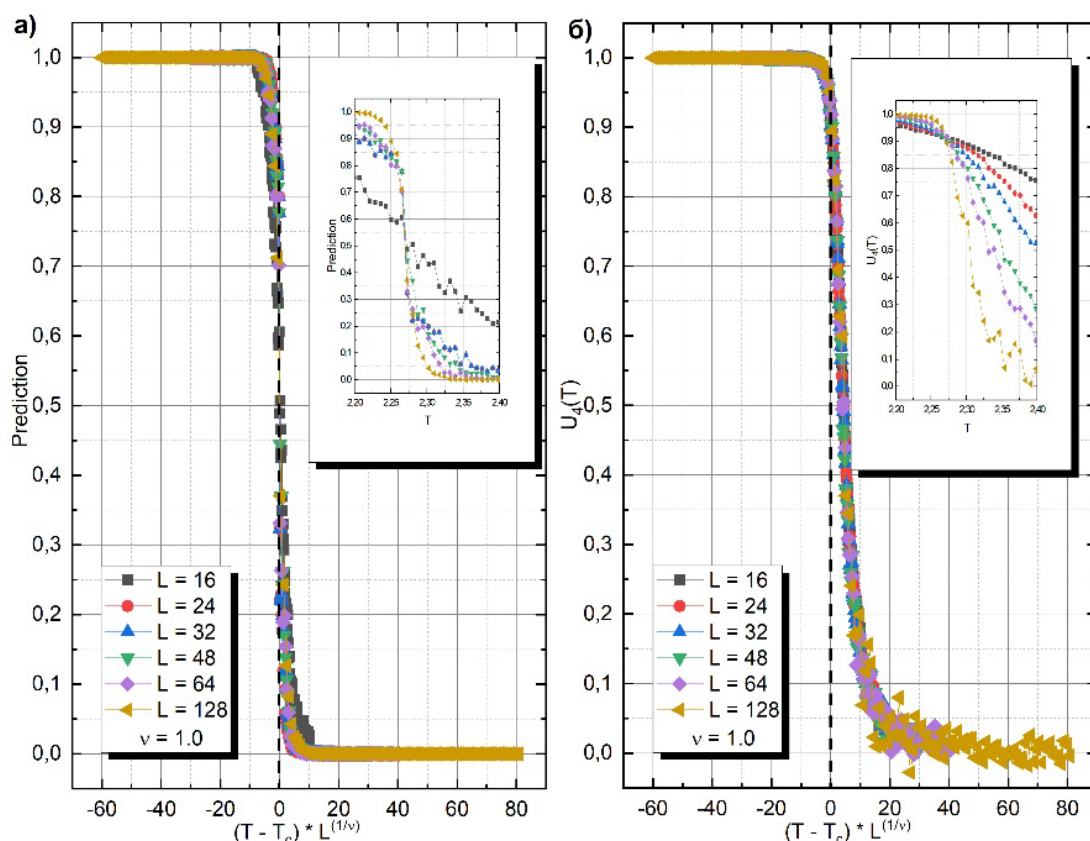


Рис 1. Скейлинговые зависимости двумерной модели Изинга для линейных размеров  $L = 16, 24, 32, 48, 64, 128$ , построенная а) методами машинного обучения б) методами Монте-Карло.

На Рис.1 представлены скейлинговые зависимости, построенные на основе работы нейронной сети и результатов расчётов методами Монте-Карло [6], для двумерной модели Изинга при разных линейных размерах  $L = 16, 24, 32, 48, 64, 128$  при значении критического индекса  $\nu = 1.0$ .

По результатам данной работы удалось выявить универсальность применения подхода на основе нейронной сети для различных спиновых моделей. Реализованы расчёты критических характеристик, основанных только на результатах работы нейронной сети. Найдены зависимости корреляционной функции для двумерной модели Изинга и трёхмерной модели Гейзенберга.

- [1] S. Leijnen, F. van Veen, *Proceedings*. V.**47**(1), 9 (2020)
- [2] S. Rahmanian Koshkaki, Z. Allahyari, A.R. Oganov, V.L. Solozhenko, *J. Chem. Phys.* V.**157**, 124704 (2022)
- [3] K. Shiina, H. Mori, Y. Okabe, H.K. Lee, *Sci. Rep.* V. **10**. 2177 (2020)
- [4] A. Azizi, M. Pleimling, *Sci. Rep.* V.**11**. 6395 (2021)
- [5] A. Tanaka, A. Tomiya, *J. Phys. Soc. Jpn.* V. **86**, 063001 (2017).
- [6] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, E. Teller, *J. Chem. Phys.* V.**21**, 1087 (1953)

# ПРЕДСКАЗАНИЕ КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ СВЕРТОЧНОЙ НЕЙРОСЕТЬЮ

**Е.И. Хорошев<sup>1\*</sup>, П.В. Прудников<sup>2,1</sup>**

<sup>1</sup>Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

<sup>2</sup>Центр новых химических технологий ИК СО РАН, 644040, Омск, Россия

\*e-mail: [egor@khoroshev.net](mailto:egor@khoroshev.net)

В последнее время методы машинного обучения приобрели широкое распространение в качестве инструмента моделирования спиновых систем [1-3]. Машинное обучение отличается своей производительностью и простотой в использовании, поэтому стало широко применяться в области статистической физики.

Актуальность исследования двумерной ХУ-модели обусловлена её применимостью для описания свойств широкого ряда физических систем. Научный интерес к двумерной ХУ-модели связан не только с ее прикладными свойствами, но и особенностями низкотемпературной топологической фазы и особенностями топологического фазового перехода. Задача детектирования температуры фазового перехода Березинского-Костерлица-Таулеса [4, 5]  $T_{\text{ВКТ}}$  в различных системах является актуальной задачей [6].

Целью данной работы является определение методами машинного обучения значения  $T_{\text{ВКТ}}$  для классической структурно неупорядоченной двумерной ХУ-модели со спиновой концентрацией  $p = 0.8$  и  $0.9$ .

Гамильтониан модели может быть записан в следующем виде:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle}^N p_i p_j S_i S_j$$

Где  $S_i$  – спин, который находится в  $i$ -ом узле решетки, единичный двумерный вектор  $S_i = (S_{i,x}, S_{i,y})$ ;  $\langle i, j \rangle$  показывает, что суммирование осуществляется по ближайшим соседям. Дефекты рассматриваются “вмороженные” в матрицу образца. Дефекты распределялись по решетке равномерно, нескоррелированно с концентрацией  $c_{\text{imp}} = 1 - p$ , где  $p$  – спиновая концентрация.

В качестве входного слоя использовались корреляционные матрицы, полученные путём обработки спинов по формуле:

$$g_i(L/2) = \frac{1}{2} \left[ S_{x,y} S_{x+\frac{L}{2},y} + S_{x,y} S_{x,y+\frac{L}{2}} \right]$$

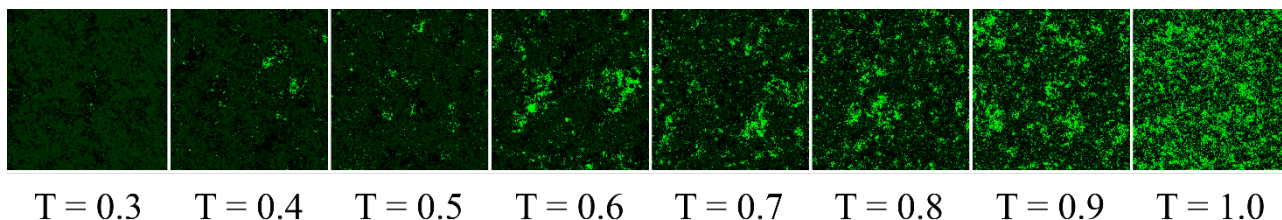


Рис. 1. Корреляционные матрицы ХУ-модели для  $0.3 \leq T \leq 1.0$ .

Был проведён расчёт критической температуры фазового перехода для двумерной ХУ-модели концентрации  $p = 0.9$  и  $p = 0.8$  линейных размеров  $L = 16, 32, 64$  при температурах в пределах  $0.3 \leq T \leq 1.6$  с температурным шагом  $0.02$ . Пересечения графиков определяют фазовый переход в температуре рядом со значением  $T_{\text{ВКТ}}$ .

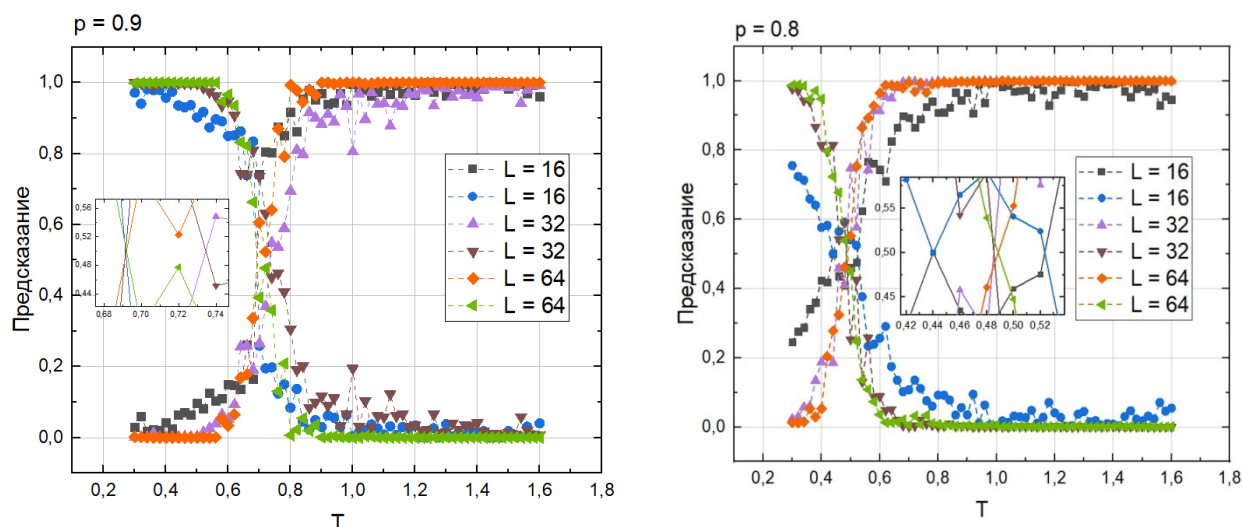


Рис. 2. Графики вероятностей предсказания фаз двумерной XY-модели линейных размеров  $L = 16, 32, 64$ , спиновая концентрация  $p = 0.9$  (слева) и  $p = 0.8$  (справа).

Было определено значение температуры фазового перехода Березинского-Костерлица-Таулеса  $T_{\text{BKT}}(p)$  для двумерной XY-модели методами машинного обучения. Было показано, что сверточная нейронная сеть способна “отличать” низкотемпературные фазы от высокотемпературных. Таким образом, методы машинного обучения начинают дополнять традиционно применяемые в научных исследованиях методы статистического анализа.

- [1] N. Maskara, M. Buchhold, M. Endres, E. van Nieuwenburg, Learning algorithm reflecting universal scaling behavior near phase transitions, Phys. Rev. Res, 4, L022032 (2022)
- [2] F. Albarrací, H. Rosales, Machine learning techniques to construct detailed phase diagrams for skyrmion systems, Phys. Rev. B 105, 214423 (2022)
- [3] W. Wang, Z. Wang, Y. Zhang, B. Sun, K. Xia, Learning Order Parameters from Videos of Skyrmion Dynamical Phases with Neural Networks, Phys. Rev. Applied, 16, 014005, (2021)
- [4] В. Л. Березинский, Разрушение дальнего порядка в одномерных и двумерных системах с непрерывной группой симметрии. I. Классические системы, ЖЭТФ 59, 907 (1970)
- [5] J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless, Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems, J. Phys. C 6, 1181 (1973)
- [6] D. Contessi, E. Ricci, A. Recati, M. Rizzi, Detection of Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition via Generative Adversarial Networks, SciPost Phys. 12, 107 (2022)

# ПРОЯВЛЕНИЯ МЕДЛЕННОЙ ДИНАМИКИ В МУЛЬТИСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ С РАЗЛИЧНЫМИ ТОЛЩИНАМИ МАГНИТНЫХ ПЛЕНОК

Д.А. Друзев<sup>1</sup>, В.В. Прудников<sup>1</sup>, В.В. Хитринцева<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

\*e-mail: [vkhitrintseva@gmail.com](mailto:vkhitrintseva@gmail.com)

В последние годы физика ультратонких магнитных пленок и мультислойных наноструктур на их основе характеризуется интенсивными исследованиями [1]. Целый ряд уникальных свойств этих пленок, существенно отличающихся от свойств объемных материалов, вызывает к ним повышенный интерес. Использование ферромагнитных пленок на основе переходных металлов Fe, Co и Ni в искусственно созданных многослойных сверхструктурах приводит к таким практически важным явлениям, как эффект гигантского магнитосопротивления (ГМС). Целью данной работы является моделирование неравновесного поведения трехпленочной наноструктуры с различными толщинами ферромагнитных пленок  $N = 3, 21$  монослоев и намагниченностью, ориентированной в плоскости пленок.

Магнитные свойства ультратонких пленок из переходных металлов, контактирующих с пленками немагнитных благородных металлов, корректно описываются анизотропной моделью Гейзенберга [2], задаваемой гамильтонианом:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + (1 - \Delta(N)) S_i^z S_j^z] - J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + (1 - \Delta(N)) S_i^z S_j^z], \quad (1)$$

где  $S_i^x, S_i^y, S_i^z$  — компоненты спинов в узлах ГЦК решетки системы Co/Cu/Co;  $\Delta(N)$  — параметр анизотропии, зависящий от толщины ферромагнитной пленки, в данной работе  $\Delta(N=3) = 0.665$ ,  $\Delta(N=21) = 0.02$ . Спиновая структура пленки задается линейными размерами  $L$  и толщиной  $N$  с периодическими граничными условиями в плоскости пленки. При Монте-Карло моделировании температура  $T_s$  задается в единицах обменного интеграла, поэтому интеграл взаимодействия между спинами внутри пленки берется  $J_1=1$ , а для межслоевого взаимодействия  $J_2 = -0.1 J_1$ . Отрицательность  $J_2$  отражает факт, что в структурах с эффектом ГМС толщина немагнитной прослойки подбирается так, чтобы дальнедействующее и осциллирующее межслоевое обменное взаимодействие между спинами ферромагнитных слоев носило эффективный антиферромагнитный характер с намагниченностями соседних слоев ориентированных противоположно друг другу.

Системы с медленной динамикой, к которым относятся и мультислойные магнитные наноструктуры [3], характеризуются проявлением эффектов старения в двухвременной зависимости автокорреляционной функции  $C(t, t_w)$  и динамической восприимчивости  $\chi(t, t_w)$  от времени ожидания  $t_w$  и времени наблюдения  $t-t_w$ . Данные функции задаются выражениями:

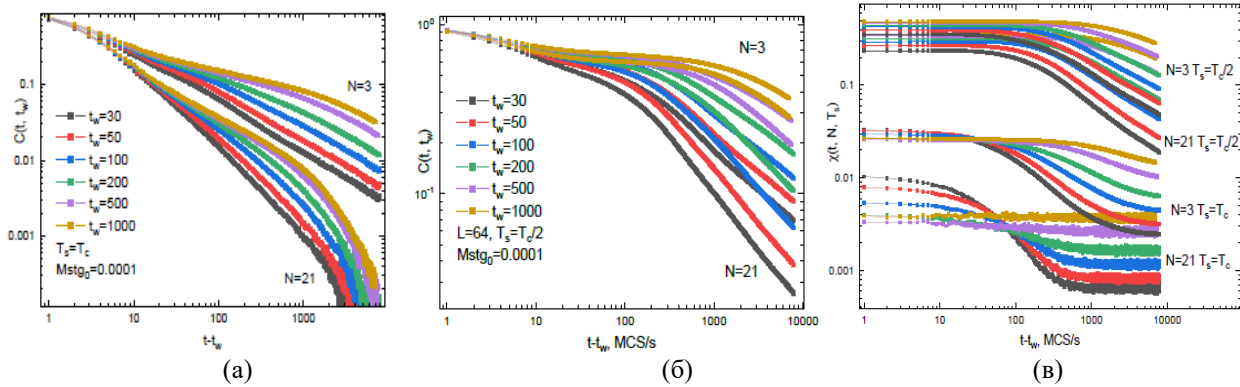
$$C(t, t_w) = \left\langle \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} \vec{S}_i(t) \vec{S}_i(t_w) \right\rangle - \left\langle \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} \vec{S}_i(t) \right\rangle \left\langle \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} \vec{S}_i(t_w) \right\rangle, \quad (2)$$

$$\chi(t, t_w) = \left\langle \frac{1}{T_s N_s} \sum_{i=1}^{N_s} \vec{S}_i(t) \Delta \vec{S}_i(t_w) \right\rangle, \quad \Delta \vec{S}(t_w) = \sum_{i=1}^{N_s} \vec{S}_i \left( 1 - th \left( \frac{1}{2T_s} \Delta H_i(t) \right) \right), \quad (3)$$

где  $N_s$  — количество спинов в структуре, угловые скобки означают статистическое усреднение. При моделировании  $C(t, t_w)$  использовался алгоритм Метрополиса, а  $\chi(t, t_w)$  — тепловой бани.

Анализ временных зависимостей данных характеристик (рис. 1) показывает, что  $C(t, t_w)$  и  $\chi(t, t_w)$  при эволюции из высокотемпературного начального состояния имеют более сильную размерную зависимость от  $N$  при критических температурах  $T_c(N=3)=2.391(6)$ ,  $T_c(N=21)=3.21(3)$ , чем в низкотемпературной фазе с  $T_s < T_c$ .





**Рис. 1.** Поведение автокорреляционной функции  $C(t, t_w)$  (а,б) и динамической восприимчивости  $\chi(t, t_w)$  (в) при эволюции из высокотемпературного начального состояния с начальной намагниченностью  $M(0) \ll 1$  для толщин пленок  $N=3, 21$  для температур моделирования  $T_s = T_c$  и  $T_c/2$ .

Выявлено, что с увеличением толщины пленок  $N$  функции  $C(t, t_w)$  и  $\chi(t, t_w)$  при критической температуре  $T_c(N)$  спадают быстрее, чем в низкотемпературной фазе. Во временных зависимостях данных характеристик эффекты старения проявляются не только при критической температуре, как в объемных системах, но и во всей низкотемпературной фазе. Впервые осуществлен расчет предельного флуктуационно-диссипативного отношения (ФДО)  $X^\infty$  для мультислойных наноструктур. ФДО является важной универсальной характеристикой неравновесных процессов в различных системах. ФДО может быть определено соотношением [4]

$$X^\infty(t_w) = \lim_{C(t, t_w) \rightarrow 0} T \frac{\partial \chi(t, t_w)}{\partial C(t, t_w)}. \quad (4)$$

Откуда можно получить значение предельного ФДО при  $t_w \rightarrow \infty$ . На основе рассчитанных двухвременных зависимостей для автокорреляционной функции  $C(t, t_w)$  и динамической восприимчивости  $\chi(t, t_w)$  были определены следующие значения предельного ФДО:  $X^\infty(N=3, T_c)=0.448(6)$ ;  $X^\infty(N=21, T_c)=0.385(4)$ ;  $X^\infty(N=3, T_c/2)=0.909(1)$ ;  $X^\infty(N=21, T_c/2)=0.850(1)$ . Для структур с квазидвумерными толщинами  $N=3$  МС ферромагнитных пленок полученное значение предельного ФДО при критической температуре  $T_c$  хорошо соотносится со значением  $X^\infty=0.444(26)$  для двумерной ХУ модели при температуре фазового перехода Березинского-Костерлица-Таулесса [5], а с  $N=21$  МС со значением  $X^\infty=0.383(6)$  для трехмерной изотропной модели Гейзенберга [6] из-за счет малого влияния в данных структурах эффектов анизотропии ( $\Delta(N=21) = 0.02$ ). Для температур  $T_s < T_c$  значения предельного ФДО демонстрируют значительно большие значения, чем при критической температуре  $T_c$ , а их близость к единице указывает на тенденцию снижения эффектов неравновесности с понижением температуры замораживания  $T_s$ .

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект 23-22-00093.

- [1] C.A.F. Vaz, J.A.C. Bland, G. Lauhoff, Rep. Prog. Phys. **71**, 056501 (2008)
- [2] P.V. Prudnikov, V.V. Prudnikov, M.A. Menshikova, N.I. Piskunova, JMMM. **387**, 77 (2015)
- [3] T. Mukherjee, M. Pleimling, Ch. Vinek, Phys. Rev. B **82**, 134425 (2010)
- [4] В.В. Прудников, П.В. Прудников, М.В. Мамонова, УФН. **187**, 817 (2017)
- [5] П.В. Прудников, В.В. Прудников, И.С. Попов, Письма в ЖЭТФ. **101**, 596 (2015)
- [6] V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, E.A. Pospelov, A.S. Lyakh, J. Phys.: Conf. Ser. **1740**, 012004 (2021)

## ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ ОБМЕННОГО ИНТЕГРАЛА ДЛЯ ПЛЕНКИ ЖЕЛЕЗА

**М.Ю. Макеев<sup>1\*</sup>, М.В. Мамонова<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

\*e-mail: [mihailmaki603@gmail.com](mailto:mihailmaki603@gmail.com)

В данной работе представлено исследование, посвященное расчету интегралов обменного взаимодействия. Основной целью работы является анализ магнитных свойств и исследование влияния кристаллической структуры на данную константу.

Мы применили методы первопринципных расчетов, используя программный комплекс VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) [1], для моделирования и анализа электронной структуры и определения константы обменного взаимодействия.

Предварительные результаты нашего исследования позволяют получить оценку константы обменного взаимодействия и выявить её взаимосвязь с магнитными свойствами. Мы обращаем особое внимание на влияние кристаллической структуры на данную константу, исследуя ее зависимость от параметров решетки и ориентации кристалла.

Полученные результаты могут быть полезны для дальнейших исследований в области физики твердого тела и магнетизма, а также для применения в различных технологиях и промышленных процессах.

Обменное взаимодействие играет ключевую роль в определении магнитных свойств материалов, и его характеристики имеют важное значение для понимания магнитных явлений.

Предварительные результаты нашего исследования позволяют нам получить значимую оценку константы обменного взаимодействия и выявить её связь с магнитными свойствами. В данной работе исследовались случаи коллинеарного магнетизма, с перпендикулярным направлением спинов.

Мы исследовали систему объемного ОЦК железа, а также железные пленки толщиной в 1, 2 и 4 монослоя. На рис.1 приведены две антиферромагнитные конфигурации атомов в суперячейке для Fe в объеме. Стрелками обозначены направления магнитных спинов. Вклад в полную энергию, соответствующий обменному взаимодействию, описывался модельным гамильтонианом Гейзенберга  $H = -\sum_{i,j} J_{ij} (\vec{S}_i \vec{S}_j)$ .

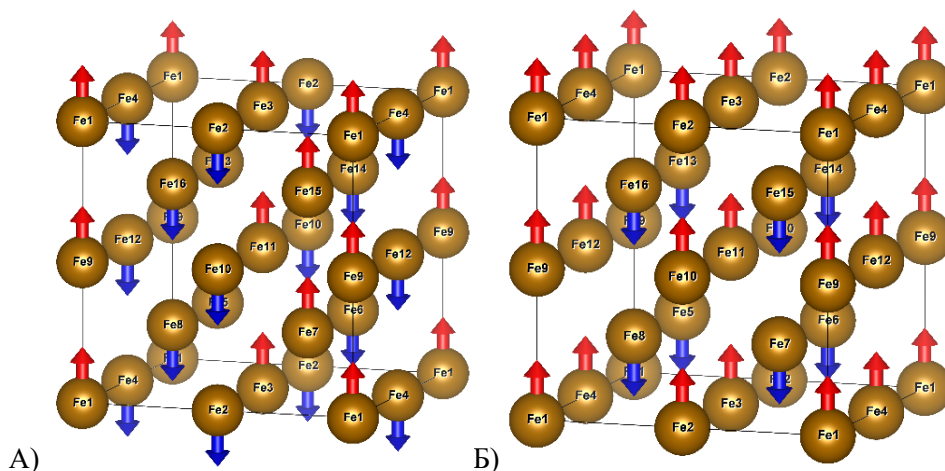


Рис. 1. Конфигурации атомов в суперячейке для ОЦК Fe. Стрелками обозначены направления магнитных спинов.

В работе [2] приведены значения обменных интегралов, полученные методом молекулярного поля. Рассчитанное значение  $J$  для объемного ОЦК железа в [2] составило



$1.88 \cdot 10^{-14}$  эрг. Данный результат находится в хорошем соответствии с результатами приведенными в таб. 1, которые были получены нами с помощью первопринципного подхода.

Табл. 1. Рассчитанные значения обменных интегралов и полных энергий системы для ферромагнитной  $E^F$  и антиферромагнитных спиновых конфигураций  $E^{AF}$ . Для объемного железа и пленок в один, два и четыре слоя.

Система	$E^F$ эВ	$E_I^{AF}$ эВ	$E_2^{AF}$ эВ	$J_1$ $10^{-14}$ эрг	$J_2$ $10^{-14}$ эрг
Fe	-130,994	-124,564	-128,386	2,265	-0,253
1Fe	-22,139	-21,668	-	2,362	-
2Fe	-56,113	-55,635	-	2,391	-
4Fe	-121,544	-115,077	-	3,097	-

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (соглашение 23-22-00093)

[1] G. Kresse, J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558 (1993)

[2] C. A. F. Vaz, J. A. C. Bland, Rep. on Prog. in Phys **71**, 056501 (2008)

# МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ УСЛОЖНЕННЫХ СПИНОВЫХ ВЕНТИЛЕЙ

**А.С. Егорина<sup>\*1</sup>, П.В. Прудников<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

<sup>\*</sup>e-mail: anastasia.sergeevna.egorina@gmail.com

Повышенный интерес ученых к ультратонким магнитным пленкам вызван их свойствами, отличающимися от свойств объемных материалов. Ультратонкие пленки из магнитных металлов и сплавов являются составляющими элементами магнитных сплавов магнитных спин-вентильных структур, которые активно применяются в устройствах с эффектами гигантского магнитосопротивления (ГМС) [1]. Спиновые вентили находят широкое применение в микроэлектронике, вычислительной физике, клинической биомедицине [2]. Осуществлено моделирование методом Монте-Карло усложненных спиновых систем, описываемых трехмерной анизотропной моделью Гейзенберга. Структуры с намагниченностью перпендикулярной плоскости пленок описаны гамильтонианом [3]:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \{ S_i^x S_j^x + 0.8 S_i^y S_j^y + (1 - \Delta_2(N)) S_i^z S_j^z \} - h \sum_i S_i^z.$$

где  $S_i^x$ ,  $S_i^y$ ,  $S_i^z$  - компоненты трехмерного единичного вектора спина, закрепленного в  $i$ -ом узле ГЦК-решетки,  $\Delta_2(N)$  - параметр, учитывающие эффективное влияние магнитной анизотропии типа «легкой плоскости» ( $\Delta_2(N)$ ),  $J_{ij}$  - обменный интеграл, характеризующий взаимодействие ближайших спинов, параметр  $h = g\mu_B H$  описывает влияние внешнего магнитного поля, ориентированного перпендикулярно плоскости пленок (вдоль оси  $z$ ).

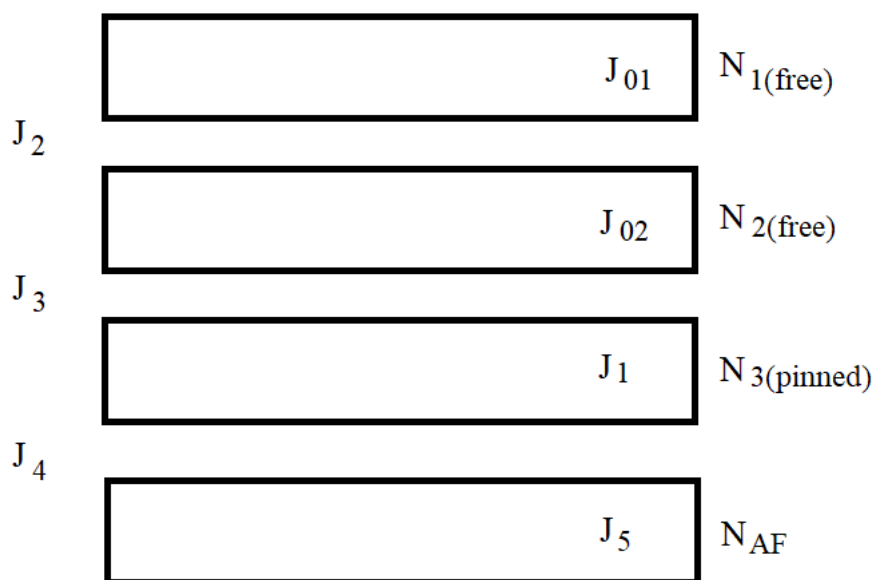


Рис 1. Модель усложненного спинового вентиль.

Проведено моделирование неравновесного поведения усложненного спинового вентиль (рис. 1), описываемого трехмерной анизотропной моделью Гейзенберга с анизотропией типа

“легкая плоскость”. Рассмотрены физические свойства усложненной спин-вентильной структуры. Изучены временные зависимости намагниченности в усложненном спиновом вентиле. Изучена поведние авторокллексионной функции. Проведен анализ релаксации намагниченности из высокотемпературного и низкотемпературного начального состояния. Выявлены эффекты старения, которые были подтверждены коллапсом данных для динамических скейлинговых зависимостей.

- [1] C.A Vaz.F., J.A.C. Bland, G. Lauhoff, Magnetism in ultrathin film structures, Rep. Prog. Phys. 2008. Vol. 71 056501.
- [2] M.Djamal, Ramli, F. Haryanto and Khairurrijal, Biosensors for Health, Environment and Biosecurity, - C.6.- P.150. - 2011.
- [3] Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Mamonova M.A., Piskunova N.I. Influence of anisotropy on magnetoresistance in magnetic multilayer structures // J. Magn. Magn. Matter. 2019. Vol. 482. P. 201-205.

# ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В ТОНКИХ ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИХ ПЛЕНКАХ ВО ВНЕШНЕМ ОСЦИЛЛИРУЮЩЕМ ПОЛЕ

**А.В. Ейхлер<sup>1\*</sup>, П.В. Прудников<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, 644077, пр-т Мира 55а, Омск, Россия.

<sup>2</sup> Центр новых химических технологий ИК СО РАН, 644040, ул. Нефтезаводская 54, Омск, Россия.

\*e-mail: [alexey987@bk.ru](mailto:alexey987@bk.ru)

Динамический фазовый переход может дать понимание о процессах, происходящих в неравновесных системах, и описывает поведение магнитных [1] и биологических систем [2], кинетику двухкомпонентной смеси [3], свойства волн зарядовой плотности [4] и динамику магнитных свойств нанографена [5].

Явление динамического фазового перехода наблюдается при быстро меняющемся внешнем осциллирующем поле, действующим на тонкую магнитную структуру. При малом значении полупериода внешнего поля намагниченность системы не может качественно следовать за изменением поля. Однако же, при высоком значении полупериода внешнего поля, поведение намагниченности повторяет осцилляции поля, результатом этого являются симметричные петли относительно нуля.

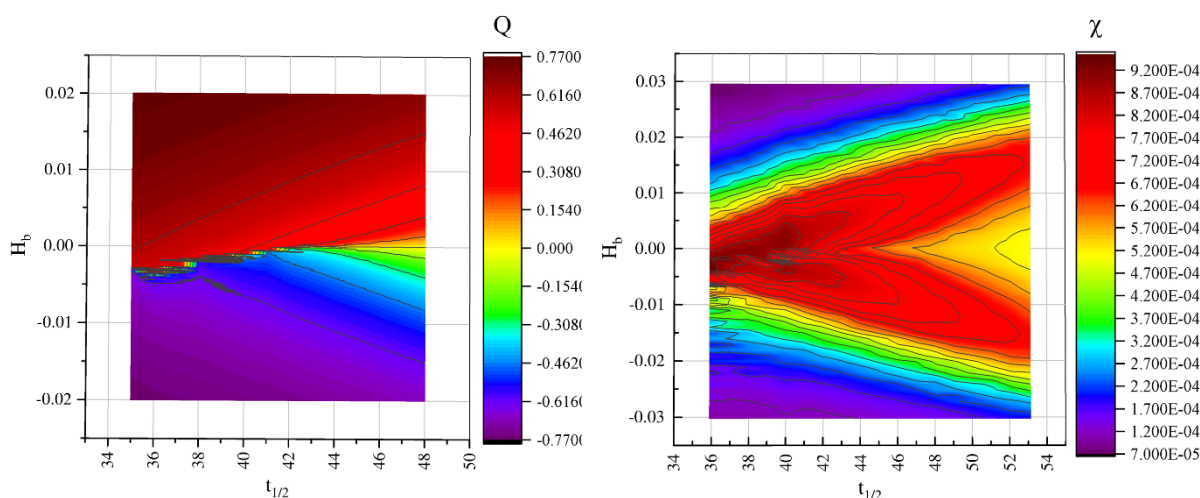


Рис 1. Динамическая фазовая диаграмма параметра порядка  $Q(t_{1/2}, H_b)$  и восприимчивости  $\chi(t_{1/2}, H_b)$  в зависимости от значений полупериода внешнего поля  $t_{1/2}$  и величины поля смещения  $H_b$ . Градиент цвета на рисунке представляет собой последовательное размытие резкого перехода между фазами.

Численное моделирование проводилось методами Монте-Карло для анизотропной модели Гейзенберга, во внешнем осциллирующем поле.

Гамильтониан системы имеет вид:

$$H = -J \sum_{i,j} \left[ \left( 1 - \langle N \rangle \right) (S_i^x S_j^y + S_i^y S_j^x) + S_i^z S_j^z \right] - H(t) \sum_j S_j^z$$

В результате исследования были получены неравновесные динамические фазовые диаграммы для параметра порядка системы  $Q(t_{1/2}, H_b)$  и ее восприимчивости  $\chi(t_{1/2}, H_b)$  Рис.1, демонстрирующие существование динамического фазового перехода в тонких магнитных пленках модели Гейзенберга. Рассчитанные неравновесные свойства качественно согласуются с экспериментальными данными [1].

Исследования проведены с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием «Центр обработки и хранения научных данных ДВО РАН», финансируемого Минобрнауки России по соглашению № 075-15-2021-663.

- [2] C. E. Woodward, M. Campion, D. J. Isbister, J. Chem. Phys. **116**, 2983 (2002)
- [3] N. Ogawa, Y. Murakami, K. Miyano, Phys. Rev. B **65**, 155107 (2002)
- [4] Y. Benhouria, I. Bouziani, I. Essaoudi, A. Ainane, R. Ahuja, J. Magn. Magn. Mater **460**, 223 (2018)
- [5] J. M. Marín Ramírez, E. Oblak, P. Riego, G. Campillo, J. Osorio, O. Arnache, A. Berger, Phys. Rev. E **102**, 022804 (2020)

# СПЕКТР СПИНОВЫХ ВОЛН И НАМАГНИЧЕННОСТЬ В ФЕРРИМАГНЕТИКЕ НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ С ОДНОИОННОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ

В.В. Вальков<sup>1</sup>, А.С. Мартынов<sup>1\*</sup>, Д.М. Дзедзисашвили<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия

\*e-mail: zldgin2@mail.ru

Исследование квантовых эффектов в материалах с антиферромагнитным упорядочением является одним из активно развивающихся направлений в физике твёрдого тела. В низкоразмерных фрустрированных системах с различными значениями спиновых квантовые эффекты проявляются сильнее, чем в обычных антиферромагнетиках [1]. Дополнительный вклад в нулевые квантовые колебания, влияющие на намагниченность, дает одноионная анизотропия [2].

В работе исследованы магнитные и спектральные свойства трёхподрешёточного ферритмагнетика на треугольной решётке со спинами  $S=1$ ,  $S=1/2$  и  $S=1/2$  (в L-, F- и G-подрешётках, соответственно), при учете одноионной анизотропии типа лёгкая плоскость и с антиферромагнитным обменным взаимодействием между подрешётками при нулевой температуре. Для F- и G-подрешёток использовано представление Гольштейна-Примакова. Для корректного учета  $SU(3)$  алгебры спиновых операторов из L-подрешётки был осуществлён переход к операторам Хаббарда, а их бозонизация осуществлялась согласно рецепту, предложенному в работе [3]. В результате возникает четыре сорта бозевских операторов: по одному - для F- и G-подрешёток, и два – для L-подрешётки.

В рамках данного подхода параметр анизотропии  $D$  изменяется в диапазоне от нуля до критического значения  $D_c$ , при котором подсистема спинов с  $S=1$  уходит в синглетную фазу. В результате решения дисперсионного уравнения получены четыре ветви спектра коллективных спиновых возбуждений для разных значений  $D$ , обменного интеграла  $I$  (между ближайшими спинами из L- и F(или G)-подрешёток) и интеграла  $J$  (между ближайшими спинами из F- и G-подрешёток). Подробно проанализирована модификация структуры спектра при изменении параметров  $D$ ,  $I$  и  $J$ .

Рассчитанные зависимости полного магнитного момента  $M$  от  $D$  при разных соотношениях между  $I$  и  $J$  показаны на рис.1. Основному состоянию отвечает планарная структура векторов намагниченности подрешёток  $\mathbf{R}_L$ ,  $\mathbf{R}_F$  и  $\mathbf{R}_G$  с полным моментом  $\mathbf{M}$ , направленным параллельно  $\mathbf{R}_L$  (ось  $Oz$ ). При увеличении  $D$  от нуля до  $D_c$  магнитная структура изменяется от скошенной ферритмагнитной (для  $I/J=0.2, 0.5$  и  $0.8$ ) или коллинеарной, параллельной оси  $Oz$ , структуры (при  $I/J>1$ ) до антиферромагнитной, когда  $\mathbf{R}_L=0$ , а моменты  $\mathbf{R}_F$  и  $\mathbf{R}_G$  ( $= -\mathbf{R}_F$ ) перпендикулярны оси  $Oz$ .

Исследование свойств системы при  $D>D_c$  требует использования альтернативного подхода и будет проведено в отдельном исследовании.

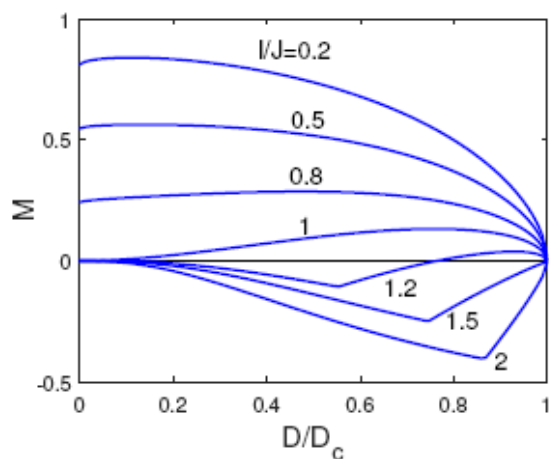


Рис. 1. Зависимости  $M$  от параметра анизотропии  $D$  при различных соотношениях между обменными интегралами  $I$  и  $J$ . Значения  $I/J$  указаны возле соответствующих кривых.

- [1] A.S. Borovik-Romanov, S.V. Petrov, A.M. Tikhonov, B.S. Dumesht, JETP Lett. **66**, 759 (1997)
- [2] В.И. Бутрим, Б.А. Иванов, Ю.А. Фридман, Физика низких температур **38**, 507 (2012)
- [3] В.В. Вальков, Т.А. Валькова, ЖЭТФ **99**, 1881 (1991)

## ОДНО- И ДВУХЧАСТИЧНЫЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ В КЛАСТЕРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ КУПРАТОВ

**В.И. Кузьмин<sup>1\*</sup>, С.В. Николаев<sup>1,2</sup>, М.М. Коршунов<sup>1,2</sup>, С.Г. Овчинников<sup>1,2</sup>**<sup>1</sup>Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия<sup>2</sup>Сибирский федеральный университет, 660041, Красноярск, Россия\*e-mail: [kuz@iph.krasn.ru](mailto:kuz@iph.krasn.ru)

Понимание природы высокотемпературной сверхпроводимости в купратах затрудняется эффектом сильных электронных корреляций. Один из способов частично преодолеть эту проблему — найти точное решение, по крайней мере, внутри небольшого кластера и расширить его на весь кристалл. Такой подход лежит в основе кластерной теории возмущений (CPT – cluster perturbation theory) [1]. В данной работе рассматривается CPT для спиновой и зарядовой динамической восприимчивости (spin-CPT и charge-CPT), в рамках которой корреляционные эффекты явно учитываются точной диагонализацией малого кластера. Мы применили spin-CPT и charge-CPT к эффективной двухзонной модели Хаббарда для купратов, полученной из трехзонной модели Эмери и рассчитали одно- и двухчастичные корреляционные функции, а именно электронную спектральную функцию и спиновую, а также зарядовую восприимчивости. Зависимость спиновой восприимчивости от допирования изучалась в рамках spin-CPT и CPT-RPA, т.е. обобщения приближения случайных фаз (RPA). В слабо допированной области оба метода показывают признаки верхней ветви дисперсии спиновых возбуждений с минимальной энергией возбуждений на волновом векторе  $(\pi, \pi)$  и отсутствие низкоэнергетических несоизмеримых возбуждений. В области высокого допирования оба метода приводят к низкоэнергетическому отклику на четырех несоизмеримых волновых векторах, в качественном согласии с результатами экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов в сильно допированных ВТСП купратах.

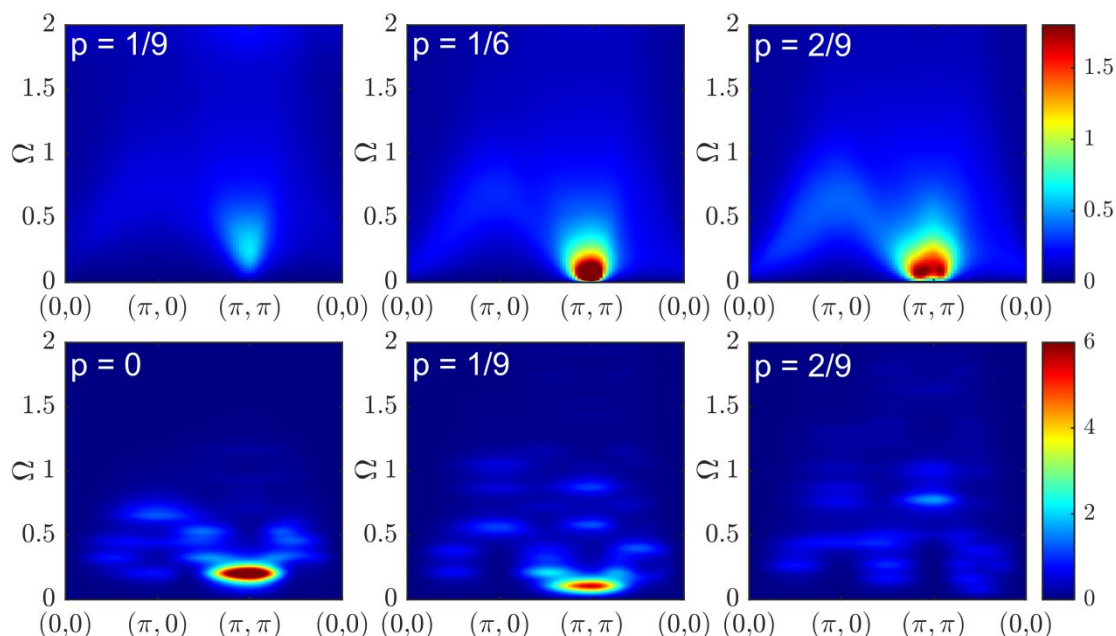


Рис 1. Динамическая спиновая восприимчивость вдоль симметричных направлений зоны Бриллюэна в рамках CPT-RPA (сверху) и spin-CPT (снизу) для различных значений допирования  $p$  [2]

[1] D. Sénéchal, D. Perez, M. Pioro-Ladrière, Phys. Rev. Lett. **84**, 522–525 (2000)[2] V.I Kuz'min, S.V. Nikolaev, M.M. Korshunov, S.G. Ovchinnikov, Materials **16**, 4640 (2023)



## УСТРОЙСТВО ЗАЩИТЫ ОТ МОЩНОГО РАДИОИМПУЛЬСА С ДВУМЯ РАБОЧИМИ ПОЛОСАМИ

А.А. Александровский<sup>1</sup>, А.О. Афонин<sup>1</sup>, И.В. Говорун<sup>1,2\*</sup>, А.А. Лексиков<sup>1</sup>, А.В. Угрюмов<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, г. Красноярск,

<sup>2</sup> Сибирский государственный университет науки и технологий им. академика М.Ф.

Решетнева, г. Красноярск

\* e-mail: [govorun-ilya@mail.ru](mailto:govorun-ilya@mail.ru)

В работе рассмотрено устройство защиты от мощного радиоимпульса, имеющее две рабочих полосы частот. Каждый рабочий канал устройства имеет в своем составе три микрополосковых резонатора: крайние резонаторы – регулярные и четвертьволновые, а средний резонатор является нерегулярным, полуволновым и составным. Электромагнитная связь между входным и выходным резонаторами в рабочей полосе частот осуществляется через третий резонатор, в центральной части которого, располагается управляющий элемент из пленки ВТСП. Как известно, при протекании по ВТСП пленке СВЧ тока, плотность которого превышает критическое значение, происходит фазовый переход ВТСП элемента из сверхпроводящего состояния в нормальное. Это приводит к падению добротности среднего резонатора, и взаимодействие крайних резонаторов через средний прерывается. В результате происходит ограничение проходящей мощности. Для увеличения емкостной связи между крайними резонаторами введен специальный элемент в виде шпильки.

На рисунке 1 слева приведена частотная зависимость прямых потерь макета разработанного устройства: сплошной линией для открытого режима работы, пунктиром – для закрытого (режим ограничения мощности). Из амплитудно-частотной характеристики видно, что центральные частоты рабочих полос устройства составляют 1.48 ГГц и 2.03 ГГц их относительные ширины - около 10%, прямые потери в них составляют 2 дБ, а обратные не хуже -14 дБ. В режиме ограничения мощности ослабление в рабочих полосах составляет не менее 30 дБ. Таким образом, входная мощность ослабляется устройством не менее, чем в 1000 раз. На рисунке 1 справа сплошной линией изображена зависимость выходной мощности от входной (передаточная характеристика), пунктирной линией – зависимость потерь на частоте 2 ГГц от уровня входной мощности. Видно, что передаточная характеристика линейна до входной мощности равной 20 дБм, выше этой мощности начинается резкий рост потерь в устройстве. Уровень просачивающейся мощности не превышает 8 мВт при входной мощности в 3.15 Вт.

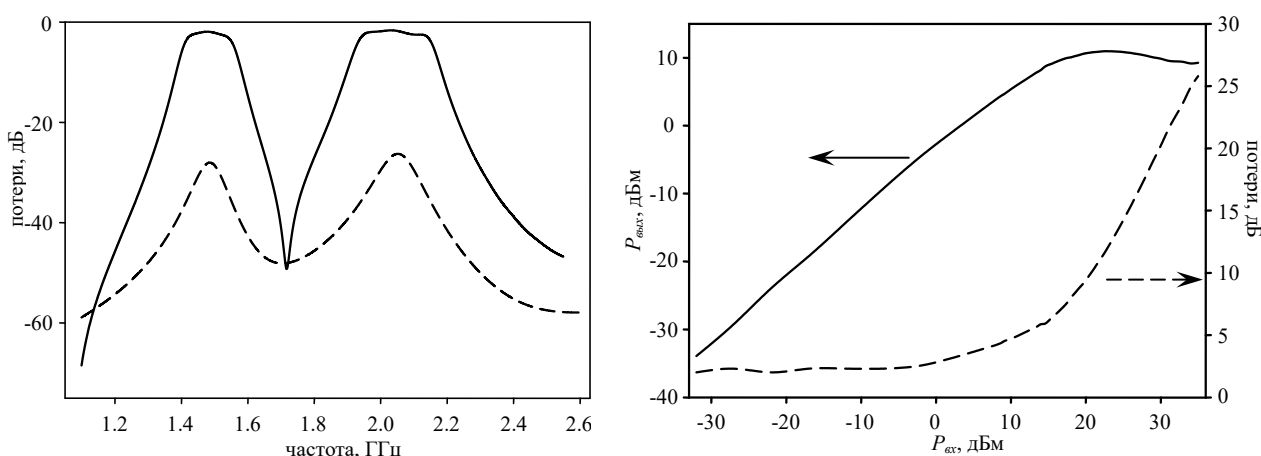


Рис 1. Слева - частотные зависимости коэффициентов прохождения устройства защиты: сплошная линия – в открытом, пунктирная линия – в закрытом состоянии. Справа – зависимость выходной мощности (сплошная линия) и потерь (пунктирная линия) от входной мощности

устройства защиты, измерения проведены на частоте 2.0 ГГц.

Используемая пленка ВТСП YBaCuO с критической температурой 88-89 К и плотностью критического тока  $10^6$  А/см<sup>2</sup>, наносилась на подложку Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> методом лазерного напыления, имела толщину 150 нм.

# МЕРА ЛОКАЛИЗАЦИИ И ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ В АНСАМБЛЕ ДВУХУЗЕЛЬНЫХ КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ С ПЕРЕХОДОМ АНДЕРСОНА

**Я.П. Стрельцов<sup>1\*</sup>, Е.И. Шнейдер<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М.Ф.

Решетнева, 660037, Красноярск, Россия

<sup>2</sup>Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия

\*e-mail: yaroslav\_str@mail.ru

Высказанные более 60 лет назад предположения Филипа Андерсона о локализации электронов в кристаллической решетке с беспорядком [1] породили множество теорий и экспериментов о природе перехода металл-диэлектрик и поведении волн в различных неупорядоченных средах. Идея оказалась плодотворной не только при описании диффузии электронов в аморфных или легированных полупроводниках, но и подготовила почву для поиска локализации Андерсона при распространении электромагнитных и даже сейсмических волн [2].

В рамках исследований перехода Андерсона в твердых телах особый интерес представляет случай конкурирующих тенденций к локализации. Такие тенденции могут быть обусловлены, например, сильным электрон-фононным или кулоновским взаимодействием. В то же время, свойства систем с сильными электронными корреляциями сильно зависят от допирования, как следствие, их исследование практически всегда тесно связано с эффектами беспорядка. При замене одного атома соединения другим возникает правильная подрешетка примесей, в узлах которой оседает разное число атомов, что приводит к формированию случайного узельного потенциала.

Известно, что в системе с сильными электронными корреляциями и беспорядком наблюдается переход типа Мотта-Хаббарда при слабом беспорядке и переход типа Андерсона при слабом кулоновском взаимодействии [3,4]. При этом взаимодействие кулоновских корреляций и беспорядка меняет характеристики переходов. Так, например, наличие беспорядка увеличивает критическое взаимодействие для перехода Мотта-Хаббарда и превращает резкий переход с гистерезисом в плавный. В области сосуществования промежуточных или сильных электронных корреляций и беспорядка наблюдается кроссовер между локализациями Мотта и Андерсона.

В настоящей работе рассмотрена двуорбитальная система с беспорядком, релевантная, например, для высокотемпературных сверхпроводников на основе оксидов меди. В реальных системах параметры кулоновского отталкивания могут кратно отличаться на различных орбиталях. Мы показали, что для ансамбля двухузельных систем это приводит к различным картинам переключения между режимами делокализованных и локализованных состояний.

Гамильтониан системы выглядит следующим образом:

$$H = \sum_{i=1,2} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \epsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - t \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^\dagger c_{1\sigma}) + \sum_{i=1,2} U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow},$$

где  $\epsilon_i$  – потенциальная энергия электрона на узле  $i$ , которая определяется случайно в интервале  $[-\frac{w}{2}; \frac{w}{2}]$ ,  $w$  – сила беспорядка;  $t$  – интеграл перескока между узлами 1 и 2;  $U_i$  – параметр кулоновского взаимодействия на заданном узле,  $U_1 \neq U_2$ .

В силу того, что в системе с беспорядком состояния имеют разную локализацию, для полноценного анализа системы необходимо, кроме локальной плотности состояний (DOS), использовать величину, которая показывает локализацию состояний – меру локализации (IPR – inverse participation ratio). Эта величина описывает распределение электронной

плотности между узлами кластера и меняется в пределах от 0 до 1 для полностью локализованных состояний.

При варьировании конкурирующих величин –  $w$  и  $U_1$  оказалось, что кроссовер от делокализованных состояний к локализованным происходит существенно различным образом. В первом случае, когда значение параметра кулоновского взаимодействия больше беспорядка, а верхняя зона Хаббарда отделена от других состояний энергетической щелью (Рис. 1а), переход к локализованным состояниям происходит скачком (Рис. 1б). Во втором случае, когда при уменьшении параметра кулоновского отталкивания щель между хаббардовскими подзонами заполняется некоррелированными состояниями (Рис. 2а), имеет место плавное изменение меры локализации (Рис. 2б) и непрерывный бесщелевой переход от делокализованных к локализованным носителям.

Таким образом, в многоорбитальной системе Мотта-Андерсона возникают новые особенности перехода металл-диэлектрик по сравнению с одноорбитальной моделью, что интересно с точки зрения варьирования характеристик перехода металл-диэлектрик в коррелированных системах.

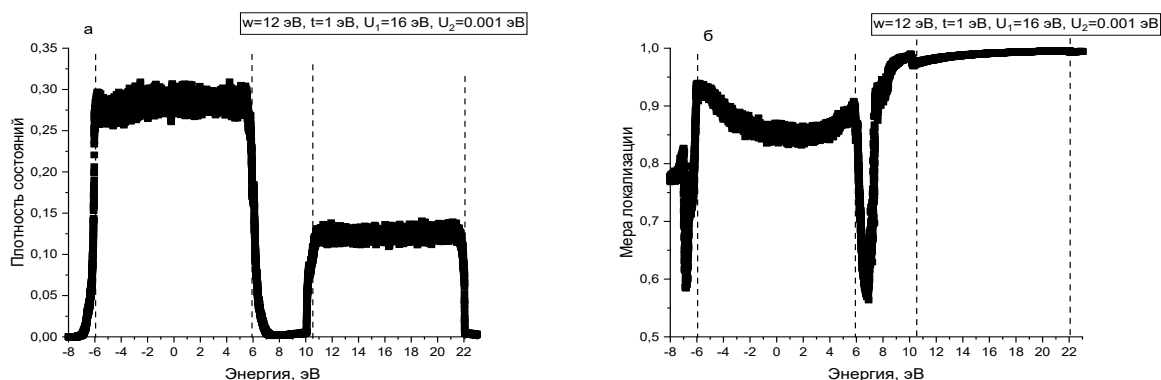


Рис. 1 – Плотность состояний (а) и мера локализации состояний (б)  $w = 12$  эВ,  $t = 1$  эВ,  $U_1 = 16$  эВ,  $U_2 = 0.001$  эВ

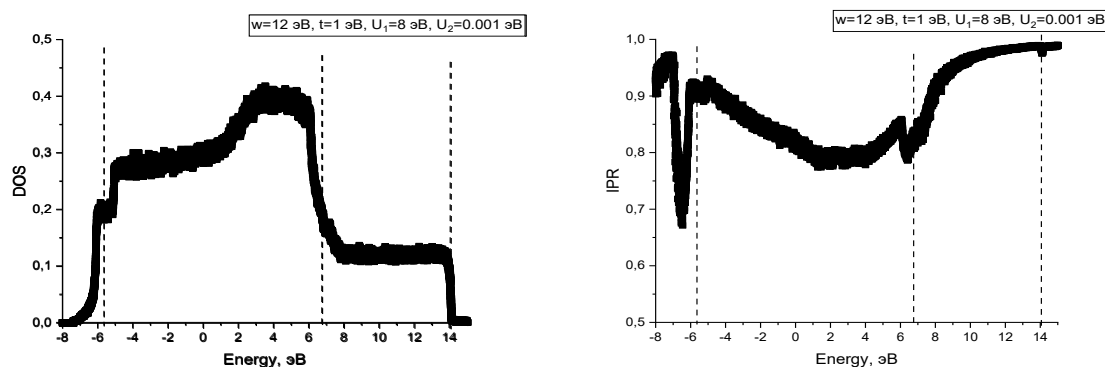


Рис. 2 – Плотность состояний (а) и мера локализации состояний (б)  $w = 12$  эВ,  $t = 1$  эВ,  $U_1 = 8$  эВ,  $U_2 = 0.001$  эВ

- [1] P.W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [2] A. Lagendijk, B. Tiggelen, D.S. Wiersma, Phys. Today **62** (8), 24, (2009).
- [3] N. Giovanni, M. Civelli, M.C.O. Aguiar, Phys. Rev. B **103**, 245134 (2021).
- [4] K. Buczuk, W. Hofstetter, D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **94**, 056404 (2005).

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛЯРОНОВ В СИЛЬНО  
КОРРЕЛИРОВАННОЙ СИСТЕМЕ**М.В. Зотова<sup>1\*</sup>, Е.И. Шнейдер<sup>2</sup>, С.В. Николаев<sup>1</sup>, С.Г. Овчинников<sup>1,2</sup>**<sup>1</sup>Сибирский федеральный университет, 660041, Красноярск, Россия<sup>2</sup>Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия\*e-mail: [zomav@mail.ru](mailto:zomav@mail.ru)

В настоящей работе в рамках развиваемого нами варианта кластерной теории возмущений [1] исследуется роль поляронных эффектов в системах с сильными электронными корреляциями и сильным электрон-фононным взаимодействием (ЭФВ) при формировании их электронной структуры. Реалистичную для сильно коррелированных систем двумерную электронную многозонную  $pd$ -модель мы дополняем ЭФВ диагонального и недиагонального типов в узельном представлении. Диагональный тип ЭФВ модулирует локальную плотность заряда на меди, недиагональный тип – интеграл перескока медь-кислород. При этом используются реалистичные параметры модели, полученные в работе [2] для системы  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  путем проектирования электронной структуры на базис функций Ванье в приближении локальной электронной плотности. Предлагаемый подход точно учитывает внутрикластерные вклады конкурирующих электрон-электронного и электрон-фононного взаимодействий и при формировании квазичастичных возбуждений позволяет рассматривать их в приближении сильной связи на равной основе.

На Рис. 1(а) представлена плотность состояний на уровне Ферми  $N(E_f)$  как функция диагонального  $\lambda_d$  параметра ЭФВ при фиксированном недиагональном  $\lambda_{pd}$ . Плавный переход металл-диэлектрик реализуется только в отсутствии недиагонального ЭФВ ( $\lambda_{pd} = 0$ ). Резкий переход к диэлектрическому состоянию возникает при наличии недиагонального вклада  $\lambda_{pd}$  и характеризуется различными типами эволюции электронной структуры поляронов и поверхности Ферми:

1-ый тип: с формированием сильной и слабой псевдощели (Рис. 1(а),  $\lambda_{pd} = 0,01 - 0,05$ ), сопровождающимся трансформацией поверхности Ферми от дырочных карманов к Ферми-аркам;

2-ой тип: с особенностью в плотности состояний на уровне Ферми в виде ступеньки, связанной с выталкиванием химического потенциала в зону проводимости, что сопровождается трансформацией топологии поверхности Ферми от дырочных карманов к электронным (Рис. 1(а),  $\lambda_{pd} = 0,1 - 0,3$ ).

На Рис. 1(б) представлена карта плавных и резких изменений кластерных функций полярона и биполярона. Кривые на Рис. 1(а) и линии на Рис. 1(б), обозначенные одинаковым цветом, соответствуют одним и тем же значениям недиагонального типа ЭФВ  $\lambda_{pd}$ . Как видно, поведение плотности состояний  $N(E_f)$  однозначно коррелирует с областями плавных и резких изменений свойств полярона и биполярона в кластере. Так диэлектрическое состояние системы с эволюцией электронной структуры 1-ого типа формируется в диапазоне параметров ЭФВ  $\lambda_{pd}^B < \lambda_{pd} < \lambda_{pd}^A$  при переходе линии резкого кроссовера биполярона (кривая  $BB_2$ ), выше которой биполярон локализован на атоме меди. Здесь  $\lambda_{pd}^A$  и  $\lambda_{pd}^B$  обозначают координаты критических точек А и В для полярона и биполярона соответственно. Область между кривыми  $A_1A$  и  $B_1B$ , где наблюдается псевдощелевое состояния, формируется вследствие сильного кулоновского отталкивания электронов и является особенностью сильно коррелированных систем.

2-ой тип эволюции электронной структуры поляронов обнаружен при  $\lambda_{pd} > \lambda_{pd}^A$ . Здесь падение плотности состояний  $N(E_f)$  в виде ступеньки в металлическом состоянии происходит при пересечении линии резкого изменения биполяронных свойств (кривая  $BB_2$ ). Вероятно, это связано с частичной локализацией носителей заряда. Выше линии

резкого кроссовера поляронных характеристик (кривая  $AA_2$ ) система переходит в диэлектрическое состояние, где, по-видимому, локализуются все носители заряда.

Обобщение полученных результатов представлено на фазовой диаграмме (Рис. 1(в)).

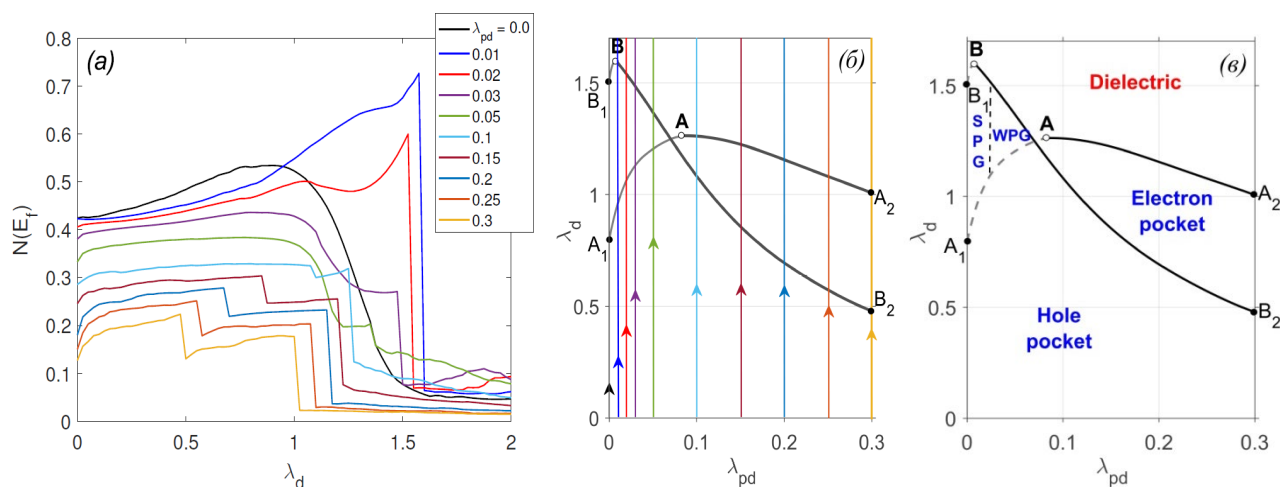


Рис. 1 (а) Плотность состояний на уровне Ферми слабодопированной системы. (б) Соответствие типов перехода металл-диэлектрик областям плавного и резкого изменения функций полярона и биполярона в кластере. А и В – точки разрыва функций полярона и биполярона в основных состояниях соответственно.  $A_1A$  и  $B_1B$  – линии перегиба поляронных и биполяронных свойств как функции диагонального  $\lambda_d$  электрон-фоонного взаимодействия при фиксированном недиагональном  $\lambda_{pd}$ .  $AA_2$  и  $BB_2$  – линии резкого кроссовера для полярона и биполярона. (в) Обобщающая фазовая диаграмма поляронной системы: WPG и SPG – слабая и сильная псевдощель, hole pocket и electron pocket – дырочные и электронные карманы на поверхности Ферми.

- [1]. Е. И. Шнейдер, И. А. Макаров, М. В. Зотова, С. Г. Овчинников, ЖЭТФ 153, 820 (2018).
- [2]. М. М. Korshunov, V. A. Gavrichkov, S. G. Ovchinnikov et al., Phys. Rev. B 72, 165104 (2005).

## ВЗАИМОСВЯЗЬ МОРФОЛОГИИ И МЕХАНИЗМОВ ТРАНСПОРТА НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТАХ

**В.А. Кузнецов**

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 630090, Новосибирск, Россия*

*Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск, Россия*

e-mail: [vitalii.a.kuznetsov@gmail.com](mailto:vitalii.a.kuznetsov@gmail.com)

Композиционные материалы на основе диэлектрических полимерных матриц с электропроводящими наноструктурированными наполнителями являются перспективными материалами для электронной техники. Благодаря ряду физико-механических свойств данные материалы в ряде областей применения могут стать заменой традиционным для электроники металлическим и полупроводниковым материалам. Механические свойства полимеров, их способность не разрушаться при развитых, повышенных и больших деформациях, обуславливают их перспективы. Так, например, традиционные полупроводниковые материалы не способны выдерживать деформации более единиц процентов, для металлических материалов предельные деформации выше, однако им свойственна ползучесть. Тип полимерной матрицы определяет набор свойств композиционного материала, и его выбор обуславливается конкретными целевыми задачами, под решение которых создается композит. Например, модуль упругости композитов может варьироваться от значений близких к значениям кожи человека (для носимой электроники) до модуля в единицы и десятки ГПа. Температурные свойства полимерных композитов также зависят в большинстве случаев от типа полимера, поскольку наиболее перспективные для полимерных композитов углеродные нанонаполнители, такие как углеродные одностенные и многостенные нанотрубки, высокорасщепленный графит, графитовые наночастицы, частицы восстановленного оксида графена, обладают большей температурной устойчивостью, чем полимеры.

В зависимости от типов полимерной матрицы и наполнителя, а также от способа формирования композитов их морфология, то есть взаимное расположение частиц наполнителя друг относительно друга и относительно матрицы, может отличаться. Одним из зарекомендовавших себя способов формирования композитов является формирование их из коллоидных систем (дисперсий) наночастиц наполнителя в растворах полимеров. В зависимости от типа используемого растворителя и типа взаимодействия между макромолекулами полимера с поверхностью наночастиц наполнителя в процессе ультразвуковой обработки их в жидкой среде исходные агломераты наночастиц могут быть разделены на отдельные наночастицы, либо оставаться в виде агломератов. Соответственно по высушивании дисперсий наночастицы могут либо иметь непосредственный контакт друг с другом в композиционном материале, либо быть разделены полимерными прослойками. Такое разделение частиц диэлектрическими прослойками, а также характер электропроводности самих наночастиц отражается на температурных зависимостях электросопротивления композитов. Анализ температурных зависимостей в совокупности с данными, полученными методами электронной микроскопии, позволяет сделать вывод о морфологии композитов. Знание морфологии, в свою очередь, позволяет определить перспективы использования композитов в тех или иных прикладных задачах электроники, то есть позволяет разработать научно обоснованные подходы по созданию элементной базы электроники.

В работе приводятся результаты исследования композитов на основе полимерных матриц полибензимидазола и ароматического полиамида с углеродными нанотрубками и графитовыми наночастицами, на основе матрицы биосовместимого хитозана с графеном, а также композитов сегрегированной сетчатой структуры с восстановленным оксидом графена.



## ЭЛЕКТРОННАЯ И МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА СИСТЕМЫ ГРАФЕН/Fe(110)

А.В. Бакулин<sup>1\*</sup>, С.Е. Кулькова<sup>1,2</sup>, С. Хокер<sup>3</sup><sup>1</sup>Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 634055, Томск, Россия<sup>2</sup>Томский государственный университет, 634050, Томск, Россия<sup>3</sup>Институт функциональных материалов и квантовых технологий, Штутгартский университет, 70550, Штутгарт, Германия\*e-mail: [bakulin@ispms.ru](mailto:bakulin@ispms.ru)

Электронная структура и энергия связи графена с различными металлами неоднократно изучались методами из первых принципов. Было показано, что характер взаимодействия графен–металл напрямую зависит от самого металла. Так на поверхности (111) металлов Co, Ni, Pd, Ru и Ti имеет место хемосорбция графена, тогда как в случае Al, Ag, Cu, Au, Ir и Pt происходит его физадсорбция. На поверхности (111) магнитных металлов, таких как Ni, Co и  $\gamma$ -Fe, межатомное взаимодействие углерод–металл индуцирует возникновение магнитного момента на атомах углерода, тогда как магнитные моменты интерфейсных атомов металла значительно уменьшаются. Границы раздела графен/ $\alpha$ -Fe практически не изучались теоретическими и экспериментальными методами из-за большого несоответствия решеток и сложности практического получения таких структур. Методом химического осаждения из газовой фазы лист графена на поверхности  $\alpha$ -Fe(110) впервые был получен в работе [1]. В этой же работе авторы показали, что полученный таким образом лист графена является гофрированным. В работе [2] исследовалась другая граница раздела графен/ $\alpha$ -Fe(110), отличающаяся положением ориентацией графена на поверхности, который являлся плоским. Впервые *ab initio* методом граница раздела графен/ $\alpha$ -Fe(110) изучалась в работе [3]. Было рассмотрено три варианта интерфейса: первый соответствовал структуре, предложенной в [2], два других – границе раздела из работы [1], но отличались конфигурацией контакта. Расчеты [3] подтвердили гофрирование графена в случае *hollow*-конфигурации контакта. В работе [3] также изучалось влияние одиночных вакансий на адгезию на границе раздела. Было установлено, что вакансии углерода приводят к повышению адгезии вследствие увеличения ковалентного вклада во взаимодействие C–Fe, особенно для атомов углерода ближайших к вакансии. Целью настоящей работы являлось изучение влияния примесей бора и азота на адгезию на интерфейсе графен/ $\alpha$ -Fe(110) и его электронную структуру.

Расчеты границы раздела графен/Fe(110) проводились методом проекционных присоединенных волн [4] с обобщенным градиентным приближением для обменно-корреляционного функционала [5]. Максимальная энергия плоских волн из базисного набора была равна 500 эВ. Проводились спин-поляризованные расчеты с дисперсионными поправками DFT-D2 [6] для учета Ван-дер-Ваальсовского взаимодействия. Глобальный параметр масштабирования  $S_6$  был равен 0.75. Работа отрыва ( $W_{\text{sep}}$ ) рассчитывалась по стандартной формуле: чем больше значение  $W_{\text{sep}}$ , тем прочнее связь на границе раздела. Лист графена моделировался как на поверхности  $\alpha$ -Fe(110), так и в объеме железа. В последнем случае использовалась модель с листом графена между двумя пленками железа. Примеси располагались в двух позициях: непосредственно над атомом железа – *t* и между двумя атомами железа – *b*.

Расчеты показали, что примесь бора повышает работу отрыва как на поверхности, так и в объеме независимо от конфигурации контакта, хотя на поверхности его эффект выражен сильнее (Табл. 1). Необходимо отметить, что в случае нелегированного графена работа отрыва составляет 1.28 Дж/м<sup>2</sup> на поверхности Fe(110) и 1.18 Дж/м<sup>2</sup> в объеме. Примесь азота практически не влияет на адгезию на поверхности, тогда как в объеме железа работа отрыва уменьшается на 0.04–0.07 Дж/м<sup>2</sup> (Табл. 1). Анализ распределения связей C–Fe по длинам показал, что появление бора в *t*-позиции приводит к более равномерному распределению связей по длинам, тогда как в случае *b*-позиции происходит уменьшение числа длинных

Табл. 1. Изменение адгезии на  
интерфейсе графен/ $\alpha$ -Fe(110)  
вследствие легирования

Примесь	Конфигурация	$W_{\text{sep}}$ , Дж/м <sup>2</sup>	
		Поверхность	Объем
B	<i>t</i>	0.12	0.04
	<i>b</i>	0.15	0.06
N	<i>t</i>	–0.01	–0.04
	<i>b</i>	0.01	–0.07

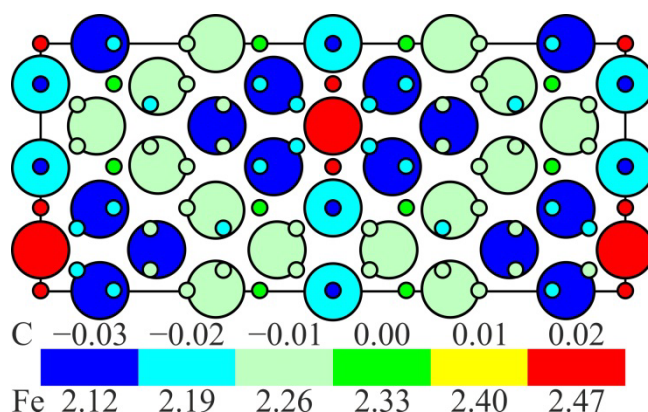


Рис. 1. Магнитные моменты интерфейсных атомов С (маленькие шары) и Fe (большие шары) на идеальном интерфейсе графен/Fe(110).

связей и увеличение коротких. Азот практически не приводит к изменению распределения связей С–Fe по длинам для обеих позиций. Легирование графена в объеме Fe индуцирует появление новых связей длиной 2.6–2.7 Å независимо от примеси и ее положения.

Поскольку электроотрицательность бора ниже, чем углерода, а азота, напротив, выше, то эти примеси в графене играют роль соответственно донора и акцептора электронной плотности. Это приводит к тому, что на поверхности Fe(110) ближайшие к бору атомы углерода получают в зависимости от его позиции на 0.53–0.58e больший заряд, чем на идеальном интерфейсе. В то же время, в случае азота эти атомы отдают заряд, равный 0.19–0.24e по сравнению с нелегированным графеном. В случае объема железа изменение зарядового состояния атомов углерода чуть более выражено, тогда как заряды интерфейсных атомов Fe практически не изменяются на границах раздела обоих типов. Магнитный момент атома бора практически равен нулю для обеих позиций, тогда как в случае атома азота он достигает –0.02  $\mu_B$  и –0.03  $\mu_B$  для *t* и *b* позиций, соответственно. Интересно, что в *t*-позиции примесь бора повышает магнитный момент ближайших атомов железа на ~ 0.1  $\mu_B$ , а *b*-позиции, напротив, понижает на ту же величину. Аналогичный эффект оказывает примесь азота. В работе также анализируются локальные плотности электронных состояний интерфейсных атомов и их изменения при легировании графена.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, проект FWRW-2022-0001.

- [1] N.A. Vinogradov, A.A. Zakharov, V. Kocovski et al., Phys. Rev. Lett. **109**, 026101 (2012)
- [2] P. Restuccia, M.C. Righi, Carbon. **106**, 118 (2016)
- [3] S. Hocker, H. Lipp, S. Schmauder et al., Appl. Surf. Sci. **598**, 153714 (2022)
- [4] G. Kresse, D. Joubert, Phys. Rev. B **59**, 1758 (1999)
- [5] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996)
- [6] S. Grimme, J. Comput. Chem. **27**, 1787 (2006)

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БУФЕРНОГО СЛОЯ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ НА КРЕМНИИ  
ДЛЯ CVD СИНТЕЗА ВЕРТИКАЛЬНО ОРИЕНТИРОВАННЫХ МАССИВОВ УНТ****А.М. Кондранова<sup>1,2\*</sup>, Д.В. Городецкий<sup>2</sup>, А.В. Окотруб<sup>2</sup>**<sup>1</sup>НГУ, ул. Пирогова 2, Новосибирск, 630090, Россия<sup>2</sup>ИНХ СО РАН, просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090, Россия\*e-mail: [a.kondranova@gmail.com](mailto:a.kondranova@gmail.com)

На сегодняшний день углеродные нанотрубки (УНТ) эффективно выращивают методом химического осаждения из газовой фазы (CVD). Для получения массивов на металлических подложках зачастую используется буферный слой, нанесенный на подложку. Одним из вариантов переходного слоя является алюминий, сформировать который можно путем термического разложения пленки оксид алюминия. Массивы УНТ могут использоваться в различных применениях, например, для создания суперконденсаторов [1], полевых эмиттерах, в дисплеях с плоским экраном [2], электрических соединений в наноразмерных устройствах [3], и супергидрофобных поверхностях для самоочищающихся покрытий.

В этой работе мы получали вертикально ориентированные массивы УНТ с добавлением оксид алюминия на кремниевой подложке. В качестве буферного слоя использовался водный раствор оксид алюминия, который наносился с помощью спин-коутера на подложку из кремния. Реакционная смесь состояла из смеси толуола и ферроцена, а газовая смесь состояла из Ar-H<sub>2</sub>. Температура синтеза составляла 800°C. При повышении содержания водорода в реакционной среде до 30% снижается образование аморфного углерода, что приводит к росту малодефектных вертикально ориентированных массивов УНТ высотой до 20 мкм. Морфология синтезированных УНТ была изучена методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) и также была проведена спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС).

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (121031700314-5).

[1] K. Moyer-Vanderburgh, S. J. Park, F Fornasiero. Carbon **206**, 402-421 (2023)

[2] A. Thapa, Y.R. Poudel, R. Guo, K.L. Jungjohann, X. Wang, W. Li, Carbon **171**, 188 (2021)

[3] Y. Luo, X. Wang, M. He, X. Li, H. Chen, J. Nanomater 2012, 542582 (2012).

## МЕХАНИЗМЫ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ В ТЕПЛОСТОЙКИХ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТАХ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

**А.А. Федоров<sup>1,2\*</sup>, В.А. Кузнецов<sup>1,2</sup>, Б.Ч. Холхоев<sup>3</sup>, В.Ф. Бурдуковский<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 630090, Новосибирск, Россия

<sup>2</sup>Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск, Россия

<sup>3</sup>Байкальский институт природопользования СО РАН, 670047, Улан-Уде, Россия

\*e-mail: [andrew.fedorov\\_1999@mail.ru](mailto:andrew.fedorov_1999@mail.ru)

В настоящее время практический и научный интерес представляют полимерные композиционные материалы (ПКМ). Такие материалы находят множество применений в различных областях от бытовой электроники до аэрокосмостроения. В электронике развитие получила сфера по созданию гибкой и носимой электроники, в рамках которой создаются в том числе сенсоры измерения механических величин, тензорезисторы. В данной работе рассмотрены перспективы применения в высокотемпературной тензометрии ПКМ на основе теплостойких полимерных матриц с углеродными наноструктурированными наполнителями, определена их морфология и ее влияние на электропроводность. Для создания элементов для задач высокотемпературной тензометрии перспективными являются полимерные матрицы ароматического полиамида и полибензимидазола, имеющие высокие температуры стеклования. В качестве электропроводящей фазы для создания ПКМ использованы одностенные и многостенные углеродные нанотрубки (ОУНТ, МУНТ). В рамках настоящей работы были получены и исследованы композиты с содержаниями ОУНТ от 0,1 до 5 % (масс.) и композиты с содержаниями МУНТ от 1 до 10 % (масс.). С фундаментальной и практической точки зрения принципиально важно знание морфологии композитов. В рамках работы морфология была определена на основании данных, полученных из температурных зависимостей электросопротивления  $R(T)$ , измеренных в диапазоне от 4,2 до 573 К, и по изображениям, полученным методом сканирующей электронной микроскопии.

В случае ПКМ на основе полибензимидазола в матрице наблюдаются отдельные нанотрубки, их однородное распределение в полимерной матрице и расщепление исходных пучков нанотрубок обусловлено  $\pi$ - $\pi$  взаимодействием макромолекул полимера с поверхностью нанотрубок [1], при ультразвуковой обработке нанотрубок в растворе полибензимидазола в N-метил-2-пирролидоне (МП) за счет такого взаимодействия происходит расщепление исходных пучков нанотрубок на отдельные нанотрубки. Соответственно при получении пленочных образцов композитов (традиционным методом полива из раствора) нанотрубки остаются отделенными друг от друга. Композиты на основе полибензимидазола с МУНТ являются непроводящими. В случае композитов на основе матрицы ароматического полиамида нанотрубки находятся в пучках. В случае использования ароматического полиамида наблюдается меньшая устойчивость коллоидных дисперсий нанотрубок в растворе ароматического полиамида в МП по сравнению с дисперсиями в растворе полибензимидазола, а также более слабые зависимости  $R(T)$  полученных композитов.

Температурная стабильность образцов была подтверждена термоциклированием в условиях высокого вакуума и на воздухе. Со второго и последующего циклов нагрева-отжига температурные зависимости электросопротивления повторяют друг друга. Тензорезистивные свойства были исследованы растяжением пленок композитов. В случае композитов с ОУНТ наблюдается гистерезис зависимостей электросопротивления-деформация (относительное удлинение). В композитах на основе матрицы ароматического полиамида с МУНТ гистерезис не наблюдается.

[1] Okamoto M., Fujigaya T., Nakashima N., Adv. Funct. Mater. **18**, 12 (2008)

## ВЛИЯНИЕ ХИМИЧЕСКОЙ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ НА ИХ ОПТИЧЕСКИЕ И ТЕРМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

**О.А. Гурова<sup>\*</sup>, О.В. Седельникова, Е.В. Шляхова, А.В. Окотруб**

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 630090, Новосибирск, Россия*

<sup>\*</sup>e-mail: [gurova@niic.nsc.ru](mailto:gurova@niic.nsc.ru)

Терапевтическое лечение опухолей с использованием лазерной абляции разрабатывается с использованием различных углеродных наноматериалов (УН). УН могут легко интернализироваться клетками и выступать в качестве средств доставки лекарств и визуализирующих агентов [1]. Они способны эффективно поглощать и преобразовывать инфракрасное излучение в тепло, необходимое для локального разогрева тканей и органов, поэтому, их можно применять для предотвращения роста опухоли методом гипертермии.

В данной работе использовались коммерческие ОУНТ (TUBALL<sup>TM</sup>), приобретенные в компании OCSiAl и углеродные нанохорны, синтезированные методом электродугового синтеза. Для открытия углеродных «шапочек» образцы ОУНТ прокаливались при 500°C на открытом воздухе. Удаление каталитического железа производилось с помощью комбинированного метода очистки с использованием соляной кислоты и магнитной сепарации [2]. ОУНТ были заполнены серой с помощью ампульного метода [3]. Для определения количества инкапсулированной серы, часть ОУНТ после заполнения обрабатывали толуолом чтобы смыть поверхностную серу.

Структура УН была охарактеризована методами сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии, спектроскопией комбинационного рассеивания света, оптической и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопией. Были измерены оптические и термические свойства водных суспензий образцов нанотрубок и нанохорнов. Было изучено проникновение УН в биологические ткани личинок дрозофилы.

Авторы благодарят Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, проект 121031700314-5.

[1] R. Singh, S.V. Torti, Adv Drug Deliv Rev., **65**(15), 2045–2060 (2013).

[2] O.A. Gurova, V.E. Arhipov, V.O. Koroteev, T.Ya. Guselnikova, I.P. Asanov, O.V. Sedelnikova, A.V. Okotrub, Phys. Status Solidi B.1800742 (2019).

[3] O.V. Sedelnikova, O.A. Gurova, A.A. Makarova, A.D. Fedorenko, A.D. Nikolenko, P.E. Plyusnin, R. Arenal, L.G. Bulusheva and A.V. Okotrub, **10**(5), 818 (2020).



## ВЛИЯНИЕ МОРФОЛОГИИ НА МЕХАНИЗМЫ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ В ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТАХ СЕГРЕГИРОВАННОЙ СЕТЧАТОЙ СТРУКТУРЫ С ВОССТАНОВЛЕННЫМ ОКСИДОМ ГРАФЕНА

**В.А. Ермаков<sup>1,2,\*</sup>, В.А. Кузнецов<sup>1,2</sup>, К.А. Шиянова<sup>3</sup>, М.В. Гудков<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 630090, Новосибирск, Россия

<sup>2</sup>Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск, Россия

<sup>3</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, 119991, Москва, Россия

\*e-mail: [vova.ermakov111@gmail.com](mailto:vova.ermakov111@gmail.com)

Полимерные композиты сегрегированной сетчатой структуры с наноструктурированными электропроводящими наполнителями в последнее время привлекают все большее внимание благодаря их высокой электропроводности, сверхнизкому порогу перколяции (менее 0,1 об.%) и хорошим физико-механическим характеристикам. Это достигается за счет того, что проводящий наполнитель заведомо неравномерно распределен в полимерной матрице и образует непрерывные перколяционные сети в объеме композита, а полимерные домены, не содержащие наполнитель, образуют матрицу с некоторым количеством спаек между ними, что принципиально отличается от традиционных полимерных композитов, в которых проводящая фаза равномерно распределена в объеме полимера.

В данной работе проведено исследование температурных зависимостей электросопротивления композитов сегрегированной сетчатой структуры, в качестве диэлектрических полимерных матриц которых были использованы сверхвысокомолекулярный полиэтилен (СВМПЭ), фторопласт-42 (Ф-42) и поливинилхлорид (ПВХ), а в качестве электропроводящей фазы – частицы восстановленного оксида графена (ВОГ), полученного путем химического восстановления оксида графена парами гидразина. Гранулы полимеров сначала покрывались оксидом графена (ОГ), затем ОГ восстанавливался до ВОГ, и после полученный порошок прессовался в объемные образцы при температурах близких к температурам плавления соответствующих полимеров. Подробности получения образцов композитов описаны в работе [1].

Измерение зависимостей электросопротивления от температуры проводилось четырехконтактным методом в транспортном сосуде Дьюара с жидким гелием в температурном диапазоне от 4,2 до 293 К. Также, для определения морфологии образцов были получены изображения с помощью методов оптической, сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии.

Результаты исследования температурных зависимостей электросопротивления были сопоставлены с данными, полученными методами оптической и электронной микроскопии на тонких срезах композитов. Такой подход позволил в совокупности с представлением о структуре полимеров описать существенные отличия температурных зависимостей электросопротивления композитов и тем самым определить характер распределения проводящей фазы в композитах в зависимости от типа используемого полимера, содержания ВОГ и условий формирования композитов. Установленное таким образом взаимное расположение графеновых листов в путях протекания тока через композиты будет иметь принципиальное значение при разработке подходов по изготовлению таких материалов для практических применений, например, для антистатических элементов в электронных устройствах или суперконденсаторах в энергетике.

[1] Shiyanova K.A., Gudkov M.V., Gorenberg A.Y. et al. // ACS Omega. 2020. V. 5, N 39. P. 25148-25155.

ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ИНТЕРКАЛИРОВАННЫХ  
СОЕДИНЕНИЙ ФТОРИРОВАННЫХ ГРАФИТОВ

**М.А. Гребёнкина<sup>1,2\*</sup>, Г.Н. Чехова<sup>1</sup>, Д.В. Пинаков<sup>1</sup>, А.Н. Лавров<sup>1</sup>, Л.Г. Булушева<sup>1</sup>,  
А.В. Окотруб<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> *Институт неорганической химии им. А.В. Николаева, 630090, Новосибирск, Россия*

<sup>2</sup> *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, Россия*

\*e-mail: grebenkina@niic.nsc.ru

Фторирование графита позволяет получить материалы, которые находят применение в электрохимии [1] и иных приложениях. Среди способов синтеза фторированного графита выделяется низкотемпературное фторирование как относительно простой метод, который позволяет получать непердельные фторированные графиты  $\text{CF}_x$ , где  $x \leq 0,5$ . Структура таких материалов характеризуется распределением атомов фтора по слоям графита в виде цепочек, а также возможностью внедрения посторонних молекул в межслоевое пространство. Длина цепочек из атомов фтора и форма и размер нефторированных участков (сопряжённых  $\pi$ -систем из атомов углерода в  $\text{sp}^2$ -гибридизации) зависят от степени фторирования [2].

Структурные особенности и состав непердельных интеркалированных фторированных графитов отражаются на таких свойствах материала, как проводимость, механических свойствах, диэлектрическая проницаемость. В частности, фторирование графита приводит к изменению его магнитных свойств. Присоединение атомов фтора к графеновой плоскости разбивает сопряжённую  $\pi$ -систему, что проявляется в уменьшении вклада орбитального диамагнетизма и увеличении доли парамагнетизма Кюри, не связанного с  $\pi$ -электронами [3,4]. Таким образом, анализ магнитных свойств даёт возможность дополнить представление о характере распределения атомов фтора, а также о том, какое влияние оказывают внедрённые в межслоевое пространство молекулы на фторграфитовую матрицу.

В настоящей работе были проведены исследования магнитных свойств фторированных графитов  $\text{CF}_x$ , где  $0,04 < x < 0,52$ , с внедрёнными бромом  $\text{Br}_2$ , ацетонитрилом  $\text{CH}_3\text{CN}$  и четырёххлористым углеродом  $\text{CCl}_4$ , полученными фторированием в парах смеси брома  $\text{Br}_2$  и трифторида брома  $\text{BrF}_3$  при комнатной температуре [5]. Проведено моделирование магнитной восприимчивости фторированных графитов и выделены вклады орбитального диамагнетизма и парамагнетизма Кюри. Показана применимость описания Котосонова для дефектных графитовых структур [6] для моделирования орбитального диамагнетизма фторированного графита. Продемонстрировано постепенное уменьшение величины орбитального диамагнетизма при увеличении содержания фтора и незначительность данного вклада для  $\text{CF}_x$ , где  $x \geq 0,3$ , что может быть связано с тем, что нефторированные участки для этих составов в основном разбиты атомами углерода в  $\text{sp}^3$ -гибридизации (связанными с фтором). При этом внедрённые молекулы на орбитальный диамагнетизм влияния не оказывают. Также внедрение ацетонитрила и четырёххлористого углерода в межслоевое пространство фторированного графита не приводит к изменению концентрации парамагнитных центров (величины константы Кюри). Однако в случае материалов с внедрённым бромом можно предположить влияние брома на концентрацию парамагнитных центров материала вследствие переноса заряда с нефторированных участков на молекулы брома в межслоевом пространстве.

Авторы благодарят Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, проект 121031700314-5.

[1] J. V. Rani, V. Kanakaiah, T. Dadmal, M. Srinivasa Rao, S. Bhavanarushi, J. Electrochem. Soc. **160**, 10 (2013)

[2] A. Vyalikh, L.G. Bulusheva, G.N. Chekhova, D.V. Pinakov, A.V. Okotrub, U. Scheler, J. Phys. Chem. C **117**, 15 (2013)



- [3] K. Takai, H. Sato, T. Enoki, N. Yoshida, F. Okino, H. Touhara, M. Endo, J. Phys. Soc. Japan **70**, 1 (2001)
- [4] R.R. Nair, M. Sepioni, I-Ling Tsai, O. Lehtinen, J. Keinonen, A. V. Krasheninnikov, T. Thomson, A.K. Geim and I.V. Grigorieva, Nature Physics **8**, 3 (2012)
- [5] G.N. Chekhovaa, D.V. Pinakov, Yu.V. Shubin, V.P. Fadeeva, V.D. Tikhova, A.V. Okotrub, L.G. Bulusheva, J. Fluor. Chem. **232** (2020)
- [6] A.S. Kotosonov, JETP Lett. **43**, 1 (1986)

## ВЗАИМОСВЯЗЬ МЕЖДУ ТЕНЗОРЕЗИСТИВНЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ И МЕХАНИЗМАМИ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ В БИОСОВМЕСТИМЫХ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТАХ

**Д.И. Гапич<sup>1,2\*</sup>, В.А. Кузнецов<sup>1,2</sup>, А.С. Буинов<sup>3</sup>, Б.Ч. Холхоев<sup>3</sup>, В.Ф. Бурдуковский<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 630090, Новосибирск, Россия*

<sup>2</sup>*Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск, Россия*

<sup>3</sup>*Байкальский институт природопользования СО РАН, 670047, Улан-Удэ, Россия*

e-mail: [dmitry.gapich@mail.ru](mailto:dmitry.gapich@mail.ru)

В настоящее время все большее внимание уделяется композиционным материалам, состоящим, в частности, из диэлектрической полимерной матрицы и электропроводящих наноструктурированных наполнителей. Интерес к данным материалам обусловлен возможностью их использования в качестве функциональных материалов для создания элементов современной электроники и электронных устройств. Например, для создания чувствительных элементов тензорезисторов, так как традиционные металлические и полупроводниковые тензорезисторы не могут быть многократно использованы при больших деформациях (до единиц и десятков процентов относительного удлинения). Возможность использования различных полимерных матриц, наполнителей, а также дополнительных добавок позволяет получать полимерные композиционные материалы с требуемыми свойствами.

Для изготовления биосовместимых имплантируемых тензорезисторов одним из перспективных решений являются композиты на основе диэлектрической матрицы хитозана с добавлением наноструктурированных углеродных частиц.

В данной работе представлены результаты исследования композитов на основе хитозана и графена с добавлением поливинилпирролидона и Pluronic-F108 в качестве поверхностно-активных веществ (ПАВ). Использование ПАВ, ввиду гидрофильных свойств хитозана и гидрофобных свойств графеновых частиц, позволило получить устойчивые коллоидные дисперсии графеновых частиц в растворе хитозана. Далее традиционным методом полива из раствора были получены пленочные образцы композитов. Подробности получения экспериментальных образцов композитов описаны в работах [1, 2]. Содержание графена в композитах составляло от 2 до 5% (масс.).

В рамках настоящей работы были исследованы температурные зависимости электросопротивления в диапазоне температур от 4,2 до 300 К, а также тензорезистивные свойства при малых и повышенных деформациях (до 40% относительного удлинения). На основе полученных данных была установлена морфология композитов – проводящие частицы графена в композитах разделены диэлектрическими прослойками, при этом в случае максимальных содержаний наблюдается непосредственный контакт между частицами.

Физическая природа наблюдаемого тензорезистивного эффекта заключается в изменении площади перекрытий между частицами при деформации, при этом чем меньше содержание частиц проводящей фазы в композитах, тем большее изменение электросопротивления при деформации наблюдается. Полученные значения коэффициента тензочувствительности, а также работоспособность при больших деформациях говорит о перспективности использования данных композитов в качестве чувствительных элементов биосовместимых тензорезистивных элементов.

[1] B.Ch. Kholkhoev, A.S. Buinov, S.A. Bal'zhinov [et al.]. Polym. Sci. - A, **60** (5), P. 678-682 (2018)

[2] B.Ch. Kholkhoev, A.S. Buinov, S.A. Bal'zhinov [et al.]. Polym. Sci. - A, **59** (2), P. 223-227 (2017)

# ТУННЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ЧЕРЕЗ АНДЕРСОНОВСКИЙ КВАНТОВЫЙ ДОТ С ПРОИЗВОЛЬНО СИЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

**А. Б. Ключанцев<sup>1\*</sup>, Д. М. Дзедзисашвили<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия

\*e-mail: [a.klyuchantsev@yandex.ru](mailto:a.klyuchantsev@yandex.ru)

Исследование квантового транспорта электронов в наноструктурах, таких как квантовые точки (КТ), квантовые ямы, углеродные нанотрубки и даже отдельные молекулы, в настоящее время представляет большой интерес. Упомянутые структуры атомного масштаба часто рассматриваются не только как наноустройства, перспективные для будущих практических применений, но и как удобные платформы для изучения фундаментальных физических свойств вещества на наноуровне [1].

В работе развивается теория квантового транспорта электронов через системы атомного масштаба со сколь угодно сильным взаимодействием. Теория основана на диаграммной технике для неравновесных функций Грина, определенных на операторах Хаббарда. Ранее такой подход развивался в работах [2-5]. Главное отличие предлагаемого нами подхода состоит в использовании операторов Хаббарда, описывающих многочастичные состояния всей КТ. Это позволяет представить гамильтониан системы в универсальной диагональной форме и рассмотреть его связь с двумя контактами в рамках теории возмущений единым образом. Показано, что в случае, когда все операторы Хаббарда определены на многочастичных состояниях одного и того же узла (КТ), некоторые правила диаграммной техники для операторов Хаббарда, первоначально разработанные для решетчатых моделей, должны быть изменены.

В качестве примера применения модифицированной теории рассчитаны вольт-амперные характеристики модели Андерсона с одной примесью и с бесконечно большим кулоновским отталкиванием. Показано, что учет процессов многократного туннелирования электронов со переворотами спинов (изначально отсутствующих в гамильтониане и возникающих спонтанно) приводит к провалу в центре

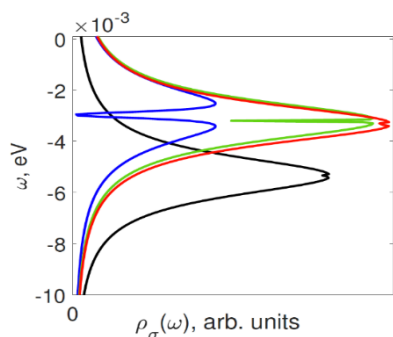


Рис. 1. Плотность состояний Андерсоновской КТ для различных температур и взаимодействий

пика  
распределения  
Лоренца,  
описывающего  
плотность  
состояний

одноуровневой примеси Андерсона, связанной с двумя контактами (рис. 1). Численные расчеты показали, что возникновение этого провала в плотности состояний приводит к своеобразной особенности в зависимости дифференциальной проводимости от напряжения смещения, которая может быть обнаружена экспериментально (рис. 2).

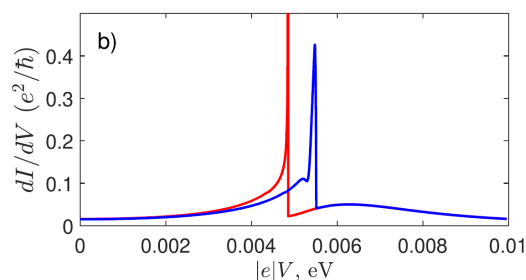


Рис. 2. Зависимость дифференциальной проводимости от напряжения. Красная линия – без учета процессов спонтанного переворота спина, синяя – с

- [1] S.V. Aradhya, L. Venkataraman, Nat. Nanotechnol. **8**, 399 (2013)
- [2] J. Fransson, O. Eriksson, I. Sandalov, Phys. Rev. Lett. **88**, 226601 (2002)
- [3] V.V. Val'kov, S.V. Aksenov, E.A. Ulanov, JETP Lett. **98**, 459 (2013)
- [4] F. Chen, M.A. Ochoa, M. Galperin, J. Chem. Phys. **146**, 092301 (2017)
- [5] V.V. Val'kov, S.V. Aksenov, Teor. Mat. Fiz. **194**, 277 (2018)

## Авторский указатель

- Абдюханов И.М. [31](#), [50](#)  
 Александровский А.А. [78](#)  
 Алексеев М.В. [31](#)  
 Али К. [56](#)  
 Афонин А.О. [78](#)  
 Бакулин А.В. [85](#)  
 Балаев Д.А. [19](#)  
 Бегунович Л.В. [47](#)  
 Бобенко Н.Г. [29](#)  
 Болталин А.И. [32](#)  
 Борзилов В.О. [61](#)  
 Буинов А.С. [93](#)  
 Булушева Л.Г. [91](#)  
 Бурдуковский В.Ф. [88](#), [93](#)  
 Вальков В.В. [76](#)  
 Власенко В.А. [30](#), [43](#)  
 Волков М.П. [27](#)  
 Вялых Д.В. [56](#)  
 Гаврилкин С.Ю. [30](#)  
 Гамов А. [54](#)  
 Гапич Д.И. [93](#)  
 Глазкова Д. [56](#)  
 Говорун И.В. [78](#)  
 Городецкий Д.В. [87](#)  
 Гохфельд Д.М. [19](#), [20](#)  
 Гребёнкина М.А. [91](#)  
 Гудков М.В. [90](#)  
 Гурова О.А. [89](#)  
 Гурьев В.В. [21](#)  
 Дегтяренко П.Н. [17](#)  
 Дегтяренко А.Ю. [30](#)  
 Дерягина И.Л. [22](#)  
 Дзедзисашвили Д.М. [76](#), [94](#)  
 Ди Чжоу [43](#)  
 Дихтиевская К.К. [50](#)  
 Друзьев Д.А. [68](#)  
 Евсин Д.В. [61](#)  
 Егорина А.С. [59](#), [72](#)  
 Егорушкин В.Е. [29](#)  
 Ейхлер А.В. [74](#)  
 Енькова Е.О. [58](#)  
 Еремеев С.В. [56](#)  
 Ермаков В.А. [90](#)  
 Зотова М.В. [82](#)  
 Злотников А.О. [52](#), [54](#)  
 Иванов Д.А. [39](#)  
 Казанина С.Д. [37](#)  
 Карпов И.В. [49](#)  
 Карцев А.И. [50](#)  
 Кашурников В.А. [24](#), [25](#)  
 Климт К. [56](#)  
 Ключанцев А.Б. [94](#)  
 Кондранова А.М. [87](#)  
 Коновалов П.В. [50](#)  
 Коршунов М.М. [16](#), [36](#), [37](#),  
[39](#), [41](#), [47](#), [77](#)  
 Крайкер А. [56](#)  
 Креллнер К. [56](#)  
 Круглов В.С. [21](#)  
 Кузнецов В.А. [84](#), [88](#), [90](#), [93](#)  
 Кузьмин В.И. [77](#)  
 Кузьмичев С.А. [30](#), [32](#), [34](#)  
 Кузьмичева Т.Е. [30](#), [32](#), [34](#)  
 Кулькова С.Е. [85](#)  
 Лавров А.Н. [91](#)  
 Ларионов Е.А. [41](#)  
 Лексиков А.А. [78](#)  
 Лукьянов П.В. [32](#)  
 Макаров И.А. [47](#)  
 Макеев М.Ю. [70](#)  
 Максимова А.Н. [24](#), [25](#)  
 Мамонова М.В. [61](#), [62](#), [70](#)  
 Мартынов А.С. [76](#)  
 Мартыянов М.М. [25](#)  
 Михайлов А.А. [24](#)  
 Михалев А.В. [31](#)  
 Мороз А.Н. [24](#), [25](#)  
 Морозов И.В. [32](#), [34](#)  
 Николаев С.В. [77](#), [82](#)  
 Некрасов И.А. [45](#), [47](#)

Овчинников С.Г. [47](#), [77](#), [82](#)  
Окотруб А.В. [87](#), [89](#), [91](#)  
Павлов Н.С. [45](#)  
Перваков К.С. [30](#), [45](#)  
Пёльхен Г. [56](#)  
Пинаков Д.В. [91](#)  
Пономарев А.Н. [29](#)  
Попова Е.Н. [22](#)  
Потапенко М.М. [31](#)  
Прудников В.В. [68](#)  
Прудников П.В. [59](#), [61](#), [64](#),  
[66](#), [72](#), [74](#)  
Пудалов В.М. [43](#), [45](#)  
Рахманов Е.О. [34](#)  
Рудоминский А.Е. [27](#)  
Савельев И.И. [31](#)  
Садаков А.В. [43](#)  
Седельникова О.В. [89](#)  
Семенов С.В. [19](#)  
Семенов Д.В. [43](#)  
Слободчиков А.А. [47](#)  
Соболевский О.А. [43](#)  
Столяров В.С. [56](#)  
Стрельцов Я.П. [80](#)  
Сухачев Р.А. [62](#)  
Тарасов А.В. [56](#)  
Терина М.Д. [31](#)  
Троян И.А. [43](#)  
Угрюмов А.В. [78](#)  
Усачев Д.Ю. [56](#)  
Ушаков А.В. [49](#)  
Федоров А.А. [88](#)  
Федоров Л.Ю. [49](#)  
Федоров М.А. [21](#)  
Хитринцева В.В. [68](#)  
Хокер С. [85](#)  
Холхоев Б.Ч. [88](#), [93](#)  
Хорошев Е.И. [66](#)  
Цаплева А.С. [31](#), [50](#)  
Цветков А.Ю. [30](#)  
Чехова Г.Н. [91](#)  
Чикуров Д.С. [27](#)  
Чубарова А.А. [64](#)

Чулков Е.В. [56](#)  
Шавкин С.В. [21](#)  
Шеин И.Р. [45](#)  
Шестаков В.А. [36](#)  
Шилов А.И. [32](#), [34](#)  
Шиянова К.А. [90](#)  
Шляхова Е.В. [89](#)  
Шляхтич М.А. [59](#)  
Шнейдер Е.И. [80](#), [82](#)  
Шульц С. [56](#)  
Шустин М.С. [53](#), [58](#)  
Эрнст А. [56](#)

XIV Сибирский семинар по высокотемпературной  
сверхпроводимости и физике наноструктур ОКНО-2023  
Научная программа семинара  
Верстка сборника – Макаров И.А.  
ИФ СО РАН