Организовано при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (РФФИ, проект № 20-02-20007)

УРАЛЬСКАЯ ЗИМНЯЯ ШКОЛА ФИЗИКОВ-ТЕОРЕТИКОВ

«KOYPOBKA»

60 лет «Коуровке» 110 лет со дня рождения С.В. Вонсовского

> Екатеринбург 2020

Международная зимняя школа физиков-теоретиков «КОУРОВКА-XXXVIII»

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

«Гранатовая бухта», Верхняя Сысерть, 23–29 февраля 2020 г.

г. Екатеринбург 2020 г.

ОРГАНИЗАТОРЫ КОНФЕРЕНЦИИ

- Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН
- Институт электрофизики УрО РАН
- Уральское отделение Российской Академии наук
- Некоммерческое партнерство «Региональный научно-технический центр»

КОНФЕРЕНЦИЯ ПРОВОДИТСЯ ПРИ ФИНАНСОВОЙ ПОДДЕРЖКЕ

- Министерства науки и высшего образования Российской Федерации
- Института физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН
- Уральского отделения Российской Академии наук
- Российского Фонда Фундаментальных Исследований (РФФИ, проект № 20-02-20007)

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Председатель программного комитета

Садовский Михаил Виссарионович (академик РАН, ИЭФ УрО РАН, Екатеринбург)

- Борисов А.Б. (член-корреспондент РАН, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург)
- Воловик Г.Е. (д.ф.-м.н., Институт теоретической физики РАН имени Л.Д. Ландау; Лаборатория О.В. Лоунасмаа, Университет Аалто, Финляндия)
- Рубцов А.Н. (д.ф.-м.н., Российский квантовый центр, Москва)
- Ирхин В.Ю. (д.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, Екатеринбург)
- Некрасов И.А. (член-корреспондент РАН, ИЭФ УрО РАН, Екатеринбург)
- Хомский Д.И. (профессор, Кёльнский университет, Германия)
- Шавров В.Г. (профессор, Институт радиоэлектроники РАН, Москва)

ОРГКОМИТЕТ

Председатель оргкомитета

Меньшенин Владимир Васильевич (д.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, Екатеринбург)

- Чарикова Т.Б. (д.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, Екатеринбург)
- Кудряшова О.В. (к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, Екатеринбург)
- Зарубин А.В. (к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, Екатеринбург)
- Бахарев С.М. (к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, Екатеринбург)
- Игошев П.А. (к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, Екатеринбург)
- Агзамова П.А. (к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, Екатеринбург)
- Павлов Н.С. (к.ф.-м.н., ИЭФ УрО РАН, Екатеринбург)

Сайт: http://conf.uran.ru/Default?cid=kourovka E-mail: kourovka@imp.uran.ru ISBN 978-5-9500855-9-8

Содержание

кции	
Black hole horizon, CPT symmetric Universe and their of	condensed matter analogs,
<i>G.E. Volovik</i>	
Теория спиновых флуктуаций в полупроводниках,	М.М. Глазов
Thermodynamic quantum space-time crystals, K. Efetor	<i>v</i>
Колмогоровские решения кинетических уравнений	й для квазичастиц, <i>В.Е. Захаро</i> в
Semiclassical dynamics of charge carriers in graphene,	M. Katsnelson
Неоднородные электронные состояния в системах	с неидеальным нестингом ли-
стов поверхности Ферми, К.И. Кугель, М.Ю. К ков. А.О. Сбойчаков	Каган, А.Л. Рахманов, А.В. Рож-
Электронная структура и магнетизм, А.И. Лихтени	итейн
Сверхпроводящая спинтроника, А.С. Мельников .	
Вселенная до горячей стадии, В.А. Рубаков	
Коллективные молы молели Хаббарла и фазовая ли	иаграмма купратов. Г.В. Астре-
иов. Г. Ропингер. А.Н. Рубиов	······································
Novel developments in orbital physics: (1) Cluster Mo	ott magnets and (2) Competition
between the Jahn-Teller effect and spin-orbit cou	pling, S.V. Streltsov, D.I. Khomskii
Бозе-эйнштейновская (и не только) конденсация эк	ситонов в низкоразмерных на-
ноструктурах с беспорядком, М.М. Глазов. Р.А.	Сурис
Новые тенленшии в физике квантовых газов, Г.В. Ш	Іляпников
АНТОВАЯ ТЕОРИЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ И МАГ	НЕТИЗМА
Трехмерные структуры и их свойства в гелимагнети	іках, Ф.Н. Рыбаков, А.Б. Борисов
Расчет проводимости двойного перовскита La _{1.2} Sr ₀	_{0.8} Mn ₂ O ₇ с колоссальным маг-
нитосопротивлением, близким к рекордном	у, и его описание «спин-поля-
ронным» механизмом проводимости, С.А. Гуд	ин, Н.И. Солин
Сопряженное уравнение Линблада для осциллятог	оа Фока, <i>В.С. Кирчанов</i>
Интерметаллиды в фазе Лавеса при гидростатичес	ском сжатии: ab inito вычисле-
ния, Е.Е. Кокорина, М.В. Медведев, И.А. Некрас	сов, Н.С. Павлов
Спин-флуктуационный подход к теории сверхпров	одимости в монослоях FeSe,
М.М. Коршунов, Л.В. Бегунович, Ю.Н. Тогушовс	<i>a</i>
Эффект передачи спин вращающего момента, как о	тклик неравновесной системы
на внешнее возмущение, И.И. Ляпилин	• • • • • • • • • • • • • • • • • • • •
Китаевские материалы и квантовый магнетизм, П.	А. Максимов
Новый диаграммный подход к описанию свойств	нормальной фазы спин-поля-
ронного ансамбля в купратных сверхпроводні	иках, В.В. Вальков, В.А. Мицкан,
М.М. Коровушкин, Д.М. Дзебисашвили, А.Ф. Ба	прабанов
Неквазичастичное описание ВТСП купратов, А.С. М	, Іосквин, Ю.Д. Панов
Динамика спиновых кроссоверов при внезапных в	возмущениях, Ю.С. Орлов, С.В.
Николаев, С.Г. Овчинников	
Особенности фазовых состояний разбавленного де	зумерного магнетика вблизи
точки фрустрации, Ю.Д. Панов, Д.Н. Ясинская	. В.А. Улитко. А.С. Москвин
Антиадиабатические фононы и сверхпроволимост	ь в теории Элиашберга – Мак-
Миллана, М.В. Садовский	r r
Topological spintronics with (anti)skyrmions and hime	
	rons. O.A. Tretiakov
Исследование собственных мол коллективных кол	 rons, <i>O.A. Tretiakov</i> иебаний в многозонных сверх-
Исследование собственных мод коллективных кол проводниках, Ю.М. Билинский. П.И. Апсеев	rons, O. <i>A. Tretiakov</i> 1ебаний в многозонных сверх-
Исследование собственных мод коллективных кол проводниках, Ю.М. Билинский, П.И. Арсеев. К расчёту поля конечного магнитного цилинлра. В	rons, O.A. Tretiakov іебаний в многозонных сверх- .В. Лякин. О.В. Кудрящова. В Я.
Исследование собственных мод коллективных кол проводниках, Ю.М. Билинский, П.И. Арсеев К расчёту поля конечного магнитного цилиндра, В. Раевский	rons, O.A. Tretiakov іебаний в многозонных сверх- г.В. Дякин, О.В. Кудряшова, В.Я.

Эбратная задача магнитостатики в полях насыщения, В.В. Дякин, О.В. Кудряшова В Я. Расский
Фазовая диаграмма магнетика с китаевскими взаимодействиями α-RuCl ₃ , П.А. Максимов
11.A. Миксимов
линовые возоуждения в неколлинсарной магнитной фазе Lawin205, Б.Б. мено
The influence of the real part of the self-energy function on the magnetic quantum oscil lations of magnetization and resistance in layered metals, <i>T.I. Mogilyuk, P.D. Grigo</i>
spontaneous symmetry breaking in an extended Dicke model, S.S. Seidov, S.I. Микии . Компьютерное моделирование решеточного бозе-газа с фиксированной псевдо намагниченностью, В.А. Улитко, А.А. Чиков, В.В. Конев, Ю.Д. Панов
Иногомасштабная динамика намагниченности в парамагнетике с дипольным
межчастичным взаимодеиствием, К.Б. Циоеркин Сопротивление Холла в направлении оси с в электронно-легированном сверхпро воднике, Т.Б. Чарикова, Н.Г. Шелушинина, О.Е. Петухова, М.Р. Попов, А.А. Ива
НОВ
Фазовая диаграмма системы локальных бозонов конкурирующих с обменно-свя занными спиновыми центрами, А.А. Чиков, В.В. Конев, В.А. Улитко, Ю.Д. Па
нов, А.С. Москвин
немагнитные примеси в сверхпроводниках на основе железа, <i>В.А. шестаков,</i> М.М. Корцинов
магнетике, Л.Н. Ясинская, В.А. Улитко. Ю.Л. Панов
ВИКА СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ И НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ
Зраевые состояния двумерного топологического изолятора в условиях суперпе
ремешивания, В.В. Вальков
Эффективные взаимодействия для топологически нетривиальных сверхпроводя щих систем со спин-орбитальной связью в режиме сильных корреляций
А.О. Злотников
Analytical theory of mott transition in the antiferromagnetic phase, <i>P.A. Igoshev</i> , <i>V.Yu. Irkhin</i>
Jltracold atoms with additional degree of freedom. Spin-orbital view, A.M. Belemuk, N.M. Chtchelkatchev, A.V. Mikheyenkov, K.I. Kugel
Исследование магнитокалорического эффекта в модели Хаббарда в приближени
среднего поля и в DMFT, <i>И.А. Некрасов, П.А. Игошев, Н.С. Павлов</i>
са неупорядоченного изолятора Черна, С.Г. Новокшонов
Грехмерное манипулирование с применением микроинструментов с эффектом па
Расстояние «редкоземельный ион – лиганд» в примесных центрах R ³⁺ и R ²⁺ в MeF
(Me = Ca, Sr, Ba): ab initio расчет, В.А. Чернышев, А.А. Архипов, П.А. Агзамова
линовые корреляции и запутанность в многофермионной системе, <i>М.Р. Арифул</i> лин, В.Л. Бердинский .
Спиновая динамика в слабодопированных манганитах стронция, З.Н. Волкова,
А.П. Геращенко, С.В. Верховский, К.Н. Михалев, А.Ю. Гермов
Грехчастичные корреляции в жидком и аморфном алюминии, Б.Н. Галимзяное
<i>А.В. Мокшин</i>
М.В. Зотова, Е.И. Шнейдер, С.В. Николаев, С.Г. Овчинников

Тведотельное охлаждение сверхпроводящих магнитов при помощи фазовых пе- реходов в магнетиках. В.В. Коледов, С.В. Таскаев, А.В. Маширов, А.П. Каман-	
цев, А.В. Петров, К. Колесов, Д.С. Суслов, Ю.А. Терентьев, В.Г. Шавров Температурная зависимость электронной структуры системы с сильными элек-	65
тронными корреляциями и сильным электрон-фононным взаимодействи- ем. И.А. Макаров, С.Г. Овчинников	66
Исследование золотых фуллеренов как контрастных агентов для фотоакустиче- ской визуализации раковых заболеваний в модели Хаббарда в приближе-	67
Изучение магнитного состояния и размерных эффектов в наночастицах на осно- ве 3d-металлов методами ЯМР, К.Н. Михалев, А.Ю. Гермов, Д.А. Прокопьев,	07
M.A. Уймин, A.E. Ермаков, А.С. Конев, В.С. Гавико	68
<i>T.K. Kim, A. Yaresko, Ki-Young Choi, I.A. Nekrasov, D.V. Evtushinsky</i> Dependence of superexchange interaction in CrO ₂ on pressure, <i>S.I. Polukeev, V.A. Gavrich-</i>	69
ков, S.G. Овститиков	70
динов, А.В. Мокшин	71
D-мерная парамагнитная модель хаобарда, <i>п.н. чищин</i> Анализ задачи Кондо и задачи о поляроне с использованием квантового метода Монте-Карло, <i>А.С. Черткова, В.В. Выборова, А.Н. Рубиов</i>	72
Влияние сильных электронных корреляций на особенности формирования и де- тектирования квазимайорановских состояний в одномерных системах,	10
С.В. Аксенов, М.С. Шустин	74
ТЕОРИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ И НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ	75
Критическая динамика бозонной системы вблизи квантового фазового перехода,	
<i>М.Г. Васин</i> М.Г. Васин М.Г. Васин Модель Изинга на двумерной ромбической решетке. Точное решение, <i>Ф.А. Кассан</i> -	76
Оглы, А.И. Прошкин	((
сидных соединениях 3d-элементов, В.В. Меньшенин	78
Топологические солитоны в магнитных наноструктурах, <i>К.Л. Метлов</i> Фазовые переходы в двумерных неупорядоченных моделях Поттса, А.К. Муртаза-	79
ев, А.Б. Бабаев	80
на неравновесное критическое поведение трехмерной модели Гейзенберга, В.В. Прудников, П.В. Прудников, А.С. Лях	81
Компьютерное моделирование критического поведения мультислойных магнит- ных структур и низкоразмерных магнетиков, П.В. Прудников, В.В. Прудни-	00
ков, Б.О. Борзилов, М.М. Болоырева, Д.Б. Евсин Калибровочная теория перехолов сверхпроволник – изолятор в лвумерных мат-	82
рицах джозефсоновских контактов, М.Г. Васин	83
Особенности температурного поведения магнитной теплоемкости фрустрирован- ных одномерных спиновых систем, А.В. Зарубин, Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прош-	
кин	84 85
Особенности формирования ближнего порядка в магнитомягких сплавах Fe – X (X = Al. Si, Ga, Ge). Первоприципное молелирование. А.Р. Кузнецов. Ю Н. Горно-	03
стырев, И.Г. Шмаков	86

Коллективная динамика однокомпонентной плазмы, А.В. Мокшин, И.И. Файру-	
шин	87
Сценарии плавления двумерных систем с ограниченными деформируемыми по-	
тенциалами, В.Н. Рыжов, Е.А. Гайдук, Ю.Д. Фомин, Е.Н. Циок	88
Структура и динамика решетки R ₂ Ge ₂ O ₇ (R = Tb – Lu, Y): ab initio расчет, <i>B.C. Рюм</i> -	
шин, В.А. Чернышев	89
Высокопроводящее состояние и ферромагнетизм в квазиодномерных системах,	
Л.М. Свирская	90
Thermodynamic and magnetic properties of one-dimensional decorated chain in Ising	
model, E.S. Tsuvarev, F.A. Kassan-Ogly, A.I. Proshkin	91
Новая классификация фазовых переходов, основанная на критических индексах,	
В.Н. Удодов	92
Перехол в сверхпроволящее состояние вблизи абсолютного нуля. В.Н. Удодов	94
T CONTRACTOR CONT	

Авторский указатель

ЛЕКЦИИ

Black hole horizon, CPT symmetric Universe and their condensed matter analogs

G.E. Volovik

Aalto university, Aalto, Finland Landau institute for theoretical physics, Chernogolovka, Russia E-mail: volovik@boojum.hut.fi

The analog of antispacetime has been realized in the recent experiments on the composite defects in superfluid ${}^{3}\text{He}$ [1]: the Kibble walls bounded by Alice strings (the half quantum vortices). The antispacetime can be reached in two different ways: by the "safe" route around the Alice string or by dangerous route across the Kibble wall (see Fig. 1).



PMC. 1. Two roads to antispacetime: the safe route around the Alice string (along the contour C_1) or dangerous route along C_2 across the Kibble wall (through the Alice looking glass).

In the real black holes, the Weyl or Dirac cones are overtilted behind the event horizon. This type of the fermionic spectrum is known in semimetals as the type-II Weyl or type-II Dirac spectrum. That is why the black hole horizon can be simulated in semimetals by creation of the region with overtilted Weyl or Dirac cones [2]. The filling of the electronic states inside the "black hole" will be accompanied by Hawking radiation. The Hawking temperature in the Weyl semimetals can reach the room temperature, if the black hole region is sufficiently small, and thus the effective gravity at the horizon is large.

1. J.T. Mäkinen et al., Nat. Comm. **10**, 237 (2019). 2. G.E. Volovik, JETP Lett. **104**, 645 (2016).

Теория спиновых флуктуаций в полупроводниках

М.М. Глазов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия E-mail: glazov@coherent.ioffe.ru

Исследования спиновых явлений в полупроводниках с начала XXI века сформировали бурно развивающееся направление в физике твёрдого тела. За последнее десятилетие в арсенале исследователей утвердился ещё один новый метод исследования спиновой динамики – спектроскопия спинового шума. В отличие от традиционных методов он не требует выведения системы из состояния равновесия и основан на изучении временных и спектральных корреляционных функций спиновых флуктуаций, которые детектируются по стохастическому фарадеевскому вращению плоскости поляризации луча, зондирующего среду. В условиях термодинамического равновесия шумовые характеристики и линейный отклик системы связаны, поэтому анализ спектров флуктуаций оптических сигналов Фарадея или Керра позволяет определять частоты спиновой прецессии носителей заряда в магнитном поле, средние значения и величины разброса эффективных *g*-факторов, времена спиновой релаксации и другие параметры спиновой динамики.

В лекции представлены методы расчета спиновых флуктуаций, а затем последовательно рассмотрены и описаны спиновые шумы в полупроводниковых системах различной размерности. Обсуждаются спиновые шумы в неравновесных условиях. Теория проиллюстрирована экспериментальными данными. Приводится сравнение спиновых флуктуаций в конденсированных средах и в атомных системах.

Работа частично поддержана грантом РНФ № 19-12-00051.

1. M.M. Glazov, Electron & Nuclear Spin Dynamics in Semiconductor Nanostructures, Oxford University Press (2018).

Thermodynamic quantum space-time crystals

K. Efetov

Ruhr-universität Bochum, Bochum, Germany National university of science and technology MISIS, Moscow, Russia International institute of physics UFRN, Natal, Brazil E-mail: Konstantin.B.Efetov@ruhr-uni-bochum.de

Space and time play in many respects a similar role in modern physics. At the same time, there are many known materials that have stable crystalline structures characterized by a periodic dependence of physical parameters on coordinates but not on time. Are thermodynamic states with a periodic time dependence forbidden by fundamental laws of nature?

Several years ago, Frank Wilczek proposed that quantum time crystals might exist using a rather simple model with a superconducting ring and this work has attracted great attention. It has been shown somewhat later that the phase proposed by Wilczek was not an equilibrium state and even a "no-go" theorem rejecting this possibility has been published. Nevertheless, the proposal was very stimulating, and it has been suggested that some non-equilibrium states demonstrate a periodic time dependence. This has recently been confirmed experimentally, and study of systems demonstrating periodic time dependence out of equilibrium is a hot topic now.

Here it is shown solving explicitly a model for interacting electrons that a thermodynamically stable quantum space-time crystal state with a periodic dependence on both space coordinates and time is nevertheless possible. The model under study is a spin-fermion model with overlapping "hot spots" introduced by us recently for description of underdoped superconducting cuprates. It has been demonstrated previously that, within this model, one could obtain *d*-wave superconductivity, charge-density waves with the *d*-wave formfactor, Pomeranchuk deformation of the Fermi surface, and the so-called *d*-density wave (DDW) state characterized by loop currents oscillating with the double period of the lattice.

Surprisingly, in addition to all these states, one more state exists within this model, and this observation is discussed in the present talk. The order parameter of this new state describes the loop currents with the same periodic space dependence as in the DDW state. However, it oscillates also both in real *t* and imaginary τ times (period of the oscillation in the imaginary time is commensurate with the inverse temperature 1/T). Generally, the order parameter can be well described by an elliptic function leading to this double-periodic dependence.

Explicit calculations show that, in a certain region of parameters of the model, such a quantum space-time crystal has the lowest free energy and therefore is stable. Although the average order parameter $\langle b(r,t) \rangle$ equals zero, the correlation function of two parameters $\langle b(0,0) b(r,t) \rangle$ has a long range order in both space and time, thus demonstrating a possibility of the existence of the thermodynamic space-time crystal. This new state looks a good candidate for describing the still mysterious "pseudogap state" in superconducting cuprates but the phenomenon is clearly more general and other interesting applications are anticipated.

Колмогоровские решения кинетических уравнений для квазичастиц

В.Е. Захаров

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Москва, Россия E-mail: zakharov@math.arizona.edu

Semiclassical dynamics of charge carriers in graphene

M. Katsnelson

Radboud university, Nijmegen, Netherlands E-mail: M.Katsnelson@science.ru.nl

After general introduction to physics of massless Dirac fermions in graphene and their exotic properties (first of all, chiral, or Klein, tunneling, that is, a permeation of charge carriers through arbitrarily high and broad energy barriers) I will describe the semiclassical theory of these phenomena. For the case of one-dimensional potential barriers one can develop an uniform asymptotic approximation giving an accurate analytical solution for arbitrary shape of the barrier [1,2]. Then, I will discuss basic electronic optics of graphene, especially, the theory of electron Veselago lenses including a consideration of wavefront catastrophes [3,4]. After that, I will consider briefly a general theory of electron propagation in a two-dimensional potential relief [5], as a particular case of semiclassical approximation for matrix Hamiltonians. I will also discuss peculiarities of chiral tunneling for the case of bilayer graphene [6].

1. T. Tudorovskiy, K.J.A. Reinders, M.I. Katsnelson, Phys. Scripta 146, 014010 (2012).

2. K.J.A. Reijnders, T. Tudorovskiy, M.I. Katsnelson, Ann. Phys. (NY) 333, 155 (2013).

3. K.J.A. Reijnders, M.I. Katsnelson, Phys. Rev. B 95, 115310 (2017).

4. K.J.A. Reijnders, M.I. Katsnelson, Phys. Rev. B 96, 045305 (2017).

5. K.J.A. Reijnders, D.S. Minenkov, M.I. Katsnelson, S.Yu. Dobrokhotov, Ann. Phys. (NY) 397, 65 (2018).

6. V. Kleptsyn, A. Okunev, I. Schurov, D. Zubov, M.I. Katsnelson, Phys. Rev. B 92, 165407 (2015).

Неоднородные электронные состояния в системах с неидеальным нестингом листов поверхности Ферми

К.И. Кугель^{1,2*}, М.Ю. Каган^{2,3}, А.Л. Рахманов^{1,4,5}, А.В. Рожков^{1,4}, А.О. Сбойчаков¹

¹Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, Москва, Россия ²Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия ³Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, Москва, Россия ⁴Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия ⁵Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова, Москва, Россия *E-mail: klimkugel@gmail.com

Среди многозонных материалов с тенденцией к электронному фазовому расслоению существует важное семейство систем с нестингом поверхности Ферми. Нестинг – очень популярная концепция в физике конденсированного состояния. Существование двух фрагментов поверхности Ферми, которые могут быть совмещены при переносе на некоторый вектор обратной решётки (\mathbf{Q}_0), влечёт за собой неустойчивость ферми-жидкостного состояния, которая приводит к возникновению дополнительного параметра порядка. Понятие нестинга широко используется для анализа волн зарядовой плотности (ВЗП), волн спиновой плотности (ВСП), механизмов высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП), антиферромагнетизма ($A\Phi M$) хрома и его сплавов и т.д. Важно отметить, что нестинг может быть неидеальным, то есть участки поверхности Ферми могут быть совмещены при переносе на вектор \mathbf{Q}_0 только приблизительно.

Недавно было показано, что неидеальный нестинг может приводить к электронному фазовому расслоению в хроме и его сплавах [1], железосодержащих ВТСП [2] и в двухслойном графене [3]. Рассмотрение велось на основе достаточно простой модели, учитывающей нестинг электронных и дырочных листов поверхности Ферми [4]. Отметим также, что спиновые и зарядовые неоднородности, связанные с неидеальным нестингом, активно изучаются и в низкоразмерных соединениях [5]. Физическая причина возникновения неоднородного состояния в системах с нестингом состоит в следующем. Неустойчивость электронного спектра, связанная с нестингом, порождает новый параметр порядка. Соответственно, свободная энергия системы уменьшается. Чем совершеннее нестинг, тем больше выигрыш в свободной энергии. Тогда может быть выгодно, чтобы система распалась на две фазы с лучшим и худшим (или даже отсутствующим) нестингом, которые будут отличаться плотностью электронов [6]. Интересные эффекты возникают также в системах с неидеальным нестингом под воздействием приложенного магнитного поля [7] и давления [8].

- 1. A.L. Rakhmanov, A.V. Rozhkov, A.O. Sboychakov, F. Nori, Phys. Rev. Lett. 109, 206801 (2012).
- 2. A.O. Sboychakov, A.V. Rozhkov, K.I. Kugel, A.L. Rakhmanov, F. Nori, Phys. Rev. B 88, 195142 (2013).
- 3. A.L. Rakhmanov, A.V. Rozhkov, A.O. Sboychakov, F. Nori, Phys. Rev. B 87, 075128 (2013).
- 4. T.M. Rice, Phys. Rev. B 2, 3619 (1970).
- 5. A. Narayanan et al., Phys. Rev. Lett. 112, 146402 (2014).
- 6. А.Л. Рахманов, К.И. Кугель, М.Ю. Каган, А.В. Рожков, А.О. Сбойчаков, Письма в ЖЭТФ 105, 768 (2017).
- 7. A.O. Sboychakov, A.L. Rakhmanov, K.I. Kugel, A.V. Rozhkov, F. Nori, Phys. Rev. B 95, 014203 (2017).
- 8. A.L. Rakhmanov, K.I. Kugel, A.O. Sboychakov, J. Supercond. Nov. Magn. 2019 (in press).

Электронная структура и магнетизм

А.И. Лихтенштейн

Гамбургский университет, Гамбург, Германия E-mail: alichten@physnet.uni-hamburg.de

Сверхпроводящая спинтроника

А.С. Мельников

Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия E-mail: melnikov@ipm.sci-nnov.ru

Взаимодействие между двумя антагонистическими явлениями – сверхпроводимостью и ферромагнетизмом (СФ) – давно привлекает внимание исследователей. Конкуренция сверхпроводящего и магнитного состояний вещества является не только интригующей и красивой физической задачей, она имеет перспективу практического использования в новом классе устройств криоэлектроники – твердотельных приборов, функционирующих при криогенных температурах. Основное внимание в лекции будет уделено проявлениям этой конкуренции в особенностях эффекта близости и электродинамики гибридных СФ систем.

В условиях эффекта близости (при не слишком большом сопротивлении границ раздела сверхпроводник – ферромагнетик) будет проанализировано влияние обменного взаимодействия на сверхпроводящие электроны. Изменяя с помощью внешнего магнитного поля распределение магнитного момента, мы получаем возможность непосредственно управлять и спинами электронов в сверхпроводнике. Квантовомеханический характер их движения приводит при этом к весьма нетривиальному кругу явлений, которые можно объединить термином «сверхпроводящая спинтроника». Примерами наиболее известных спинтронных устройств являются джозефсоновские контакты с перестраиваемыми соотношениями между сверхпроводящим током и разностью фаз волновых функций электронов и спиновые вентили, в которых критическая температура перехода контролируется взаимной ориентацией магнитных моментов в магнитных подсистемах (слоях). В лекции будет дан также краткий обзор современного состояния работ по сверхпроводящей спинтронике.

Вселенная до горячей стадии

В.А. Рубаков

Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия E-mail: rubakov@ms2.inr.ac.ru

Коллективные моды модели Хаббарда и фазовая диаграмма купратов

Г.В. Астрецов, Г. Рорингер, А.Н. Рубцов*

Российский квантовый центр, Москва, Россия *E-mail: rubtsov@ct-qmc.org

Несмотря на то, что высокотемпературная сверхпроводимость купратных соединений была открыта более 30 лет назал, общепризнанная теория этого явления и, более широко, понимание фазовой диаграммы этих соединений до сих пор отсутствует. Причина такого положения дел состоит, по-видимому, в том, что в этих материалах одновременно важными являются два вида многочастичных явлений в электронной подсистеме – сильные локальные корреляции на атомах меди и развитые коллективные моды. Эти явления характеризуются существенно разными масштабами длин и энергий. Известные приближения (соответственно динамическая теория среднего поля и диаграммные методы) хорошо годятся для описания указанных явлений по отдельности. Мы предлагаем схему, в которой сильные локальные корреляции, характеризуемые шкалой энергий вплоть до нескольких электрон-вольт, учитываются точно в процедуре перехода к дуальному ансамблю. Последний характеризуется быстрым спаданием взаимодействия с частотой, что позволяет отынтегрировать высокочастотные моды. Полученное таким образом низкоэнергетическое действие допускает численное решение паркетных уравнений на достаточно больших решетках, что позволяет учесть взаимовлияние всех типов коллективных возбуждений на широкой шкале пространственных масштабов. Полученная нами фазовая диаграмма находится в хорошем соответствии с экспериментальными данными. Предложенная теория позволяет сделать важные выводы о механизмах спаривания. В частности, важную роль в формировании сверхпроводимости играют особенности ван Хова в электронном спектре, усиленные за счет корреляций.

Novel developments in orbital physics: (1) Cluster Mott magnets and (2) Competition between the Jahn-Teller effect and spin-orbit coupling

S.V. Streltsov^{1*}, D.I. Khomskii²

¹Mikheev institute of metal physics UB RAS, Ekaterinburg, Russia ²University of Cologne, Cologne, Germany *E-mail: streltsov@imp.uran.ru

In this talk we will discuss two very important subjects, which are under active nowadays. First part of the talk will be devoted to the so-called Cluster Mott magnets, while the second will be about interplay between the Jahn-Teller effect and spin-orbit coupling.

Among the rich class of systems with strongly correlated electrons there exists a special group of materials, which are called cluster Mott magnets [1]. Very typical for such systems is the situation when inside such clusters the metal-metal distances are rather short and often smaller that in respective elemental metals, and thus corresponding electron hopping, t, may be of the order or even larger than the atomic parameters such as the Hubbard's U, Hund's coupling J_H and spin-orbit interaction λ . In this case the natural and often very successful description of electronic structure of such systems is the description in terms of molecular orbitals (MO). In this situation electrons within such "molecules" may behave as itinerant, whereas the electron hopping between clusters may still be rather small, so that the solid build of such clusters would still behave as Mott insulator - but with electrons localized not on transition metal (TM) ions, but on such clusters [2]. Moreover, sometimes the clusters may be electronically isolated, but spatially overlapping. In effect, these systems have everything the usual strongly correlated systems have: they can be Mott insulators, they can have insulation-metal transitions, they can be magnetic (but with the moment localized not on TM ions as usual, but on such "molecules"); they may even be superconducting. But, besides all these usual effects, they have something else on top of it, namely, they have internal degrees of freedom, which can make the properties of these systems going beyond the conventional Mott insulators. For instance, they can have intra-cluster charge ordering, so that the electrons are not distributed equally over the whole "molecule" but rather localized on some ions.

In second part of the talk we will discuss a very general problem of interplay between the Jahn-Teller (JT) effect and the spin-orbit coupling (SOC). It will be shown that the result of competition strongly depends on the specific situation: for some cases, such as d^4 and d^5 , but also d^2 configurations, strong SOC may sometimes reverse, but finally completely suppresses JT distortion, whereas in other cases, notably d^3 , SOC generates JT effect in the configuration which is usually considered as "orbitally dead".

1. G. Chen, P.A. Lee, Phys. Rev. B 97, 035124 (2018).

2. S.V. Streltsov, D.I. Khomskii, PNAS 113, 10491 (2016).

Бозе-эйнштейновская (и не только) конденсация экситонов в низкоразмерных наноструктурах с беспорядком

М.М. Глазов, Р.А. Сурис*

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия *E-mail: suris@theory.ioffe.ru

Обсуждаются многочастичные эффекты в ансамблях экситонов в полупроводниковых наногетероструктурах. Будет продемонстрировано, что в двумерных (2D) системах с обусловленным их несовершенством беспорядком возможна бозеэйнштейновская конденсация экситонов, тогда как в идеальной 2D системе это, как известно, невозможно. Представлен анализ роли конечного времени жизни экситонов в формировании конденсата и рассмотрен спектр его элементарных возбуждений. Дается анализ роли флюктуаций создающей экситоны накачки и продемонстрировано, как эти флюктуации подавляют дальний порядок. Описаны следствия взаимного отталкивания диполярных экситонов в 2D гетероструктурах с одиночными и двойными квантовыми ямами. Будет представлен анализ возможности возникновения двумерного кристалла в такой системе и показано, что может реализоваться фаза с кристаллоподобным ближним порядком с большими корреляционными длинами.

1. Р.А. Сурис, ЖЭТФ 149, 695 (2016).

- 2. М.М. Глазов, Р.А. Сурис, ЖЭТФ 153, 1001 (2018).
- 3. М.М. Глазов, Р.А. Сурис, УФН, принята к публикации, doi:10.3367/UFNr.2019.10.038663 1.

Новые тенденции в физике квантовых газов

Г.В. Шляпников

Национальный центр научных исследований, Орсе, Франция E-mail: shlyapn@lptms.u-psud.fr

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ И МАГНЕТИЗМА

Трехмерные структуры и их свойства в гелимагнетиках

Ф.Н. Рыбаков, А.Б. Борисов*

Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия *E-mail: Bor1947@gmail.com

Различные спиновые текстуры в магнитных системах всегда были объектом интенсивных теоретических и экспериментальных исследований. В последние годы несомненный интерес вызывает изучение спиновых текстур в гелимагнетиках, где взаимодействие Дзялошинского-Мория стабилизирует двумерные и трехмерные структуры и основным состоянием является спиральная структура - солитонная решетка [1]. Динамические одномерные солитоны в таких системах состоят из кинков и бризеров, движущихся на фоне спиральной структуры. Среди двумерных киральных структур особо выделяются термодинамически стабильные и метастабильные локализованные вихри – скирмионы. Предсказанные в 1989 г. [2–3], они в настоящее время являются объектами интенсивных теоретических и экспериментальных исследований. Фазовая диаграмма в пленках гелимагнетиках, как функция толщины пленки и приложенного магнитного поля [4], указывает на существование новых типов трехмерных спиновых текстур и солитонов. Такими являются «киральные поплавки» [5] – частицеподобные состояния, локализованные в трех измерениях вблизи свободной границы или интерфейса образца и хопфионы[8]. В докладе обсуждаются экспериментальные методы их наблюдения [6]. В отличие от двумерных вихрей, взаимодействие скирмионов носит более сложный характер. В работе [7] впервые проведено экспериментальное наблюдение взаимодействия между индивидуальными скирмионами и вычислительными методами найдена зависимость равновесного расстояния между двумя взаимодействующими скирмионами от приложенного магнитного поля.

1. И.Е. Дзялошинский, ЖЭТФ 47, 992 (1964).

2. А.Н. Богданов, Д.А. Яблонский, ЖЭТФ **95**, 178 (1989).

3. B.A. Ivanov, V.A. Stephanovich, A.A. Zhmudskii, J. Magn. Magn. Mater. 88, 116 (1990).

4. F.N. Rybakov, A.B. Borisov, S. Blugel, N.S. Kiselev, New J. Phys. 18, 045002 (2016).

5. F.N. Rybakov, A.B. Borisov, S. Blugel, N.S. Kiselev, Phys. Rev. Lett. 115, 117201 (2015).

6. F. Zheng, F.N. Rybakov, A.B. Borisov et al., Nature Nanotechnology 13, 451 (2018).

7. H. Du, X. Zhao, F.N. Rybakov, A.B. Borisov et al., Phys. Rev. Lett. **120**, 197203 (2018).

8. F.N. Rybakov, N.S. Kiselev, A.B. Borisov, arhiv:1904.00250v1 (2019).

Расчет проводимости двойного перовскита La_{1.2}Sr_{0.8}Mn₂O₇ с колоссальным магнитосопротивлением, близким к рекордному, и его описание «спин-поляронным» механизмом проводимости

С.А. Гудин*, Н.И. Солин

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



РИС. 1. РАЗМЕР ПОЛЯРОНА, ОТНЕСЕННОГО К *keq*, В ЗА-ВИСИМОСТИ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ *T* ПРИ ЗНАЧЕ-НИЯХ ПОЛЯ *H*: 0 КОЕ (ЗВЕЗДОЧКИ), 90 КОЕ (КРУЖКИ).

Проведен расчет сопротивления манганита $La_{1.2}Sr_{1.8}Mn_{2(1-z)}O_7$ в магнитных полях до 90 кЭ с учетом двух механизмов проводимости - «ориентационного» и «спинполяронного» в температурном интервале от 20 К до 300 К в магнитных полях от 0 до 90 кОе. Показано, что величина колоссального магнитосопротивления обеспечивается за счет увеличения (вдоль магнитного поля) линейного размера полярона. Используя метод разделения вкладов в магнитосопротивление от различных механизмов проводимости [1-4], получено, что для температуры 80 К в малых магнитных полях вклад в магнитосопротивление от «ориентационного» механизма близок к 50%, что однозначно показывает необходимость учета при расчетах магнитосопротивления обоих механизмов проводимости. Произведен расчет рис. 1 размера полярона, отнесенного к keq, в зависимости от температуры Т при значениях

поля *H*: 0 кОе (звездочки), 90 кОе (кружки). Здесь *k* – коэффициент пропорциональности в законе Кулона, определяемый через диэлектрическую проницаемость спинового полярона, *e*, *q* – заряды электрона и полярона.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки «Квант» № АААА-А18-118020190095-4 при частичной поддержке РФФИ (проект № 19-02-01000), УрО РАН (проект № 18-2-2-11).

- 1. С.А. Гудин, Н.И. Солин, Н.Н. Гапонцева, ФТТ **60**, 6, 1067 (2018).
- 2. С.А. Гудин, М.И. Куркин, Э.А. Нейфельд и др., ЖЭТФ **148(5)**, 1005 (2015).
- 3. М.И. Куркин, Э.А. Нейфельд, А.В. Королев и др., ЖЭТФ 143, 948 (2013).
- 4. С.А. Гудин, Н.Н. Гапонцева, Э.А. Нейфельд, А.В. Королев, Н.А. Угрюмова, Изв. РАН. Сер. Физич. **78(9)**, 1142 (2014).

Сопряженное уравнение Линблада для осциллятора Фока

В.С. Кирчанов

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия E-mail: Kirchanovvs@pstu.ru

Основным уравнением для открытых систем служит квантовое уравнение Линблада. Работа посвящена точному решению сопряжённого уравнения Линблада для квантового затухающего гармонического осциллятора в представлении Фока [1]:

$$\frac{\partial \hat{D}(t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H} + \hat{W}, \hat{D} \right] - \frac{\alpha}{2\hbar^2} \left(N + 1 \right) \left\{ \hat{b}^+ \left[\hat{b}, \hat{D} \right] + \left[\hat{D}, \hat{b}^+ \right] \hat{b} \right\} - \frac{\alpha}{2\hbar^2} N \left\{ \hat{b} \left[\hat{b}^+, \hat{D} \right] + \left[\hat{D}, \hat{b} \right] \hat{b}^+ \right\},$$
(1)

где $\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(\hat{b}^{+}\hat{b} + \hat{b}\hat{b}^{+}\right) = \frac{1}{2}\hbar\omega\left\{\hat{b}^{+},\hat{b}\right\}_{+} - \hat{W} = -i\hbar\frac{\gamma}{4}\left(\hat{b}^{+2} - \hat{b}^{2}\right)$ – оператор «энергии диссипации»; \hat{b}^{+}, \hat{b} – операторы рождения (уничтожения) фотона моды; $\left[\hat{b}\hat{b}^{+}\right] = \hat{b}\hat{b}^{+} - \hat{b}^{+}\hat{b} = 1$ – коммутатор; $N = [\exp\left(\hbar\omega/k_{B}T\right) - 1]^{-1}$ – среднее число квантов моды с частотой теплового резервуара ω ; $\alpha\hbar^{-2}$ – коэффициент затухания моды.

Подставляя последовательно операторы $\hat{D} = \left(\hat{b}; \hat{b}^+; \hat{b}^2; \hat{b}^{+2}; \left\{\hat{b}^+, \hat{b}\right\}_+\right)$ в уравнение (1), при-

меняя прямое и обратное преобразование Лапласа, получаем два решения: $\begin{cases} b(t) \\ \hat{b}^+(t) \end{cases} = e^{-\frac{\alpha}{2\hbar^2}t} \left\{ \begin{pmatrix} \hat{b}_0 \\ \hat{b}_0^+ \end{pmatrix} \cos \Omega t \mp (\pm \frac{\alpha}{2\hbar^2} + i\omega) \frac{\sin \Omega t}{\Omega} - \begin{pmatrix} \hat{b}_0^+ \\ \hat{b}_0 \end{pmatrix} \frac{\gamma \sin \Omega t}{2\Omega} \right\}$. Верхний знак для оператора уни-

чтожения, нижний для оператора рождения.

Для квадратичных операторов система трех уравнений:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \hat{b}^2\\ \hat{b}^{+2} \end{pmatrix} = \mp 2 \left(i\omega \pm \frac{\alpha}{2\hbar^2} \right) \begin{pmatrix} \hat{b}^2\\ \hat{b}^{+2} \end{pmatrix} - \frac{\gamma}{2} \left\{ \hat{b}^+ \hat{b} \right\}_+; \\ \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \hat{b}^+ \hat{b} \right\}_+ = -\gamma \hat{b}^2 - \gamma \hat{b}^2 - \frac{\alpha}{\hbar^2} \left\{ \hat{b}^+ \hat{b} \right\}_+ - \frac{\alpha}{\hbar^2} \left(2N - 1 \right) \hat{b}^2 - \frac{\alpha}{\hbar^2} \left\{ \hat{b}^+ \hat{b} \right\}_+$$

имеет решения в общем виде:

$$\hat{D}_m(t) = e^{-\frac{\alpha}{\hbar^2}t} \left\{ \hat{D}_m(0) \left[-A_m \cos(2\Omega t + \varphi_m) + B_m \right] + C_m [A\cos(2\Omega t + \phi) + B] \right\} + C_m K.$$

Здесь $\hat{D}_1(t) = \hat{b}^2(t)$, $\hat{D}_2(t) = \hat{b}^{+2}(t)$, $\hat{D}_3(t) = \left\{\hat{b}^+, \hat{b}\right\}_+(t)$, m = 1, 2, 3, $\Omega = (\omega^2 - 4^{-1}\gamma^2)^{1/2}$. Квадратичные операторы осциллируют с удвоенной частотой и уменьшаются по экспоненциальной спирали в комплексной фазовой плоскости. Амплитуды квадратов операторов A_m , B_m и

1. В.С. Кирчанов, Известия Вузов, Физика **62**, 178 (2019).

фазы сложным образом зависят от собственной частоты Ω .

Интерметаллиды в фазе Лавеса при гидростатическом сжатии: ab inito вычисления

Е.Е. Кокорина*, М.В. Медведев, И.А. Некрасов, Н.С. Павлов

Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия *E-mail: kokorina@iep.uran.ru

Интерметаллиды в фазе Лавеса представляют большой технологический интерес благодаря относительно высокой температуре Кюри (T_C). Среди всех соединений в фазе Лавеса $GdFe_2$ имеет наибольшую $T_C = 802.5$ К. Интересно, что эта температура даже больше, чем для наиболее богатого железом соединения Gd_2Fe_{17} ($T_C = 475$ K) [1]. В работе представлены ab initio результаты вычислений магнитных и электронных свойств $GdFe_2$, подверженного сжатию гидростатическим давлением.

 $GdFe_2$ имеет кубическую кристаллическую структуру C15 с параметром решетки $a_0 = 7.03$ Å[2], где Gd занимает кристаллографическую позицию 8a (0, 0, 0) и Fe – позицию 16d (5/8, 5/8, 5/8). Электронная структура вычислена с помощью метода LSDA+U [3] в рамках атомных сфер MT-орбиталей (TB-LMTO-ASA v.47) [4]. Гидростатическое давление было введено в рассмотрение с помощью соответствующего относительного изменения параметра решетки a_0 .

В рамках проведенных зонных расчетов показано, что под давлением полный магнитный момент элементарной ячейки $GdFe_2$ уменьшается, тогда как поведение магнитных моментов Fe и Gd различно. Магнитные моменты Fe довольно сильно зависят от давления, тогда как магнитные моменты Gd остаются практически постоянными. Причину этого мы видим в сильной локализации глубоко лежащей 4f оболочки Gd.

На основе результатов зонных расчетов были вычислены гейзенберговские параметры для обменных пар Gd-Gd (I_{Gd-Gd} обмен) и Fe-Fe (I_{Fe-Fe} обмен). Обнаружено, что обменное взаимодействие I_{Fe-Fe} – ферромагнитное, а I_{Gd-Gd} – антиферромагнитное. Величина I_{Fe-Fe} на два порядка выше, чем I_{Gd-Gd} .

Кроме упомянутого взаимодействия, в модель Гейзенберга входит обменный интеграл Fe(3d) - Gd(4f). Величина этого обмена была оценена из предположения, что $GdFe_2$ может быть описан решением для модели Гейзенберга с ближайшими соседями в приближении среднего поля [6]. Зная экспериментальное значение температуры Кюри при различных давлениях [7], совместно с вычисленными параметрами I_{Fe-Fe} и I_{Gd-Gd} обменных взаимодействий можно получить величину Fe(3d) - Gd(4f) обмена. Эта величина оказалась антиферромагнитной и порядка 10 - 25% от обменного взаимодействия I_{Fe-Fe} при соответствующем давлении.

Другой важной особенностью класса интерметаллидов фазы Лавеса является тот факт, что температура Кюри от давления может иметь противоположную тенденцию для разных соединений этого класса. Так, например, для $GdFe_2$ и YFe_2 температура Кюри растет с давлением, а для $ZrFe_2$ – падает. В работе представлены ab initio расчетные данные магнитных характеристик для соединений YFe_2 и $ZrFe_2$ и соображения по объяснению различных тенденций поведения T_C .

Работа поддержана проектом РФФИ № 18-02-00281.

- 1. K.H.J. Buschow, Rep. Prog. Phys. 40, 1179 (1977).
- 2. G.M. Elalfy, R.M. Shabara, S.H. Aly, S. Yehia, Computational Condenced Matter 5, 24 (2015).
- 3. V.I. Anisimov, F. Aryasentiawan and A.I. Lichtenstein, J. Phys. Condens. Matter 9, 767 (1997).
- 4. O.K. Andersen, Phys. Rev. B 12, 3060 (1975).
- 5. A.I. Lichtenstein, H.I. Katnelson, V.P. Antropov, V.A. Gubanov, J. Magn. Magn. Mater. 67, 65 (1987).
- 6. A.V. Lukoyanov, E.E. Kokorina, M.V. Medvedev, I.A. Nekrasov, Phys. Rev. B 80, 104409 (2009).
- 7. M. Brouha, K.H. Buschow, J. Appl. Phys. 44, 4, 183 (1973).

Спин-флуктуационный подход к теории сверхпроводимости в монослоях FeSe

М.М. Коршунов^{1*}, Л.В. Бегунович², Ю.Н. Тогушова²

¹Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия ²Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия *E-mail: mkor@iph.krasn.ru

Обнаружение сверхпроводимости в монослоях $FeSe/SrTiO_3$ с T_C до 100 К демонстрирует ещё одну загадку сверхпроводимости в соединениях железа [1,2]. Данные фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) показывают наличие только одной поверхности Ферми – электронного кармана вокруг точки М, а дырочный карман около Γ -точки отсутствует [3,4].

В работе [5] с помощью просвечивающей электронной микроскопии установлено наличие дополнительного слоя Se между монослоем селенида железа и двойным титановым слоем подложки. Мы рассмотрели влияние такого дополнительного слоя на электронную структуру FeSe/SrTiO₃ без вакансий и с вакансиями в двойном титановом слое методом теории функционала плотности (DFT). При наличии вакансий кислорода атом селена локализует на себе заряд, препятствуя его переносу на монослой FeSe. Однако наличие дополнительного слоя не способствует смещению карманов в Γ -точке ниже уровня Ферми [6]. Сделан вывод, что для согласия с данными ARPES необходимо учитывать эффекты сильных электронных корреляций [7,8].

Для описания эволюции сверхпроводящего состояния с увеличением концентрации электронов x при добавлении калия на монослой $\operatorname{FeSe}/\operatorname{SrTiO_3}[9]$ мы использовали десятиорбитальную модель из работы [10] с параметрами, позволяющими описать переходы Лифшица при изменении x. Для трёх значений химпотенциала, соответствующих различным топологиям поверхности Ферми, построена спин-флуктуационная теория сверхпроводимости. Установлено, что при наличии карманов в Γ -точке доминирует сверхпроводящее состояние со знакопеременным расширенным s-типом параметра порядка. С другой стороны, когда эти карманы отсутствуют, наиболее выигрышным становится состояние с $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии.

Исследование выполнено при финансовой поддержке фонда развития теоретической физики и математики «Базис», а также РФФИ и Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта «Эффекты электронных корреляций и многоорбитальная физика в соединениях железа и купратах» № 19-42-240007.

- 1. Q.Y. Wang et al., Chin. Phys. Lett. 29, 037402 (2012).
- 2. J.-F. Ge et al., Nat. Materials 14, 285 (2015).
- 3. D.F. Liu et al., Nat. Comm. **3**, 931 (2012).
- 4. L. Zhao et al., Nat. Comm. 7, 10608 (2016).
- 5. W. Zhao et al., Science Advances 4(3), 2682 (2018).
- 6. L.V. Tikhonova, M.M. Korshunov, J. Supercond. Nov. Magn. https://doi.org/10.1007/s10948-019-05253-y (2019).
- 7. I.A. Nekrasov, N.S. Pavlov, M.V. Sadovskii, Pis'ma v ZhETF 105, 354 (2017).
- 8. И.А. Некрасов, Н.С. Павлов, М.В. Садовский, ЖЭТФ 153, 582 (2018).
- 9. X. Shi et al., Nat. comm. 8, 14988 (2017).
- 10. H. Eschrig, K. Koepernik, Phys. Rev. B 80, 104503 (2009).

Эффект передачи спин вращающего момента, как отклик неравновесной системы на внешнее возмущение

И.И. Ляпилин

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

Известно, что в ферромагнитных материалах переносом спина возможно управлять магнитным моментом ферромагнетика, используя перенос момента количества движения спинполяризованным током. При этом описание эффекта передачи спин-вращающегося момента связано с решением уравнений переноса спина, а описание переключения или прецессии намагниченности требует решения задач нелинейной динамики. При решении такого рода задач вычисление различных кинетических коэффициентов используется, как правило, хорошо разработанная *теория линейного отклика равновесной системы* на внешнее возмущение. Кинетические коэффициенты при этом выражаются через равновесные корреляционные функции. Задачи такого рода решаются исключительно с использованием кинетических уравнений, в то время как методы неравновесной статистической механики практически не используются. Ситуация меняется радикальным образом, когда требуется найти *отклик неравновесной системы* на дополнительное внешнее возмущение. Решение такого рода задач требует привлечения методов неравновесной статистической механики. Очевидно, что кинетические коэффициенты в этом случае должны выражаться через корреляционные функции, вычисление которых требует использования неравновесного распределения [1].

Такая ситуация реализуется, например, при пропускании спин-поляризованного тока, формируемого тем или иным способом в немагнитном металле, через ферромагнитный слой. При этом обменное взаимодействие между электронами проводимости и локализованными магнитными моментами ферромагнетика выстраивает спиновую поляризацию электронов вдоль намагниченности ферромагнетика. При микроскопическом описании эффекта требуется найти отклик неравновесной системы (*спин-поляризованная подсистема электронов*) на возмущение, обусловленное обменным взаимодействием их с подсистемой локализованных магнитных моментов ферромагнетика. Описание данного эффекта требует привлечения методов неравновесной статистической механики.

Нами рассмотрена схема построения неравновесного распределения, необходимого для нахождения такого отклика. Проведено микроскопическое рассмотрение данного эффекта как отклика неравновесной системы на внешнее возмущение.

1. H.M. Bikkin, I.I. Lyapilin, Non equilbrium thermodynamics and physical kinetics, Walter de Gruyter GmbH, Berlin (2014).

Китаевские материалы и квантовый магнетизм

П.А. Максимов

Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия E-mail: pavelmax@mail.ru

Предложенная Алексеем Китаевым модель анизотропных взаимодействий на гексагональной решетке открыла путь к точно решаемым спиновожидкостным фазам. Позже было предложено искать эту модель в d и f системах с сильным спин-орбитальным взаимодействием с октаэдрическим окружением, которые образуют гексагональную решетку, соединяясь общими гранями. В действительности оказалось, что к сильным китаевским взаимодействиям в этих системах примешиваются другие взаимодействия, например, гейзенберговское. Поэтому ведется поиск новых фаз в приложенном магнитном поле и на других решетках, которые также могут быть описаны моделью Китаева.

Новый диаграммный подход к описанию свойств нормальной фазы спин-поляронного ансамбля в купратных сверхпроводниках

В.В. Вальков¹, В.А. Мицкан^{1*}, М.М. Коровушкин¹, Д.М. Дзебисашвили¹, А.Ф. Барабанов²

¹Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия ²Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Россия *E-mail: mitskan@iph.krasn.ru

В рамках спин-фермионной модели электронного строения купратных сверхпроводников разработана диаграммная форма теории возмущений, позволившая корректно описывать сильную связь подсистемы спинов ионов меди, находящейся в состоянии квантовой спиновой жидкости, с кислородными дырками. Предложенный метод основан на комбинации диаграммной техники Фейнмана и разложения кумулянта для спиновых операторов.

Существенно, что удалось получить точное аналитическое выражение для части массового оператора, которая связана с одно- и двухузельными процессами рассеяния во всех порядках теории возмущений. Суммирование всех графиков с одноцентровыми корреляторами позволило точно учесть главный вклад сильной спин-фермионной связи и определить большую величину энергии связи спин-поляронных квазичастиц. А учет вкладов в массовый оператор, определяемых двухцентровыми корреляторами, привел к воспроизведению важных особенностей спектра фермиевских возбуждений, в частности, к формированию локального минимума спектра в окрестности точки ($\pi/2$, $\pi/2$) зоны Бриллюэна, что хорошо согласуется с экспериментальными данными по купратным сверхпроводникам. Расчет спектральной интенсивности при движении по зоне Бриллюэна демонстрирует их модуляцию, что может привести к образованию псевдощели.



Рис. 1. Спектр (а) и спектральная интенсивность (в), полученные в рамках спин-фермионной модели.

Исследование выполнено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 18-02-00837, 18-42-240014), Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта «Одноорбитальная эффективная модель ансамбля спин-поляронных квазичастиц в проблеме описания промежуточного состояния и псевдощелевого поведения купратных сверхпроводников».

Неквазичастичное описание ВТСП купратов

<u>А.С. Москвин</u>*, Ю.Д. Панов

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия *E-mail: alexander.moskvin@urfu.ru

Результаты многочисленных экспериментальных и теоретических исследований ВТСП купратов указывают на «непреодолимые» расхождения с представлениями модельной теории Бардина-Купера-Шриффера (БКШ), применимой для описания типичных низкотемпературных или высокотемпературных «водородных» сверхпроводников, и свидетельствуют в пользу бозонного механизма ВТСП купратов. При этом неприменимость БКШ теории для описания ВТСП не умаляет важной роли электронно-колебательного взаимодействия (ЭКВ) в формировании необычных свойств купратов. БКШ парадигма предполагает использование одно(квази) частичного «импульсного» представления. Однако более адекватное описание сильных локальных и нелокальных корреляций, особенно в условиях присущей ВТСП купратам неоднородности, достигается в рамках «координатного» представления, на что прямо указывают, в частности, данные STM. Сегодня все более популярным становится осознание необходимости выхода за рамки традиционного квазичастичного описания купратов и использование т.н. «неквазичастичного» («unparticle», «beyond quasiparticles») подхода. В рамках такого подхода «ВТСП-активные» ${\rm CuO^2}$ -плоскости купратов рассматриваются нами как система зарядовых «триплетов», $[{\rm CuO_4}]^{5-,6-,7-}$ -центров (номинально ${\rm Cu}^{3+,2+,1+}$ -центров) с «родительским» магнитным $s = 1/2 [CuO_4]^{6-}$ -центром и бесспиновыми электронным $[CuO_4]^{7-}$ и дырочным [CuO₄]⁵⁻-центрами. Для описания зарядовой степени свободы в такой модели используется S = 1 псевдоспиновый формализм [1], а для квартета спин-зарядовых состояний – обобщенные Х-операторы Хаббарда. Адекватная модель купрата включает учет сильного ЭКВ и электрон-решеточной релаксации, в простейшем приближении (Хольстейн) приводящих к радикальной редукции корреляционных параметров. Мы вводим и обосновываем эффективный гамильтониан модельного купрата в координатном представлении с перенормированными за счет ЭКВ константами. Сценарий зарядовых триплетов с учетом s = 1/2для Cu^{2+} -центра предполагает формирование необычных локальных квантовых суперпозиций с неопределенной зарядовой и спиновой плотностью, большого набора локальных параметров порядка и соответствующих возможных фазовых состояний системы. Одним из возможных фазовых состояний такой системы является электронно-дырочная Бозе-жидкость, эквивалентная системе локальных «композитных» бозонов, конденсация которых и приводит к ВТСП. Используя простое двухподрешеточное приближение эффективного поля (MFA) для двухцентровых слагаемых, включающее модель Кэрона-Пратта (Caron & Pratt) для усреднения Ферми-операторов [2,3], мы нашли возможные фазовые состояния – антиферромагнитный изолятор (AFMI), зарядовый шахматный порядок (CO), Бозе-сверхпроводник (BS) с dсимметрией параметра порядка, «странный» металл, и построили фазовые диаграммы, качественно и полуколичественно воспроизводящие все особенности экспериментально наблюдаемых фазовых диаграмм систем типа LSCO. Псевдощелевая фаза ассоциируется с квантовым «предшественником» (precursor) MFA-фаз (СО, или CDW, и BS) типа квантовой жидкости электронно-дырочных димеров. Аналогично «неелевскому» основному состоянию квантового антиферромагнетика параметры порядка в этих MFA-фазах (амплитуда волны зарядовой плотности и плотность сверхпроводящего конденсата) сильно подавлены.

1. A.S. Moskvin, Phys. Rev. B 84, 075116 (2011).

2. Yu.D. Panov, Physics of Metals and Metallography 120, 34 (2019).

3. L.G. Caron, G.W. Pratt Jr., Rev. Mod. Phys. 40, 802 (1968).

Динамика спиновых кроссоверов при внезапных возмущениях

Ю.С. Орлов¹, С.В. Николаев², <u>С.Г. Овчинников^{1*}</u>

¹Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия ²Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия *E-mail: sgo@iph.krasn.ru

Рассмотрена многоэлектронная модель магнитного диэлектрика со спиновым кроссовером между двумя термами, высокоспиновым (HS) и низкоспиновым S = 0 (*LS*), разделенными спиновой щелью *D*, которая может менять знак с ростом давления. Учитываются обменные взаимодействия между *HS* состояниями и упругое взаимодействие катиона с окружающими анионами. На основе релаксационного уравнения для матрицы плотности описана сверхбыстрая динамика световозбужденных состояний в магнитоупорядоченных веществах со спиновым кроссовером под давлением. Обнаружены осцилляции намагниченности и заселенности высокоспинового состояния при переходе системы из возбужденного Франк-Кондоновского состояния в одно из метастабильных состояний. Обсуждается изменение релаксации с ростом давления в результате спинового кроссовера.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 18-02-00022.

Особенности фазовых состояний разбавленного двумерного магнетика вблизи точки фрустрации

Ю.Д. Панов*, Д.Н. Ясинская, В.А. Улитко, А.С. Москвин

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия *E-mail: yuri.panov@urfu.ru

Для двумерного изинговского магнетика, разбавленного немагнитными заряженными подвижными примесями, рассмотрена обобщенная модель Блюма–Эмери–Гриффитса [1]. Ранее [2,3] для рассмотрения конкуренции спинового и зарядового упорядочений в ВТСП купратах нами была предложена упрощенная статическая двумерная спин-псевдоспиновая модель для CuO_2 плоскости купрата, в которой наряду с CuO_4^{6-} центрами, обладающими спином 1/2, рассматриваются взаимодействующие CuO_4^{5-} и CuO_4^{7-} центры со спином 0 в основном состоянии. Многоэлектронные валентные состояния CuO_4^{5-} и CuO_4^{7-} (соответствующие формально состояниям ионов меди $Cu^{1+;2+;3+}$) описываются как компоненты псевдоспинового триплета S = 1 с $M_S = -1, 0, +1$ соответственно, что позволяет использовать псевдоспиновый формализм. В рамках этого подхода гамильтониан статической спин-псевдоспиновой модели имеет вид:

$$\mathcal{H} = \Delta \sum_{i} S_{zi}^{2} + V \sum_{\langle ij \rangle} S_{zi} S_{zj} + J s^{2} \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_{zi} \sigma_{zj} - \mu \sum_{i} S_{zi}, \tag{1}$$

где S_{zi} это *z*-компонента псевдоспина S = 1 на узле, $\sigma_{zi} = P_{0i}s_{zi}/s$ – нормированная *z*-компонента спина s = 1/2, умноженная на проектор $P_{0i} = 1 - S_{iz}^2$ на состояние с $M_S = 0$. Параметры $\Delta = U/2$ и V > 0 соответствуют зарядовым корреляциям на узле и между узлами решетки, J – обменное взаимодействие Изинга. Химический потенциал μ позволяет учесть условие постоянства допированного в CuO₂ плоскость заряда, отсчитываемого от родительского состава, в виде $nN = \sum \langle S_{zi} \rangle = \text{const}$, где n – плотность допированного заряда. Суммирование идет по узлам двумерной квадратной решетки, $\langle ij \rangle$ означает ближайших соседей.

В приближении среднего поля [2–5] нами были изучены свойства системы в основном состоянии и в приближении Бете [5,6], получены температурные фазовые диаграммы. В зависимости от величины одноцентровых заряд-зарядовых корреляций в основном состоянии реализуется либо немагнитная зарядово-упорядоченная фаза, которая является аналогом квантового парамагнетика, либо разбавленная магнитно-упорядоченная фаза. Значение корреляционного параметра, при котором происходит смена типа упорядочения в основном состоянии, определяет точку фрустрации в данной модели, которая является классическим аналогом квантовой критической точки. Методом классического Монте-Карло исследованы особенности термодинамических свойств системы вблизи точки фрустрации, включая разделение фаз, неуниверсальное критическое поведение, а также необычные возвратные фазовые переходы.

1. M. Blume, V.J. Emery, R.B. Griffiths, Phys. Rev. A 4, 1071 (1971).

- 2. Yu.D. Panov, A.S. Moskvin, A.A. Chikov, I.L. Avvakumov, JSNM 29, 1077 (2016).
- 3. Yu.D. Panov, A.S. Moskvin, A.A. Chikov, K.S. Budrin, JLTP 187, 646 (2017).
- 4. Y.D. Panov, K.S. Budrin, A.A. Chikov, A.S. Moskvin, JETP Letters 106, 440 (2017).
- 5. Y.D. Panov, V.A. Ulitko, K.S. Budrin, A.A. Chikov, A.S. Moskvin, JMMM 477, 162 (2019).
- 6. Ю.Д. Панов, А.С. Москвин, В.А. Улитко, А.А. Чиков, ФТТ 61, 1676 (2019).

Антиадиабатические фононы и сверхпроводимость в теории Элиашберга – МакМиллана

М.В. Садовский

Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург E-mail: sadovski@iep.uran.ru

Теория сверхпроводимости Элиашберга – МакМиллана основана на применимости адиабатического приближения. В данной работе предпринята попытка описания электрон – фононного взаимодействия в рамках подхода Элиашберга – МакМиллана в ситуации, когда характерная частота фононов Ω_0 становится достаточно большой (сравнимой или превышающей энергию Ферми E_F). Рассматривается общее определение спаривательной электрон – фононной константы связи λ с учетом конечности частоты фононов. Получено выражение для обобщенной константы связи λ_D , определяющей перенормировку массы с учетом конечной ширины зоны проводимости $D \sim E_F$, и описывающей плавный переход от адиабатического режима в область неадиабатичности. В условиях сильной неадиабатичности в теории возникает новый параметр малости $\lambda D/\Omega_0 \sim \lambda E_F/\Omega_0 \ll 1$, а поправки к электронному спектру становятся несущественными (также как и соответствующие вершинные поправки). В тоже время температура сверхпроводящего перехода и в антиадиабатическом пределе определяется спаривательной константой связи Элиашберга – МакМиллана λ [1]. Рассмотрено влияние антиадиабатических фононов на температуру сверхпроводящего перехода в модели с дискретным набором частот (оптических) фононов. Предложено общее выражение для температуры сверхпроводящего перехода Т_с, справедливое в ситуации, когда один (или несколько) таких фононов становятся антиадиабатическими. Исследован вопрос о вкладе таких фононов в кулоновский псевдопотенциал. Показано, что антиадиабатические фононы не дают вклада в толмачевский логарифм, величина которого определяется парциальными вкладами только от адиабатических фононов [2]. Полученные результаты обсуждаются в связи с проблемой необычно высокой температуры сверхпроводящего перехода в монослое FeSe на STO.

1. М.В. Садовский, ЖЭТФ 155, 527 (2019).

2. М.В. Садовский, Письма в ЖЭТФ 109, 165 (2019).

Topological spintronics with (anti)skyrmions and bimerons

O.A. Tretiakov

School of physics, University of New South Wales, Sydney, Australia E-mail: o.tretiakov@unsw.edu.au

Skyrmions are topologically protected spin textures, which may be used in spintronic devices for information storage and processing. However, skyrmions in ferromagnets have some intrinsic difficulties, which must be overcome to use them for spintronic applications, such as the inability to move along electric current due to skyrmion Hall effect [1]. I will discuss how to work around this problem by using instead of skyrmions different anisotropic topological objects – antiskyrmions, recently observed in systems with anisotropic Dzyaloshinskii-Moriya interaction [2]. I will explain their current-driven dynamics in both ferromagnets and antiferromagnets based on the transformation between skyrmion and antiskyrmion. Yet as another solution to eliminate the skyrmion Hall effect, I will also talk about skyrmions in antiferromagnetic materials [3]. We demonstrate how they can be stabilized [4] and manipulated at finite temperatures [3]. An antiferromagnetic skyrmion is a composite topological object with a similar but of opposite sign spin texture on each sublattice, which results in a complete cancellation of the Magnus force and as a result absence of skyrmion Hall effect. However, the topological spin Hall effect of antiferromagnetic skyrmion texture is nonzero and enhances the spin transfer torques acting on skyrmions [5]. Finally, I will describe the existence in antiferromagnets of bimerons, a pair of two merons that can be understood as the in-plane magnetized version of a skyrmion [6].

- 1. K. Litzius, I. Lemesh, B. Kruger, P. Bassirian, L. Caretta, K. Richter, F. Buttner, K. Sato, O.A. Tretiakov, J. Forster, R.M. Reeve, M. Weigand, I. Bykova, H. Stoll, G. Schutz, G.S.D. Beach, and M. Klaui, Nature Physics **13**, 170 (2017).
- 2. A.K. Nayak, V. Kumar, T. Ma, P. Werner, E. Pippel, R. Sahoo, F. Damay, U.K. Röbler, C. Felser, and S.S.P. Parkin, Nature **548**, 561 (2017).
- 3. J. Barker and O.A. Tretiakov, Phys. Rev. Lett. 116, 147203 (2016).
- 4. P.F. Bessarab, D. Yudin, D.R. Gulevich, P. Wadley, M. Titov, and O.A. Tretiakov, Phys. Rev. B 99, 140411(R) (2019).
- 5. C.A. Akosa, O.A. Tretiakov, G. Tatara, and A. Manchon, Phys. Rev. Lett. 121, 097204 (2018).
- 6. B. Göbel, A. Mook, J. Henk, I. Mertig, and O.A. Tretiakov, Phys. Rev. B 99, 060407(R) (2019).

Исследование собственных мод коллективных колебаний в многозонных сверхпроводниках

<u>Ю.М. Билинский</u>^{1,2*}, П.И. Арсеев¹

¹Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия ²Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия *E-mail: yu.bilinsky@yandex.ru

Для однозонных сверхпроводников известен метод вычисления калибровочноинвариантного отклика, который подразумевает выбор специальной калибровки, в которой параметр порядка Δ (r, t) является действительным. При этом фаза калибровочного преобразования становится новой динамической переменной системы θ (r, t). Этот метод также позволяет находить моды коллективных колебаний, если при некоторых значениях частоты и волнового вектора будут наблюдаться нетривиальные решения на физические величины при отсутствии внешних полей. В данной работе рассматривается модификация этого метода в применении к многозонным сверхпроводникам (сверхпроводящим полуметаллам).

В полуметаллах зонная структура устроена таким образом, что на уровне Ферми существуют состояния, лежащие в разных зонах. При образовании сверхпроводящего состояния электроны из разных зон образуют два разных конденсата куперовских пар, которые, тем не менее, влияют друг на друга через фононное взаимодействие:

$$\Delta_{\mathbf{q}}^{\alpha}(t) = \sum_{\alpha'} g^{\alpha \alpha'} \sum_{\mathbf{k}'} \left\langle c_{\mathbf{k}',\uparrow}^{\alpha'}(t) \, c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},\downarrow}^{\alpha'}(t) \right\rangle. \tag{1}$$

Здесь $g^{\alpha \alpha'}$ – параметр, связанный с силой притяжения между электронами, $c^{\alpha'}_{\mathbf{k}', s}$ – операторы уничтожения электронов, *s* – спиновый индекс, **k** – квазиимпульс, α , α' – зонные индексы. Параметры порядка $\Delta^{\alpha}_{\mathbf{q}}(t)$ входят в гамильтониан следующим образом:

$$\hat{V}_B = -\sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \left(c^{\alpha+}_{\mathbf{k},\downarrow}(t) \, c^{\alpha+}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\uparrow}(t) \, \Delta^{\alpha}_{\mathbf{q}}(t) + h.c. \right). \tag{2}$$

В системе такого вида существуют два типа собственных мод коллективных колебаний, связанных с колебаниями фаз аномальных средних $f^{\alpha}_{{\bf q}} = \sum_{{\bf k}'} \langle c^{\alpha}_{{\bf k}',\uparrow}(t) \, c^{\alpha}_{-{\bf k}'+{\bf q},\downarrow}(t) \rangle$. Первая мода, в которой фазы в различных зонах колеблются примерно синфазно и с одинаковыми амплитудами, соответствует плазменным колебаниям электронов. Другая мода, полученная А. Леггеттом [1], соответствует противофазным колебаниям фаз.

Фазы $\theta_i^{\alpha}(t)$ вводятсся помощью подстановки:

$$\Psi_{s}\left(\mathbf{r},t\right) = \sum_{i} \sum_{\alpha} \psi_{i}^{\alpha}\left(t\right) w^{\alpha}\left(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{i}\right) e^{i\theta_{i}^{\alpha}\left(t\right)}.$$
(3)

Здесь $\Psi_s(\mathbf{r},t)$ – полевые операторы электронов, $w^{\alpha}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)$ – функции Ванье для электронов в кристалле. Гамильтониан не является калибровочно-инвариантным относительно фаз конденсатов и после подстановки будет явно зависеть от их разницы. Как и в однозонном случае, фазы $\theta_i^{\alpha}(t)$ фиксируются условием действительности аномальных средних $f_i^{\alpha} = \sum_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}}^{\alpha} e^{i\mathbf{qR}_i}$.

Известно, что кулоновское взаимодействие сильно влияет на коллективные колебания. При этом для корректного описания плазменных колебаний достаточно учесть кулоновское взаимодействие в приближении Хартри. Обменный член, который обычно не учитывался в предыдущих работах по данной теме, добавляет в гамильтониан дополнительную связь между фазами в разных зонах. При $\mathbf{k} = 0$ этот член не оказывает никакого влияния на частоту моды Леггетта, однако вносит некоторую поправку к зависимости частоты колебаний от волнового вектора. Также несколько модифицируется выражение для плазменной частоты.
Данный метод позволяет также строить описание многозонных сверхпроводников при температуре, близкой к критической, получая из микроскопики многозонные уравнения Гинзбурга-Ландау. В дальнейших исследованиях предполагается модифицировать вывод уравнения Гинзбурга-Ландау таким образом, чтобы оно могло описывать динамику параметра порядка в многозонном сверхпроводнике и учитывать преобразование полей при введении фаз $\theta_i^{\alpha}(t)$.

1. A.J. Leggett et al., Progress of Theoretical Physics 36(5), 901 (1966).

К расчёту поля конечного магнитного цилиндра

В.В. Дякин, О.В. Кудряшова*, В.Я. Раевский

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

Пополнение списка решённых теоретических задач магнитного контроля является весьма актуальным для данной области научных исследований. Представляемая задача как раз и служит этой цели.

Итак, была поставлена задача по поиску результирующего поля конечного цилиндра с постоянной магнитной проницаемостью, помещённого в заданное, вообще говоря неоднородное, внешнее намагничивающее поле. Базовое интегро-дифференциальное уравнение магнитостатики относительно вектора напряжённости магнитного поля [1] в силу постоянства магнитной проницаемости с помощью приёмов теории поля было сведено к виду, согласно которому поле в произвольной точке пространства определяется значением его нормальной составляющей исключительно на границе всякого магнетика вообще и цилиндра в частности. На основе полученного уравнения было выписано и уравнение для определения этой нормальной составляющей. И если данная задача в принятой постановке не обещала простоты аналитического исполнения, то численно разрешилась вполне просто: в результате дискретизации интегро-дифференциальное уравнение было сведено к системе линейных алгебраических уравнений, для матричных элементов которой были получены выражения, позволяющие не терять точность на данной стадии решения. При этом необходимость построения сетки только на поверхности магнетика существенно упростила процедуру решения и позволила получать результат при разумных затратах машинной памяти и времени даже вполне скромного по своим возможностям компьютера. В итоге на языке программирования FORTRAN была составлена компьютерная программа по расчёту напряжённости результирующего поля, которая была протестирована на точно решаемых задачах. Сверка с тестами дала возможность принять апостериорную оценку точности решения: число верных значащих цифр решения в зависимости от соотношения параметров и переменных варьируется в диапазоне от двух до четырёх. По результатам расчётов были построены различные зависимости, могущие иметь интерес для практики магнитного контроля. Типы координатных зависимостей компонент поля, существенно отличающиеся от таковых, построенных для тел с гладкими поверхностями (шар, эллипсоид) могут служить указанием при ответе на вопрос о форме сокрытого от доступа тела, что даёт возможность решения частной обратной задачи, в общем случае не разрешимой. Разработанный алгоритм планируется расширить и применить его к решению задач о конечном цилиндре с внутренним дефектом, о конечном фрагменте трубы, как бездефектном, так и имеющем внутренний дефект.

Судя по рекламным проспектам популярного пакета конечно-элементного анализа Ansys, задачи в схожей постановке доступны к решению с его помощью, но результаты нам найти не удалось. К тому же, заложенный там подход на основе дифференциальных уравнений Максвелла изначально заведомо является менее удачным, поскольку требует построения трёхмерной сетки как внутри магнетика, так и вне его.

1. В.В. Дякин, Математические основы классической магнитостатики, Екатеринбург: РИО УрО РАН (2016).

Обратная задача магнитостатики в полях насыщения

В.В. Дякин, О.В. Кудряшова*, В.Я. Раевский

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

Рассматривается типичная обратная задача магнитостатики - по заданному внешнему полю и известному (измеренному) результирующему полю в некоторой доступной для измерения конечной области вне ферромагнитного тела определить либо форму тела (скрытого от прямого наблюдения, например, под слоем немагнитного и непрозрачного материала), либо форму внутреннего дефекта в нем типа воздушной полости. За основу берется основное интегро-дифференциальное уравнение магнитостатики, эквивалентное системе уравнений Максвелла. Постоянное внешнее поле H_0 таково, что под его действием ферромагнетик намагничен до состояния насыщения. В этом случае вектор намагниченности М становится постоянным, фиксированным (его модуль предполагается равным намагниченности насыщения материала тела, а направление предполагается совпадающим с направлением внешнего, «насыщающего» поля H_0). Исходя из этого условия, выведено более простое для исследования интегро-дифференциальное уравнение уже для случая ферромагнитного насыщения. В качестве «неизвестных» в этом уравнении выступают форма, размер и расположение ферромагнитного тела (или упомянутого типа дефекта в нем). Для исследования вопроса единственности решения такого типа обратной задачи для полученного уравнения (для исходного интегро-дифференциального уравнения магнитостатики таковая в общем случае отсутствует) устанавливается ее аналогия с досконально изученным вопросом единственности решения классической задачи гравиметрии – восстановление формы гравирующего тела по измерениям гравитационного поля вне его. На основании известных результатов для такой задачи доказывается однозначность определения формы ферромагнитного тела или полости в нем для широкого класса практически встречающихся ситуаций.

В качестве важного иллюстративного примера получены аналитические формулы для определения результирующего поля ферромагнитного тела шаровой формы, помещенного во внешнее поле насыщения, из которых сразу следует возможность однозначного определения из этих формул положения и размеров шарового ферромагнетика в непрозрачной и немагнитной среде на основании измерения какой-либо компоненты напряженности результирующего поля в 4 точках вне тела.

Далее, при более широком предположении о звездности области, занятой ферромагнетиком (или дефектом в нем), относительно хотя бы одной точки, выводятся интегродифференциальные уравнения для функции, задающей поверхность тела (дефекта) в сферической системе координат (начало этой сферической системы координат располагается в той точке, относительно которой область является звездной). Основная ценность полученных уравнений состоит в том, решения этих уравнений определяют форму, локализацию и размеры ферромагнитного тела или полости в нем без типичного априорного предположения о принадлежности занимаемых ими областей какому-либо конкретному классическому геометрическому классу.

Фазовая диаграмма магнетика с китаевскими взаимодействиями α -RuCl₃

П.А. Максимов

Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия E-mail: pavelmax@mail.ru

Мы предлагаем набор эмпирических критериев, которые серьезным образом ограничивают выбор микроскопической модели взаимодействия спинов в $\alpha - \operatorname{RuCl}_3$. Полученные параметры оказываются больше, чем предложенные ранее, и должны включать остальные параметры, разрешенные симметрией. Учитывая квантовые поправки, мы можем с помощью предложенной модели описать эволюцию спектра магнонов в магнитном поле и фазовую диаграмму $\alpha - \operatorname{RuCl}_3$.

Спиновые возбуждения в неколлинеарной магнитной фазе LaMn₂O₅

В.В. Меньшенин

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

Исследованы однородные спиновые возбуждения в соединении LaMn₂O₅, содержащем ионы марганца с разными зарядами в кристаллографических позициях 4h и 4f, обладающем неколлинеарным упорядочением магнитных моментов, локализованных на этих ионах. Задача решалась с помощью использования неприводимых спиновых операторов, обладающих тем свойством, что проекции средних значений этих операторов являются базисными функциями неприводимых представлений пространственной группы рассматриваемого соединения, соответствующих волновому вектору $\mathbf{k} = (0, 0, 1/2)$. Последнее условие позволяет анализировать однородные в пространстве динамические процессы магнитной подсистемы изучаемого оксида. Для анализа этих процессов записан гамильтониан магнитной системы с помощью неприводимых спиновых операторов. Динамика спинов описывалась с помощью линеаризованных уравнений движения для неприводимых спиновых операторов. Упрощение описания динамики спинов достигалось с помощью определения спин-волновых представлений, позволяющих определить те динамические переменные, которые участвуют в динамическом процессе. Показано, что наличие неколлинеарного антиферромагнитного упорядочения ионов марганца в разных кристаллографических позициях приводит к необходимости помимо определения частот спиновых возбуждений формулировать также условия устойчивости магнитного состояния, относительно которого рассматриваются динамические процессы.

1. В.В. Меньшенин, ФММ **120**, 5, 471 (2019).

The influence of the real part of the self-energy function on the magnetic quantum oscillations of magnetization and resistance in layered metals

T.I. Mogilyuk 1* , P.D. Grigoriev 2

¹National research center "Kurchatov institute", Moscow, Russia ²Landau institute for theoretical physics RAS, Moscow, Russia *E-mail: 5taras@mail.ru

Our goal was to analyze the effect of taking into account the magnetic oscillations of the real part of the self-energy part of the electrons $\operatorname{Re}\Sigma$ on the shape of the quantum magnetization oscillations and on the magnetoresistance of layered conductors. In the limit of strong quantum oscillations, which is possible only in two-dimensional or quasi-two-dimensional layered materials, the real part of the selfenergy part of the electrons $\operatorname{Re}\Sigma$ also oscillates strongly. Usually it is neglected, taking into account only its imaginary part $Im\Sigma$, since it is assumed that $Re\Sigma$ only shifts the chemical potential and does not affect the observed properties. However, as our calculations show, $\operatorname{Re}\Sigma$ oscillations affect the observed properties, since they shift the chemical potential relative to the Landau level even on average over the period of quantum oscillations. Oscillations of $\text{Re}\Sigma$ affect the shape of the quantum magnetization oscillations [1,2], which is used to experimentally determine the regime of quantum oscillations: at constant chemical potential or at a constant electron density. Also, these oscillations change the monotonic part in a strong field by a coefficient of the order of 2 [3,4], the angular dependence and the shape of the quantum oscillations of the magnetoresistance [5,6]. Perhaps, therefore, despite attempts in organic metals to achieve a constant electron density regime, the shape of the magnetization oscillations remained consistent with the constant chemical potential. This question is not only of great practical importance for the analysis of numerous experiments, but also of substantial interest for the development of the theory of magnetic quantum oscillations.

T.I.M. acknowledges the RFBR grants № 19-02-01000, 18-32-00205, 18-02-01022, 18-02-00280.

- 1. P.D. Grigoriev, JETP 92, 1090 (2001).
- 2. T. Champel and V.P. Mineev, Phys. Rev. B 66, 195111 (2002).
- 3. A.D. Grigoriev, P.D. Grigoriev, Low Temp. Phys. 40, 367 (2014).
- 4. P.D. Grigoriev, T.I. Mogilyuk, Phys. Rev. B 90, 115138 (2014).
- 5. T.I. Mogilyuk, P.D. Grigoriev, Phys. Rev. B 95, 165120 (2017).
- 6. P.D. Grigoriev, T.I. Mogilyuk, J. Phys.: Conf. Ser. 1038, 012123 (2018).

Spontaneous symmetry breaking in an extended Dicke model

S.S. Seidov*, S.I. Mukhin

National university of science and technology MISIS, Moscow, Russia *E-mail: alikseidov@yandex.ru

We consider an extended Dicke Hamiltonian of an ensemble on N two-level systems interacting with bosonic mode:

$$\hat{H} = \omega \hat{a}^{\dagger} \hat{a} + ig \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(\hat{a}^{\dagger} - \hat{a} \right) \sum_{j}^{N} \hat{\sigma}_{j}^{y} - E_{J} \sum_{j}^{N} \hat{\sigma}_{j}^{z} + (1+\varepsilon) \frac{g^{2}}{2} \sum_{jk}^{N} \hat{\sigma}_{j}^{y} \hat{\sigma}_{k}^{y}.$$
(1)

A single two-level system is described as a spin 1/2 particle with projection operators $\hat{\sigma}_j^{x,y,z}$. The $\propto g^2$ term arises from dipole-dipole interaction between the dipoles in the different junctions. Case of $\varepsilon \neq 0$ was studied in paper [1], the sign depends on type of inter-spin interaction. We consider the case of $\varepsilon = 0$ which describes an ensemble of Josephson junctions interacting with photonic mode through gauge-invariant shift of each junctions phase [2].

The Hamiltonian commutes with parity operator (collective spin operators $\hat{S}_{x,y,z} = \sum \sigma_j^{x,y,z}$ were introduced):

$$\hat{\Pi} = \exp\{i\pi(\omega\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \hat{S} + \hat{S}_z)\},\tag{2}$$

meaning there is a corresponding conservation law. Formally the symmetry is never broken for any coupling *g*, but in thermodynamic limit it becomes exponentially unstable and a spontaneous symmetry breaking occurs.

It was shown previously, that the system with $\varepsilon < 0$ undergoes a symmetry breaking phase transition in thermodynamic limit of $S \to \infty$ [1,3] and that it is not present if ε is greater than zero. Our calculations show that for $\varepsilon = 0$ there is also a phase transition, but different from both previous cases. It also happens at thermodynamic limit, but the critical coupling constant tends to infinity instead of zero, like for $\varepsilon < 0$. We conclude, that the case of $\varepsilon = 0$ differs from $\varepsilon \neq 0$.

1. D. De Bernardis, T. Jaako, and P. Rabl, Phys. Rev. A 97, 043820 (2018).

2. S.I. Mukhin and N.V. Gnezdilov, Phys. Rev. A 97, 053809 (2018).

3. C. Emary, T. Brandes, Phys. Rev. E 67, 066203 (2003).

Компьютерное моделирование решеточного бозе-газа с фиксированной псевдонамагниченностью

В.А. Улитко*, А.А. Чиков, В.В. Конев, Ю.Д. Панов

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия *E-mail: vasiliy.ulitko@urfu.ru

Для исследования свойств модельных ВТСП-купратов нами ранее проводилось компьютерное моделирование двумерной спин-псевдоспиновой системы при помощи классического метода Монте-Карло [1,2]. Основной проблемой при моделировании такой системы была необходимость строго соблюдать условие постоянства среднего значения псевдоспина. Нами была разработана модификация алгоритма Метрополиса, позволяющая точно учитывать указанное условие при каждом шаге Монте-Карло. Такой алгоритм может быть использован для двумерных решеточных моделей с условием постоянства среднего значения некоторой дискретной степени свободы. В докладе приводится обобщение этого алгоритма на случай с непрерывно распределенной псевдонамагниченностью. Примером такой системы может служить модель квантового решеточного бозе-газа [3,4]. Нами выведен вид условной функции распределения для псевдонамагниченности на узле, удовлетворяющей условию постоянства среднего значения и проведено компьютерное моделирование данной модели. Результаты работы алгоритма сравнивались с результатами, полученными квантовым алгоритмом Stochastic Green Function (SGF) [5].

Также нами была разработана параллельная версия алгоритма, работающая на видеокартах и графических ускорителей NVIDIA. Для оценки производительности была исследована зависимость времени работы алгоритма от числа узлов решетки.

Работа выполнена при поддержке Программы 211 Правительства Российской Федерации (соглашение 02.А03.21.0006) и проектов № 2277 и № 5719 Министерства Образования и Науки Российской Федерации, а также при поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00837/18.

- 1. Y.D. Panov et al., Journal of Low Temperature Physics 187(5), 646 (2017).
- 2. Y.D. Panov et al., J. Magn. Magn. Mater 477, 162 (2019).
- 3. A.S. Moskvin et al., Physics of the Solid State 59(11), 2127 (2017).
- 4. Y.D. Panov et al., Acta Physica Polonica A 133(3), 426 (2018).
- 5. V.G. Rousseau, Phys. Rev. E 78, 056707 (2008).

Многомасштабная динамика намагниченности в парамагнетике с дипольным межчастичным взаимодействием

К.Б. Циберкин

Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Россия E-mail: kbtsiberkin@psu.ru

Локализованные волны намагниченности (солитоны) в кристаллах с сильным межчастичным взаимодействием – ферромагнетиках и антиферромагнетиках – подробно изучаются в течение длительного времени и находят широкое применение в разработке новых электронновычислительных устройств [1,2]. В работе [3] продемонстрирована возможность реализации солитонов в парамагнетике, связанном только дипольным взаимодействием. Уравнения динамики компонент намагниченности, выведенные в приближении сплошной среды, применением специального преобразования приводятся к нелинейному уравнению Шрёдингера.

В настоящей работе уравнения динамики намагниченности выведены из уравнений Гейзенберга для операторов компонент спинов в кристалле с простой кубической решёткой, помещённой в постоянное магнитное поле, и затем совершён переход к пределу сплошной среды. Полученные уравнения для динамики компонент намагниченности анализируются универсальным методом многих масштабов [4]. Малым параметром выступает безразмерная интенсивность дипольного взаимодействия – отношение его характерной энергии к энергии зеемановского расщепления. В качестве базового решения используется бегущая волна, для амплитуды которой удаётся выстроить иерархическую цепочку уравнений в различных порядках малости. В первом и втором порядках разложения по параметру взаимодействия реализуются уравнения, решение которых даёт поправки к частотам собственных колебаний системы. Они обусловливают дипольное уширение спектральных линий.

В третьем порядке разложения для амплитуды колебаний поперечных компонент намагниченности удаётся получить связанную систему уравнений типа Шрёдингера с кубической нелинейностью, допускающую решение в виде солитонов. Проанализирован вклад несекулярной части дипольного взаимодействия в динамику намагниченности и показано, что она ограничивает возможные направления, вдоль которых могут распространяться солитоны. В отличие от результатов, представленных в [3], где несекулярные члены не учитывались, и солитоны намагниченности в таком приближении могут распространяться в любом направлении, получено, что они могут двигаться в пределах сектора шириной 90°, ось симметрии которого ориентирована вдоль кристаллографической оси [110].

Описанные результаты опубликованы в работе [5].

Исследование выполнено при поддержке РФФИ (грант № 17-42-590271) и Министерства образования и науки Пермского края (проект № С-26/798).

- 1. A.M. Kosevich, B.A. Ivanov, A.S. Kovalev, Phys. Rep. 194, 117 (1990).
- 2. А.Б. Борисов, В.В. Киселев, Нелинейные волны, солитоны и локализованные структуры в магнетиках, Екатеринбург: УрО РАН (2009).
- 3. Н.П. Гиоргадзе, Р.Р. Хомерики, ФТТ **37**, 929 (1995).
- 4. А. Найфэ, Методы возмущений, Москва: Мир (1976).
- 5. К.Б. Циберкин, ЖЭТФ 154, 1151 (2018).

Сопротивление Холла в направлении оси с в электронно-легированном сверхпроводнике

Т.Б. Чарикова^{1*}, Н.Г. Шелушинина¹, О.Е. Петухова¹, М.Р. Попов¹, А.А. Иванов²

¹Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия ²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия *E-mail: charikova@imp.uran.ru

До настоящего времени вопрос природы нормального состояния остается открытым [1]. Дополнительную сложность в определении электронной (металлической или более экзотической) фазы создает наличие антиферромагнитного упорядочения в сверхпроводящих соединениях при определенном типе и уровне легирования. Электронное легирование достигается путем замены ионов Nd^{3+} в исходном антиферромагнитном соединении $\mathrm{Nd}_2\mathrm{CuO}_4$ на Ce^{4+} с образованием несверхпроводящиего антиферромагнетика $\mathrm{Nd}_{2-x}\mathrm{Ce}_x\mathrm{CuO}_{4+\delta}$. В результате дополнительного отжига ($\delta \rightarrow 0$) кристаллическая структура представляет собой набор проводящих плоскостей CuO_2 , разделенных расстоянием 0.6 нм в направлении оси *с*. Соединение обладает ярко выраженными двумерными свойствами, в том числе квазидвумерным характером переноса носителей заряда [2]. Анизотропия кристаллической решетки приводит к анизотропному поведению зарядовой и вихревой подсистем и в нормальном, и в смешанном состояниях.

В нашей работе проведен анализ движения носителей заряда и решетки вихрей в проводящих плоскостях ${\rm CuO_2}$ и между проводящими плоскостями в скрещенных электрических и магнитных полях на эпитаксиальных пленках ${\rm Nd_{2-}}_x{\rm Ce}_x{\rm CuO_4}/{\rm SrTiO_3}$ с различной ориентацией оси cкристаллической решетки соединения ${\rm Nd_{2-}}_x{\rm Ce}_x{\rm CuO_4}$ относительно плоскости подложки: (001) и (110). Обнаружено активационное движение вихрей между проводящими плоскостями вследствие внутреннего пиннинга, при этом энергия активации зависит от внешнего магнитного поля и коэффициента анизотропии сопротивления носителей заряда [3].

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Электрон» № АААА-А18-118020190098-5 и проекту № 18-10-2-6 Программы УрО РАН при поддержке РФФИ (грант № 18-02-00192).

1. J.S. Higgins, M.K. Chan, T. Sarkar et al., New J. Phys. 20, 043019 (2018).

- 2. A.S. Klepikova, T.B. Charikova, N.G. Shelushinina, M.R. Popov, A.A. Ivanov, Low temperature physics **45**, 217 (2019).
- 3. M.R. Popov, A.S. Klepikova, N.G. Shelushinina, A.A. Ivanov, T.B. Charikova, Physica C **566**, 1353515 (2019).

Фазовая диаграмма системы локальных бозонов конкурирующих с обменно-связанными спиновыми центрами

А.А. Чиков*, В.В. Конев, В.А. Улитко, Ю.Д. Панов, А.С. Москвин

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия *E-mail: alex.chikov@yandex.ru

Конкуренция магнитного, сверхпроводящего и зарядового упорядочений в купратах типа $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ является важным вопросом современной физики конденсированного состояния. Ключевым элементом структуры купратов являются плоскости CuO_2 , описанию которых в рамках псевдоспинового формализма был посвящен ряд теоретических работ [1,2]. В этих работах трем валентным состояниям кластера CuO_4 (CuO_4^{5-} , CuO_4^{6-} , CuO_4^{7-}) были сопоставлены проекции псевдоспина S = 1, что привело к модели, эквивалентной анизотропному магнетику с фиксированной намагниченностью. Условие постоянства (псевдо)намагниченности означает закон сохранения заряда в плоскости CuO_2 . Наличие у кластера в состоянии CuO_4^{6-} обычного спина требует на той же решетке рассмотреть еще одну спиновую систему с s = 1/2. Гамильтониан системы имеет вид:

$$\hat{\mathcal{H}} = \Delta \sum_{i} \hat{S}_{zi}^{2} + V \sum_{\langle ij \rangle} \hat{S}_{zi} \hat{S}_{zj} + t_{b} \sum_{ij} \left(\hat{S}_{i+}^{2} \hat{S}_{j-}^{2} + \hat{S}_{i-}^{2} \hat{S}_{j+}^{2} \right) + J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{P}_{0i} \left(\hat{s}_{xi} \hat{s}_{xj} + \hat{s}_{yi} \hat{s}_{yj} + \hat{s}_{zi} \hat{s}_{zj} \right) \hat{P}_{0j} - h_{z} \sum_{i} \hat{P}_{0i} \hat{s}_{zi},$$
(1)

где $S_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{S}_x \pm i \hat{S}_y \right)$, а \hat{S}_x , \hat{S}_y , \hat{S}_z , \hat{s}_x , \hat{s}_y , \hat{s}_z – операторы *x*-, *y*- и *z*- проекций псевдоспина и спина соответственно. Суммирование $\langle ij \rangle$ проводится по ближайшим соседям.

Первые три слагаемых в (1) соответствует модели локальных (semi-hard-core) бозонов [4] и описывают экранированное кулоновское взаимодействие (V) CuO_4 кластеров, энергетический порог реакций диспропорционирования $\operatorname{CuO}_4^{6-} + \operatorname{CuO}_4^{6-} \to \operatorname{CuO}_4^{5-} + \operatorname{CuO}_4^{7-}$ (Δ) и двухчастичных обменных реакций $\operatorname{CuO}_4^{7-} + \operatorname{CuO}_4^{5-} \leftrightarrow \operatorname{CuO}_4^{5-} + \operatorname{CuO}_4^{7-}$ (t_b), которые соответствуют переносу двух дырок (локального бозона) между двумя $\operatorname{CuO}_4^{7-}$ -центрами. Четвертое слагаемое в (1) описывает спиновое обменное взаимодействие (*J*) кластеров $\operatorname{CuO}_4^{6-}$, пятое – внешнее магнитное поле (h_z). Оператор $P_{0i} = 1 - S_{zi}^2$ играет роль оператора спиновой плотности.

В настоящей работе представлено сопоставление фазовых диаграмм модели локальных бозонов в рамках квантового [3] и репличного, без глобальных изменений конфигурации (global updates) [4], вариантов метода Монте-Карло, а также эволюция фазовой диаграммы с учетом конкуренции с обменно-связанными CuO_4^{6-} центрами.

Работа была выполнена при поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00837/18, а также при поддержке стипендии Президента РФ (СП-2278.2019.1).

- 1. A.S. Moskvin, Phys. Rev. B 84, 075116 (2011).
- 2. A.S. Moskvin, Journal of Physics: Conference Series 592, 012076 (2014).
- 3. V.V. Konev et al., Journal of Low Temperature Physics 185, 680 (2016).
- 4. A.A. Chikov et al., Acta Physica Polonica A 133, 432 (2018).

Немагнитные примеси в сверхпроводниках на основе железа

<u>В.А. Шестаков</u>*, М.М. Коршунов

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия *E-mail: v_shestakov@iph.krasn.ru

Исследована зависимость сверхпроводящих щелей как от беспорядка, так и от температуры в двухзонной модели сверхпроводников на основе железа. В чистом пределе система находится в s_{\pm} -состоянии с щелями, меняющими знак на поверхности Ферми [1]. Рассеяние на примесях приводит к смене знака меньшей щели, что приводит к переходу из s_{\pm} -состояния в s_{++} -состояние, в котором щели имеют неизменный знак на ферми-поверхности [1,2]. Здесь мы показали, что этот переход зависит от температуры, т. е. для различной степени беспорядка температура перехода $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ также различна [3]. На фазовой диаграмме «температура-беспорядок» присутствует узкий диапазон значений интенсивности рассеяния на примесях Γ_a , в котором благодаря рассеянию на примесях при низких температурах система претерпевает переход $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$, а при увеличении температуры сверхпроводник возвращается в s_{\pm} -состояние. При возрастании степени беспорядка в системе (увеличении Γ_a) температура такого обратного перехода между s_{++} - и s_{\pm} -состояниями смещается к критической температура такого обратного перехода между s_{++} и s_{\pm} -состояниями смещается к критической температура такого обратного перехода между s_{++} и s_{\pm} -состояниями смещается к критической температура такого обратного перехода между s_{++} - и s_{\pm} -состояние.

Также в двухзонной модели были проведены расчёты лондоновской глубины проникновения $1/\lambda_L^2(T,\Gamma_a)$ в сверхпроводящем состоянии соединений железа. Расчёты показывают, что на наличие обратного перехода между s_{++} - и s_{\pm} -состояниями при высоких температурах может указывать поведение $1/\lambda_L^2(T,\Gamma_a)$ при низких температурах, T < 1 К. Это даёт возможность экспериментального подтверждения существования рассматриваемой температурной зависимости $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ перехода, наряду с экспериментальным подтверждением наличия самого перехода [4].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-90109, а также при финансовой поддержке фонда развития теоретической и математической физики «Базис».

1. М.М. Коршунов, Ю.Н. Тогушова, О.В. Долгов, УФН 186, 1315 (2016).

- 2. D.V. Efremov et al., Phys. Rev. B 84, 180512 (2011).
- 3. V.A. Shestakov, M.M. Korshunov, O.V. Dolgov, Symmetry 10, 323 (2018).
- 4. G. Ghigo et al., Phys. Rev. Lett. 121, 107001 (2018).

Необычные состояния и фазовые переходы в разбавленном фрустрированном магнетике

Д.Н. Ясинская*, В.А. Улитко, Ю.Д. Панов

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия *E-mail: daria.iasinskaia@urfu.ru

Мы рассматриваем статическую спин-псевдоспиновую модель [1,2], эквивалентную модели двумерного изинговского магнетика, разбавленного немагнитными подвижными примесями, с фрустрацией, вызванной конкуренцией между зарядовым и магнитным типами упорядочений. Данная конкуренция является типичной для ВТСП-купратов типа $La_{2-x}Sr_xCuO_4$. Модель рассматривает CuO_2 -плоскости как систему из трех ионов со смешанной валентностью – «зарядовый триплет» – $Cu^{1+,2+,3+}$, который описывается псевдоспином S = 1. Модельный S = 1 псевдоспиновый гамильтониан учитывает локальные (Δ) и нелокальные (V) зарядзарядовые корреляции, а также s = 1/2 спин-спиновый обмен в форме Изинга (J):

$$H = \Delta \sum_{i} S_{iz}^{2} + V \sum_{\langle ij \rangle} S_{iz} S_{jz} + J \sum_{\langle ij \rangle} P_{i0} s_{iz} s_{jz} P_{j0} - \mu \sum_{i} S_{iz},$$

где $P_0 = 1 - S_z^2$ – оператор проектирования, выделяющий Cu^{2+} состояние, $\langle ... \rangle$ означает суммирование по ближайшим соседям.

С помощью модифицированного алгоритма Метрополиса нами были исследованы особенности термодинамических свойств системы, обнаружены необычные эффекты, связанные с наличием фрустрации и немагнитных примесей, включая разделение фаз, смену типов упорядочений, возвратные фазовые переходы, индуцирование упорядочения заряженными примесями, а также неуниверсальное критическое поведение.

Работа выполнена при поддержке Программы 211 Правительства Российской Федерации (соглашение 02.А03.21.0006) и проектов № 2277 и № 5719 Министерства Образования и Науки Российской Федерации, а также при поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00837/18.

1. Y.D. Panov, A.S. Moskvin, A.A. Chikov, I.L. Avvakumov, J. Supercond. Novel Magn. **29**, 1077 (2016). 2. Y.D. Panov, V.A. Ulitko, K.S. Budrin, A.A. Chikov, A.S. Moskvin, JMMM **477**, 162 (2019).

ФИЗИКА СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ И НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ

Краевые состояния двумерного топологического изолятора в условиях суперперемешивания

В.В. Вальков

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия E-mail: vvv@iph.krasn.ru

Для 2D зонной структуры H_gTe изучено влияние межузельного кулоновского взаимодействия электронов, находящихся на соседних ионах H_g и Te. На основе решения интегрального уравнения самосогласования для параметра суперперемешивания показано, что процессы, индуцированные кулоновским взаимодействием в условиях инвертированной зонной структуры H_gTe , приводят к значительной ренормировке эффективных параметров ковалентного смешивания 6s состояний атомов Hg и 5p состояний атомов Te. В результате реализуются условия, приводящие к дополнительным возможностям идентифицирования нетривиальной топологии рассматриваемой системы. В этом случае механизм реализации экситонного диэлектрика служит дополнительным фактором стабилизации состояния топологического изолятора. В условиях относительно сильного кулоновского отталкивания электронов эффекты суперперемешивания приводят к температурной зависимости энергетических характеристик краевых состояний. Это обуславливает существенное отличие экситонного диэлектрика с нетривиальной топологией от ранее исследованных топологических изоляторов.

Эффективные взаимодействия для топологически нетривиальных сверхпроводящих систем со спин-орбитальной связью в режиме сильных корреляций

А.О. Злотников

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия E-mail: zlotm@iph.krasn.ru

В последнее время интерес вызывают полупроводниковые нанопроволоки в контакте со сверхпроводниками ввиду реализации в них майорановских мод [1,2]. Недавние экспериментальные данные указывают на существование сильных электронных корреляций в нанопроволоках InAs [3]. В этой связи является актуальной задача об учете кулоновского взаимодействия в таких системах.

В данной работе для 1D модели Хаббарда со спин-орбитальным взаимодействием Рашба выведены эффективные взаимодействия в режиме сильных электронных корреляций.

Исходный гамильтониан имеет вид:

$$H = \sum_{f\sigma} \xi_{\sigma} a_{f\sigma}^{\dagger} a_{f\sigma} - \frac{t}{2} \sum_{f\sigma} \left(a_{f\sigma}^{\dagger} a_{f+1\sigma} + a_{f+1\sigma}^{\dagger} a_{f\sigma} \right) - \frac{\alpha}{2} \sum_{f\sigma} \eta_{\sigma} \left(a_{f\sigma}^{\dagger} a_{f+1\bar{\sigma}} + a_{f+1\bar{\sigma}}^{\dagger} a_{f\sigma} \right) + U \sum_{f} n_{f\uparrow} n_{f\downarrow}.$$
(1)

С помощью метода унитарных преобразований [4] для режима $U \gg t$, α , $\alpha \sim t$ получена эффективная $t - J^* - J^*_{\alpha}$ -модель в атомном представлении:

$$H_{t-J^*-J^*_{\alpha}} = \sum_{f\sigma} \xi_{\sigma} X_{f}^{\sigma\sigma} - \frac{t}{2} \sum_{f\sigma} \left(X_{f}^{\sigma0} X_{f+1}^{0\sigma} + X_{f+1}^{\sigma0} X_{f}^{0\sigma} \right) - \frac{\alpha}{2} \sum_{f\sigma} \eta_{\sigma} \left(X_{f}^{\sigma0} X_{f+1}^{0\bar{\sigma}} + X_{f+1}^{\bar{\sigma}0} X_{f}^{0\sigma} \right) + H_{\text{int}} + H_{3},$$
(2)

где Н₃ описывает трехцентровые слагаемые, а

$$H_{\text{int}} = \frac{t^2}{U} \sum_{f} \left(\mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f+1} - \frac{1}{4} n_f n_{f+1} \right) - \frac{t\alpha}{U} \sum_{f} \left\{ \left(X_f^{\uparrow\downarrow} + X_f^{\downarrow\uparrow} \right) S_{f+1}^z - S_f^z \left(X_{f+1}^{\uparrow\downarrow} + X_{f+1}^{\downarrow\uparrow} \right) \right\} - \frac{\alpha^2}{U} \sum_{f} \left\{ \frac{1}{2} \left(X_f^{\uparrow\downarrow} X_{f+1}^{\uparrow\downarrow} + X_f^{\downarrow\uparrow} X_{f+1}^{\downarrow\uparrow} \right) + S_f^z S_{f+1}^z + \frac{1}{4} n_f n_{f+1} \right\}.$$
(3)

В рамках $t - J - J_{\alpha}$ -модели с наведенной сверхпроводимостью изучается устойчивость майорановских состояний методом DMRG [5], так как в ней существенно увеличивается скорость расчетов, по сравнению с исходной моделью (1).

Работа поддержана РФФИ (№ 19-02-00348, 20-32-70059), Правительством Красноярского края и Краевым фондом науки (№ 19-42-240011, 18-42-240014).

- 1. R.M. Lutchyn, J.D. Sau, S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. 105, 077001 (2010).
- 2. H. Zhang et al., Nature **556**, 74 (2018).
- 3. Y. Sato et al., Phys. Rev. B 99, 155304 (2019).
- 4. Y.A. Izyumov, Physics-Uspekhi 40, 445 (1997).
- 5. S.V. Aksenov, A.O. Zlotnikov, M.S. Shustin, arXiv:1911.01035 [Cond-Mat] (2019).

Analytical theory of mott transition in the antiferromagnetic phase

P.A. Igoshev*, V.Yu. Irkhin

Mikheev institute of metal physics UB RAS, Ekaterinburg, Russia *E-mail: igoshev_pa@imp.uran.ru

The nature of the metal–insulator transition (MIT) is still not understood in detail. The competition between the antiferromagnetic (AFM) insulator and paramagnetic metal states gives the MIT phase boundary of the first order [1]. However, taking into account the transfer between the next-nearest neighbors can lead to the appearance of the AFM metallic phase which turns out to be more energetically favorable than the paramagnetic metal [2,3].

We treat the problem of the phase diagram of the ground state for the t - t' Hubbard model within the Kotliar-Ruckenstein slave-boson approach taking into account Van Hove singularities of electron spectrum. We obtain the MIT criterion within the framework of an analytic expansion in the transfer integral t' and the direct AFM gap Δ .

The character of non-analyticity of the free energy as a function of Δ is determined by the type of the Van Hove singularity in the density of states. An account of direct nearest-neighbor exchange integral can change the order of MIT. Such a change is a pure correlation effect being absent within the Hartree-Fock approximation for this problem. The corresponding results for different bipartite lattices are presented in Fig. 1.



РИС. 1. The phase diagram demonstrating the MIT type in the $J-\tau$ variables for square (SQ), simple cubic (SC) and body centered cubic (BCC) lattices, J is the exchange integral between the nearest neighbors (J > 0 corresponds to AFM interaction), $\tau = t'/t$. To the left of the curves, a first-order transition takes place, to the right – a second-order transition.

The work is supported by state assignment № AAAA-A18-118020290104-2 ("Quant").

- 1. M.I. Katsnelson and V.Yu. Irkhin, J. Phys. C 17, 4291 (1984).
- 2. M.A. Timirgazin, P.A. Igoshev, A.K. Arzhnikov, V.Yu. Irkhin, J. Low. Temp. Phys. 185, 651 (2016).
- 3. M.A. Timirgazin, P.A. Igoshev, A.K. Arzhnikov, V.Yu. Irkhin, J. Phys.: Condens. Matter 28, 505601 (2016).

Ultracold atoms with additional degree of freedom. Spin-orbital view

A.M. Belemuk^{1,2}, N.M. Chtchelkatchev^{1,2,3}, A.V. Mikheyenkov^{1,2,3*}, K.I. Kugel^{4,5}

¹Institute for high pressure physics RAS, Troitsk, Russia
 ²Moscow institute of physics and technology, Moscow, Russia
 ³National research center "Kurchatov institute", Moscow, Russia
 ⁴Institute for theoretical and applied electrodynamics RAS, Moscow, Russia
 ⁵National research university higher school of economics, Moscow, Russia
 *E-mail: mikheen@bk.ru

Experimental research of ultracold atoms in optical lattices have expanded the possibilities of quantum many-body physics simulation. Moreover, ultracold atoms open the path to the parameter range that is hardly possible to achieve in the natural condensed matter systems. The typical example is the system of vector bosons. This case corresponds to Bose–Hubbard model that is absent in the standard solid state theory. The situation becomes even more intriguing, when the problem implies additional nontrivial parameters. In our case, we have multiple vector boson species.

Vector two-species bosons in optical lattices are characterized by the following parameters: hopping amplitudes t_{α} , where $\alpha = 1, 2$ labels different bosons, $U_{\alpha,\alpha'}$ – on-site interactions and spin-channel interaction parameters U_s . In Ref. [1] we have considered the limiting case of nearly identical bosons in the Mott insulating state: $U_{12} \simeq U_{11} \simeq U_{22} = U_0$ and $t_1 \simeq t_2 \ll U_0$. This model differs from the case of perfectly identical bosons by the absence of tunneling with the change of boson identity. It has been shown in that the model can be reduced to the Kugel–Khomskii type spin-1–pseudospin-1/2 model model (pseudospin labels different bosons). The assumption about perfectly identical bosons have lead to simple and intuitively expected phase diagram with one quantum phase transition near $U_s = 0$ (note, that the picture is inverse to spin-1/2–pseudospin-1/2 case, Ref. [2]).

Here investigate two species of cold vector bosons in an optical lattice and trace the evolution of the phase diagram with the increase in the "degree of atomic nonidentity" (manifesting itself in the difference of tunneling amplitudes and on-site Coulomb interactions), starting from nearly identical atoms. We show that nature of the ground states and the set of quantum phase transitions of sufficiently distinct atoms are qualitatively different from those in the case of (nearly) identical atoms.

For distinct bosons in the strong correlation Mott insulating limit $(U_{\alpha,\alpha'} \gg |t_{\alpha}|)$ the initial Hamiltonian can also be reduced to the Kugel–Khomskii type spin-1–pseudospin-1/2 model, though rather bulky on this case, Ref. [3].

Within the mean-field approximation, we neglect any correlations between spin and p-spin degrees of freedom. Two states are possible in the p-spin space – ferromagnetic (FM, domain) and antiferromagnetic (AFM). In the spin space we take for trial wave functions the usual FM, AFM, and nematic (NEM) states. So six different phases are possible.

We show that all this phases are realized in a particular regions of parameters. Moreover, one can find quantum phase transitions nearly between all the possible phases, there are also several reentrant phase transitions. The example of phase diagram evolution for the case $U_{12}/U_{11} = 0$ is presented in Fig. 1, where different colors correspond to different phases. We also note the evolution of the artistic image of the phase diagrams. Namely, at small $\xi_{12} = U_{12}/U_{11} = 0$ their style resembles the J. Miró paintings, while at large ξ_{12} – those of K. Malewicz.

To conclude, we have investigated the evolution of the quantum state of vector two-species bosons in optical lattices with the "degree of atomic nonidentity" that drives the cascade of quantum phase transitions. We have transferred the initial general Hamiltonian for vector bosons to the anisotropic spin-pseudospin model of the Kugel–Khomskii type that served as the effective Hamiltonian. The variational approach have been used to uncover the phase diagram of the system in hand. We have investigated also limiting cases of the effective Hamiltonian and demonstrated the relation of our rather complicated Hamiltonian to the well known results.



РИС. 1. Phase diagrams for $\xi_{12} = U_{12}/U_{11} = 0.4$. Here $\beta = t_2/t_1$, $\xi_{22} = U_{22}/U_{11}$ and $\lambda = U_s/U_{11}$. Different colors correspond to different phases. Brown – p-spin AFM, spin NEM; red – p-spin AFM, spin AFM; yellow – p-spin AFM, spin FM; light blue – p-spin FM, spin NEM; middle blue – p-spin FM, spin AFM; dark blue – p-spin FM, spin FM.

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (project N_{P} 19-02-00509). We express our gratitude to Russian Science Foundation (project N_{P} 18-12-00438) for support of the numerical calculations.

1. A.M. Belemuk, N.M. Chtchelkatchev, A.V. Mikheyenkov and K.I. Kugel, Phys. Rev. B **96**, 094435 (2017). 2. A.M. Belemuk, N.M. Chtchelkatchev and A.V. Mikheyenkov, Phys. Rev. A **90**, 023625 (2014).

3. A.M. Belemuk, N.M. Chtchelkatchev, A.V. Mikheyenkov and K.I. Kugel, New J. Phys. **20**, 063039 (2018).

Исследование магнитокалорического эффекта в модели Хаббарда в приближении среднего поля и в DMFT

И.А. Некрасов¹*, П.А. Игошев², Н.С. Павлов¹

¹Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия ²Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия *E-mail: nekrasov@iep.uran.ru

Проведено сравнительное изучение магнитокалорического эффекта (МКЭ) в металлах в однозонной модели Хаббарда на гранецентрированной решетке с бесконечным числом соседей с использованием как обычного приближения среднего поля (MFA), так и теории динамического среднего поля (DMFT). МКЭ исследован вблизи магнитного (ферромагнетикпарамагнетик) фазового перехода второго рода. Для обеспечения коллективизированного ферромагнетизма в модели Хаббарда подбирались параметры спектра, генерирующие гигантскую особенность Ван Хова на дне зоны, и уровень Ферми E_F вблизи дна зоны. В рамках MFA и DMFT сравнивались температурная зависимость намагниченности, полной энергии и энтропии для различных значений кулоновского взаимодействия U при нулевых и конечных значениях магнитного поля h. Также в MFA и DMFT исследовалась температурная зависимость изотермического изменения энтропии $\Delta S(T)$. В МFA максимальное значение $\Delta S(T)$ при температуре Кюри T_C (ΔS_{max}) довольно значительно уменьшается с ростом величины U. Аналогичное, но гораздо более слабое уменьшение ΔS_{\max} обнаружено в DMFT. Учет локальных квантовых флуктуаций приводят к бOльшим значениям $\Delta S_{
m max}$ в рамках DMFT (см. рис. 1), чем в MFA. Ширина пика $\Delta S(T)$ на половине высоты примерно одинакова для обоих методов. Также результатом учета динамических локальных квантовых флуктуаций DMFT является исчезновение вызываемой гигантской ванхововской сингулярностью аномальной зависимости температуры Кюри T_C от U, которая наблюдается в MFA. Однако относительная сила охлаждения (RCP) очень близка в DMFT и MFA при одинаковых параметрах модели и понижается при увеличении U.



РИС. 1. Изотермическое изменение энтропии $\Delta S(T)$ при изменении магнитного поля $\Delta h = 0.001$, рассчитанное в рамках DMFT (сплошные линии) и MFA (пунктирные линии) для однозонной модели Хаббарда (бесконечномерная ГЦ-решетка). Заполнение составляет n = 0.6. Ноль соответствует температуре Кюри T_C .

Топологическая устойчивость квантования аномального холловского кондактанса неупорядоченного изолятора Черна

С.Г. Новокшонов

Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия E-mail: nov@imp.uran.ru

Исследуется влияние беспорядка на внутренний аномальный эффект Холла в модели двумерного изолятора Черна с одноэлектронным гамильтонианом [1]:

$$\mathcal{H} + U = \boldsymbol{d}_{\boldsymbol{p}} \cdot \boldsymbol{\sigma} + U(\boldsymbol{r}) = \left(M - \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\right)\sigma_z + \alpha(\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) + U(\boldsymbol{r}).$$
(1)

Здесь α , m, M – параметры модели, U(r) – δ -коррелированный гауссовский случайный потенциал, остальные обозначения общепринятые. Внутренний аномальный холловский кондактанс складывается из двух слагаемых:

$$\sigma_{xy} = \sigma_{xy}^{\mathrm{I}} + \sigma_{xy}^{\mathrm{II}} = \frac{\hbar e^2}{2\pi} \operatorname{Tr} V_x G^R V_y G^A - |e| c \left(\frac{\partial n}{\partial B}\right)_{\mathcal{E}_F},\tag{2}$$

где $G^{R(A)}$ – усредненные по конфигурациям случайного поля U запаздывающая (R) и опережающая (A) функции Грина (Φ Г).

Получено выражение для кондактанса (2) в самосогласованном борновском приближении и выполнен численный анализ его зависимости от положения уровня Ферми. В режиме топологического изолятора (mM > 0) холловский кондактанс (2) принимает квантованное значение, когда уровень Ферми оказывается внутри щели между валентной зоной и зоной проводимости. Отличный от нуля вклад в квантованное значение σ_{xy} (2) вносит только слагаемое Стржеды σ_{xy}^{II} [2], которое в этом режиме выражается через топологический инвариант Черна:

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \int \frac{\boldsymbol{d}_{\boldsymbol{p}} \cdot (\partial_x \boldsymbol{d}_{\boldsymbol{p}} \times \partial_y \boldsymbol{d}_{\boldsymbol{p}})}{|\boldsymbol{d}_{\boldsymbol{p}}|^3} \frac{d^2 \boldsymbol{p}}{4\pi},\tag{3}$$

где $\partial_i = \partial/\partial_{p_i}$, а интеграл берется по всей области определения импульса p.

С ростом беспорядка щель, в чистом пределе равная $2\sqrt{2m\alpha^2 M} - m^2 \alpha^4$, сужается, что сопровождается соответствующим уменьшением ширины холловского плато. В отличие от рассмотренной в [3] минимальной модели изолятора Черна, в которой σ_{xy} (2) принимает полуцелое квантованное значение, в данном случае квантование аномального холловского кондактанса является целочисленным $\sigma_{xy} = e^2/2\pi\hbar$.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Спин» № АААА-А18-118020290104-2).

- 1. S.-Q. Shen et al., SPIN 1, 33 (2011).
- 2. P. Středa, J. Phys. C 15, L717 (1982).
- 3. S. Novokshonov, J. Phys.: Conf. Series 1389, 012104 (2019).

Трехмерное манипулирование с применением микроинструментов с эффектом памяти формы для наноэлектроники

В.Г. Шавров

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

В докладе рассматриваются такие вопросы трёхмерного наноманипулирования, как минимальный размер микроинструмента, его максимальное быстродействие, а также надежность, точность и автоматизация процесса манипулирования.

Предложена и испытана новая схема композита на основе сплава с эффектом памяти формы (ЭПФ), обеспечивающая гигантскую термо- или магнитоуправляемую обратимую деформацию сплава.

На основе сплава Ті — Ni — Cu с ЭПФ изготовлены композитные нанопинцеты с рекордно малыми габаритами: $10 \times 3 \times 1$ мкм³, зазор 1 мкм. Нанопинцеты управляются нагревом: лучом лазера, джоулевым теплом от контактного диода или от пропускания тока через пинцет.

Продемонстрировано трёхмерное манипулирование углеродными нанотрубками, графеновыми слоями, био-нанообъектами, нанопроволоками ZnO, InP, TaS₃ и др.

Исследованы проявления термоупругого мартенситного перехода и ЭП Φ в зависимости от толщины слоя (до 30 нм) и температуры образца сплава Ti₂NiCu.

Показано быстродействие микроактю
аторов на уровне 10 кГц и количество циклов непрерывной работы не мене
е $10^7.$

Продемонстрировано управление микроактю
атором $NiMnGa/Pt\,$ при помощи магнитного поля до 8 Т
л при постоянной температуре $63^\circ C.$

Расстояние «редкоземельный ион – лиганд» в примесных центрах R^{3+} и R^{2+} в MeF₂ (Me = Ca, Sr, Ba): ab initio расчет

В.А. Чернышев¹*, А.А. Архипов¹, <u>П.А. Агзамова</u>²

¹Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия ²Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия *E-mail: vchern@inbox.ru

Фториды со структурой флюорита, активированные редкоземельными ионами, используются в качестве сцинтилляционных материалов, лазерных сред, детекторов ионизирующего излучения [1–3]. Свойства этих материалов обусловлены электронной структурой редкоземельных примесных центров, в существенной степени определяемой кристаллическим полем на редкоземельном ионе. При допировании редкоземельный ион R³⁺ (R²⁺) замещает катион Me²⁺ в структуре флюорита, что вызывает искажение кристаллической решетки вблизи примеси. Представляется актуальным исследовать кристаллическую структуру редкоземельных примесных центров, поскольку основной вклад в кристаллическое поле на редкоземельном ионе дает именно его ближайшее окружение. Информация о локальном окружении примесного иона, расстояние «редкоземельный ион – лиганд» необходимы и для интерпретации ЭПР и ДЭЯР спектров. Редкоземельные ионы также используются в качестве люминесцентных зондов [4], что делает актуальным исследование упругих свойств решетки вблизи редкоземельного примесного центра. В данной работе рассмотрены примесные центры R³⁺ и \mathbb{R}^{2+} ($\mathbb{R} = La, Ce, Pr, Nd, Pm, Gd, Yb, Lu$) во флюоритах MeF_2 (Me = Ca, Sr, Ba). Ранее локальная структура некоторых из них была исследована в оболочечной модели, в настоящее время имеется возможность провести *ab initio* расчет. В работе проведены *ab initio* расчеты кристаллической структуры данных примесных центров в рамках теории функционала плотности с гибридным функционалом PBE0 (Perdew-Burke-Ernzerhof) [5], учитывающим вклад нелокального обмена в формализме Хартри-Фока. Исследовано изменение расстояния «редкоземельный ион – лиганд» в ряду La – Lu, исследовано изменение радиальных и угловых координат во второй и третьей координационных сферах. Исследовано изменение локальной сжимаемости катионной и анионной подрешеток вблизи примесного иона. Расчеты проводились в программе CRYSTAL17 [6], предназначенной для моделирования периодических структур в рамках МО ЛКАО подхода.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Спин», Г.р. № АААА-А18-118020290104-2).

- 1. E.V. Vilejshikova , P.A. Loiko, G.E. Rachkovskay, G.B. Zakharevich, K.V. Yumashev, Journal of Applied Spectroscopy **83**, 5, 1 (2016).
- 2. Z. Zhang, F. Ma, X. Guo, J. Wang, X. Qian, J. Liu, J. Liu, L. Su, Optical Materials Express **8**, 12, 3820 (2018).
- 3. Е.В. Голодных, Вестник науки Сибири 1, 7, 128 (2013).
- 4. Г.Е. Малашкевич, А.Г. Маханек, А.В. Семченко, В.Е. Гайшун, И.М. Мельниченко, Е.Н. Подденежный, ФТТ **41**, 2, 229 (1999).
- 5. J.P. Perdew, M. Ernzerhof, K. Burke, J. Chem. Phys. 105, 9982 (1996).
- 6. Электронный ресурс. Режим доступа: http://www.crystal.unito.it/index.php.

Спиновые корреляции и запутанность в многофермионной системе

М.Р. Арифуллин*, В.Л. Бердинский

Оренбургский государственный университет, Оренбург, Россия *E-mail: arifullinm@mail.ru

Рассчитаны спиновые матрицы плотности $\rho(s_i)$ системы, содержащей произвольное четное число N неразличимых фермионов со спином S = 1/2, описываемых антисимметричной волновой функцией $\Psi(r_i, s_i)$. Показано, что любые $\rho(s_i)$ могут быть единообразно представлены в виде суммы неортогональных проекторов на все возможные синглетные многоспиновые состояния:

$$\rho_N = 2^{N/2} (N!)^{-1} (N/2)! \sum_P P(|S_{ij}S_{rl}S_{mn}...\rangle \langle S_{ij}S_{rl}S_{mn}...|,$$

где P – оператор перестановки по всем парным индексам S_{ij} .

Доказано, что неразличимость частиц и принцип Паули однозначно определяют запутанность спиновых состояний фермионов и спиновые корреляции. Увеличение числа частиц в многофермионной системе уменьшает спиновую корреляцию в любой паре фермионов.

Из принципа неразличимости частиц и принципа Паули следует, что любая пара фермионов ансамбля должна находиться в некогерентной суперпозиции синглетных и триплетных состояний. Показано, что спиновое состояние любого из N фермионов системы запутано [1] с остальной частью системы, содержащей N - 1 частиц. Эти свойства спиновых состояний проявляются в нарушений неравенств Белла и указывают на наличие нелокальных квантовых спиновых корреляций [2].

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-37-00374).

- 1. M.A. Nielsen, I.L. Chuang, Quantum Computation and Quantum Information, Cambridge: University Press (2000).
- 2. M.R. Arifullin, V.L. Berdinskiy, arXiv:1310.2863.

Спиновая динамика в слабодопированных манганитах стронция

<u>З.Н. Волкова</u>*, А.П. Геращенко, С.В. Верховский, К.Н. Михалев, А.Ю. Гермов

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

Наличие магнитных поляронов в слабодопированных манганитах стронция является надежно установленным фактом [1–3]. Магнитные поляроны – это электроны, окруженные ферромагнитно-поляризованной областью, создаваемой за счет механизма двойного обмена. Эффективная масса таких поляронов больше, чем у свободных электронов, а длина свободного пробега меньше. В настоящей работе с помощью метода ЯМР ¹⁷О удалось разделить эти два типа электронов.

Свободные электроны совершают перескоки с узла на узел через *d*-орбитали марганца. Вследствие ковалентности связей марганец – кислород происходит перенос спиновой поляризации с *d*-орбиталей марганца на *s*- и *p*-орбитали кислорода, что приводит к сверхтонкому полю на ядрах кислорода. При локализации, то есть образовании поляронных состояний, эти электроны перестают вносить вклад в формирование сверхтонкого поля на ядрах ¹⁷О, интенсивность эхо-сигнала ядер кислорода уменьшается, как и скорость ядерной релаксации T_2 . Таким образом, меняя временной интервал τ между регистрирующими импульсами p_1 и p_2 в эксперименте $p_1 - \tau - p_2 - \tau - эхо$, можно оценить вклад в сигнал ЯМР коллективизированных (свободных) электронов и локализованных поляронов.

Измерение скорости релаксации показало, что ниже комнатной температуры в зависимости $T_2(\tau)$ имеют место две компоненты: длинная, $T_{2,\text{long}}$, и короткая, $T_{2,\text{short}}$, что свидетельствует о неоднородном электронном состоянии манганита, обусловленном частичной локализацией допированных электронов. Важно отметить, что при понижении температуры растает вклад короткой компоненты, связанной с ферромагнитными областями, что говорит о росте относительного объема таких областей. При комнатной температуре и выше зависимость $T_2(\tau)$ состоит преимущественно из $T_{2,\text{long}}$, то есть электронное состояние манганита близко к однородному.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Функция» № АААА-А19-119012990095-0.

- 1. A. Trokiner et al., Phys. Rev. B 93, 174413 (2016).
- 2. A. Germov et al., Phys. Rev. B 96, 104409 (2017).
- 3. А. Гермов и др., Письма в ЖЭТФ 109, 4, 245 (2019).

Трехчастичные корреляции в жидком и аморфном алюминии

<u>Б.Н. Галимзянов</u>^{1,2*}, А.В. Мокшин^{1,2}

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия ²Удмуртский федеральный научный центр УрО РАН, Ижевск, Россия *E-mail: bulatgnmail@gmail.com

Трехчастичные корреляции оказывают существенное влияние на различные процессы, протекающие в конденсированных средах. Учет трехчастичных корреляций необходим, например, для объяснения динамической неоднородности в жидкостях, для описания транспортных свойств в химических реакциях, для описания процесса аморфизации жидкостей при быстром охлаждении [1,2]. Прямая оценка трехчастичных корреляций экспериментальными методами является чрезвычайно сложной задачей. Подробную информацию о трехчастичных корреляциях можно получить на основе данных моделирования атомной/молекулярной динамики [3].



РИС. 1. Трехчастичная корреляционная функция g(S), полученная для аморфного алюминия при температурах 50 K, 100 K и 150 K.

В настоящей работе на основе данных моделирования атомной динамики выполнен анализ трехчастичных корреляций в жидком и аморфном алюминии [4]. Введена трехчастичная корреляционная функция g(S)для характеризации относительных положений различных трех атомов - триплетов с площадью S. Обнаружено, что в случае жидкого алюминия с температурами 1000 К, 1500 К и 2000 К трехчастичные корреляции более выражены в пространственных масштабах, сравнимых с размером второй координационной сферы. В случае аморфного алюминия с температурами 50 К, 100 К и 150 К корреляции во взаимном расположении трех частиц проявляются вплоть до про-

странственных масштабов, которые сопоставимы с размером третьей координационной сферы (см. рис. 1). Показано, что временная зависимость трехчастичных корреляций в этих системах воспроизводится с помощью интегро-дифференциального уравнения типа обобщенного уравнения Ланжевена [5]. Здесь наблюдается соответствие между теоретическими результатами и нашими данными моделирования атомной динамики.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 19-12-00022).

- 1. M. Tokuyama, Physica A 378, 157 (2007).
- 2. O.S. Vaulina, O.F. Petrov, V.E. Fortov, A.V. Chernyshev, A.V. Gavrikov, O.A. Shakhova, Phys. Rev. Lett. **93**, 035004 (2004).
- 3. S. Gupta, J.M. Haile, W.A. Steele, Chem. Phys. 72, 425 (1982).
- 4. B.N. Galimzyanov, A.V. Mokshin, Physica A 478, 103 (2017).
- 5. A.V. Mokshin, Theoret. Math. Phys. 183, 449 (2015).

Поляронные переходы в реалистичной модели сильно коррелированных систем

<u>М.В. Зотова</u>^{1*}, Е.И. Шнейдер², С.В. Николаев^{1,2}, С.Г. Овчинников^{1,2}

¹Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия ²Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия *E-mail: zomav@mail.ru

Резкие поляронные переходы [1,2], а также необычные топологические эффекты [3], обнаруженные в моделях с электрон-фононной вершиной, зависящей как от импульса фонона q, так и от импульса электрона k, вызвали интерес к изучению поляронных свойств в системах с конкурирующими и одновременно сильными электрон-электронными и электронфононными взаимодействиями. В настоящей работе в рамках развиваемого нами варианта кластерной теории возмущений [4] исследуется влияние поляронных свойств таких систем на особенности электронного спектра. Реалистичную для сильно коррелированных систем двумерную многозонную pd-модель мы дополняем электрон-фононным взаимодействием диагонального и недиагонального типов. При этом используются реалистичные параметры модели, полученные в [5] для системы La_2CuO_4 путем проектирования электронной структуры в приближении локальной электронной плотности на базис функций Ванье. Предлагаемый подход точно учитывает внутрикластерные вклады конкурирующих взаимодействий и при формировании квазичастичных возбуждений позволяет рассматривать их на равной основе.

Для двухзонной pd-модели, дополненной взаимодействием электронов с оптическими фононами планарной дыхательной моды, на фазовой диаграмме поляронных состояний в пространстве параметров диагональное/недиагональное электрон-фононное взаимодействие обнаружены области резкого и плавного изменениями локальных характеристик поляронов. При малом допировании рост диагонального электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ) сопровождаются плавными изменениями в плотности состояний поляронов на уровне Ферми, а система постепенно эволюционирует из металлического состояния в диэлектрическое. Добавление к диагональному вкладу недиагонального приводит к скачку в плотности состояний, который соответствует переходу металл – диэлектрик при определенных параметрах ЭФВ. Эволюция системы от металлического состояния к диэлектрическому сопровождается различными трансформациями поверхности Ферми. Первый тип трансформации соответствует области плавного изменения локальных свойств поляронов. В этом случае при малом вкладе ЭФВ наблюдаются дырочные карманы, центрированные вокруг точки $(\pi/2;\pi/2)$ зоны Бриллюэна, с ростом параметров ЭФВ карманы трансформируются в экспериментально наблюдаемые при малом допировании Ферми-арки. Второй тип трансформации соответствует области резкого изменения локальных свойств поляронов и характеризуется сменой топологии поверхности Ферми от малых дырочных карманов, центрированных вблизи точки $(\pi/2; \pi/2)$, к слабо интенсивным карманам, центрированным вблизи точек $(\pi; 0)$ и $(0; \pi)$.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта: «№ 18-42-240017 Особенности электрон-фононной связи в высокотемпературных сверхпроводниках с сильными электронными корреляциями».

- 1. D.J.J. Marchand et al., Phys. Rev. Lett. 105, 266605 (2010).
- 2. M.M. Mirko, B. Mona, Phys. Rev. B 93, 035130 (2016).
- 3. M.M. Mirko et al., Nat. Commun. 8, 2267 (2017).
- 4. Е.И. Шнейдер, И.А. Макаров, М.В. Зотова, С.Г. Овчинников, ЖЭТФ 153, 820 (2018).
- 5. M.M. Korshunov, V.A. Gavrichkov, S.G. Ovchinnikov et al., Phys. Rev. B 72, 165104 (2005).

Временная динамика в спин-поляронной модели

В.С. Кирчанов

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия E-mail: Kirchanovvs@pstu.ru

В рамках концепции спинового полярона, развитой ранее в цикле работ, см. например статьи авторов [1], рассмотрена временная динамика спин-фермионной модели Cu_2O -плоскости. Гамильтониан задачи описывает подсистему дырок в импульсном представлении и гамильтониан обменной связи между спинами фермиевой подсистемы кислородных дырок и спинами подсистемы ионов меди:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{J} = \sum_{k\alpha} \left(\xi_0 \left(k_x \right) a_{k\alpha}^{\dagger} a_{k\alpha} + \xi_0 \left(k_y \right) b_{k\alpha}^{\dagger} b_{k\alpha} + t_k \left(a_{k\alpha}^{\dagger} b_{k\alpha} + b_{k\alpha}^{\dagger} a_{k\alpha} \right) \right) + \frac{J}{N} \sum_{k\alpha} u_{k\alpha}^{\dagger} \hat{L}_{k\alpha}.$$

Система уравнений движения в представлении Гейзенберга для базовых операторов $\hat{a}_{k\uparrow}\hat{b}_{k\uparrow}$, $\hat{L}_{k\alpha} = N^{-1}\sum_{fq\beta} e^{i\vec{R}_f(\vec{q}-\vec{k})} \left(\vec{S}\cdot\vec{\sigma}_{\alpha\beta}\right)\hat{u}_{q\beta}$ известна, см. лит. в статье [1]:

$$\begin{split} i\frac{d\hat{a}_{k\uparrow}}{dt} &= \left[\hat{a}_{k\uparrow}, \hat{H}\right]_{-} = \xi_{0}\left(k_{x}\right)\hat{a}_{k\uparrow} + t_{k}\hat{b}_{k\uparrow} + J\cos\frac{k_{x}}{2}\hat{L}_{k\uparrow},\\ i\frac{d\hat{b}_{k\uparrow}}{dt} &= \left[b_{k\uparrow}, \hat{H}\right]_{-} = \xi_{0}\left(k_{y}\right)\hat{b}_{k\uparrow} + t_{k}\hat{a}_{k\uparrow} + J\cos\frac{k_{y}}{2}\hat{L}_{k\uparrow},\\ i\frac{d\hat{L}_{k\uparrow}}{dt} &= \left[\hat{L}_{k\uparrow}, \hat{H}_{0}\right]_{-} + \left[\hat{L}_{k\uparrow}, \hat{J}\right]_{-} \approx \left(\varepsilon_{p} - \mu + 2\tau\left(1 + \gamma_{1k}\right) - 2t - J(1 + \gamma_{1k})\right)\hat{L}_{k\uparrow} = \omega_{3}\hat{L}_{k\uparrow}. \end{split}$$

При учете слагаемых, сохраняющих целостность оператора $\hat{L}_{k\uparrow}$ во втором коммутаторе в последнем уравнении, система приобретает вид, который позволяет преобразованием Лапласа точно решить алгебраическую систему комплексных изображений и получить временную зависимость оригиналов фермиевых операторов в виде суммы двух осциллирующих экспонент со своими показателями:

$$\hat{a}_{k\uparrow}(t) = \hat{a}_{k\uparrow}(0) \frac{\omega_1 e^{-i\omega_1 t} - \omega_2 e^{-i\omega_2 t} + [\xi_0(k_y) - t_k](e^{-i\omega_1 t} - e^{-i\omega_2 t})}{\omega_1 - \omega_2}$$

замена дает оператор $\hat{b}_{k\uparrow}(t) = \hat{a}_{k\uparrow}(t) [k_y \to k_x]$. Оператор квазичастицы $\hat{L}_{k\uparrow}$ зависит от трех частот: $\omega_{1,2} = 2^{-1} (\varepsilon_p - \mu + \tau(1 + \gamma_{1k})) \mp [4^{-1} (\cos k_x - \cos k_y)^2 - t_k^2]^{1/2}$ и ω_3 . $\hat{L}_{k\uparrow}(t) = \hat{L}_{k\uparrow}(0) [(1 - A_3)e^{-i\omega_3 t} + A_2e^{-i\omega_2 t} + A_1e^{-i\omega_1 t}]$, замена A_3 на A_1 и A_2 по правилу $A_3 (\omega_3 \to \omega_1; k_x \to k_y) = A_1$, где $A_3 = -J \frac{[\omega_3 + \xi_0(k_x)]\cos \frac{k_2}{2} - t_k \cos \frac{k_x}{2}}{(\omega_3 - \omega_2)(\omega_3 - \omega_1)}$.

1. В.В. Вальков, Д.М. Дзебисашвили, М.М. Коровушкин, К.К. Комаров, А.Ф. Барабанов, ЖЭТФ **155**, 1045 (2019).

Тведотельное охлаждение сверхпроводящих магнитов при помощи фазовых переходов в магнетиках

<u>В.В. Коледов</u>^{1*}, С.В. Таскаев², А.В. Маширов¹, А.П. Каманцев¹, А.В. Петров¹, К. Колесов¹, Д.С. Суслов¹, Ю.А. Терентьев¹, В.Г. Шавров¹

¹Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Мсоква, Россия ²Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия *E-mail: victor_koledov@mail.ru

Исследования магнитокалорического эффекта (МКЭ) в последнее время приобрели широкий размах во всем мире в связи с потенциальными применениями твердотельных магнитных материалов для высокоэффективного охлаждения при комнатной температуре. В докладе рассматривается новая концепция исследований и применений магнитокалорических материалов, которая предпологает создание и изучение перспективных систем твердотельного охлаждения для сверхпроводящих источников сильного магнитного поля с высокой эффективностью. В докладе дан обзор работ авторов, в которых оригинальными методиками в сильных магнитных полях в широком температурном диапазоне прямыми методами исследованы магнитные и магнитоструктурные фазовые переходы и магнитокалорические свойства новых материалов из сплавов, содержащих марганец, редкоземельные металлы и др. Например, на рис. 1 представлены температурные зависимости намагниченности и МКЭ сплава DyNi₂ в полях до 12 Тл. В докладе представлены также результаты по исследованию постоянных сверхпроводящих магнитов на основе высокотемпературных сверхпроводящих керамических материалорв в диапазоне температур от 90 до 3 К. Описаны перспективные конструкции магнитокалорических твердотельных холодильников и предварительные результаты по экспериментальному воспроизводству и исследованию циклов магнитного охлаждения с целью поддержания сильных магнитных полей и сверхпроводимости с помощью криогенных твердотельных функциональных материалов. Обсуждаются перспективы применения новых принципов магнитного твердотельного охлаждения для создания низких температур и сильных магнитных полей для микроэлектроники, медицины, энергетики, магнитолевитационного транспорта и многих других областей.



РИС. 1. ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ НАМАГНИЧЕННОСТИ (А) И МКЭ (В) СПЛАВА DyNi2.

Работа выполнена в рамках государственного задания при частичной поддержке РФФИ, грант № 18-07-01320.

Температурная зависимость электронной структуры системы с сильными электронными корреляциями и сильным электрон-фононным взаимодействием

И.А. Макаров*, С.Г. Овчинников

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия *E-mail: maki@iph.krasn.ru



РИС. 1. УШИРЕНИЕ ПИКА ЭЛЕКТРОННОЙ СПЕК-ТРАЛЬНОЙ ФУНКЦИИ, ПОДАВЛЕНИЕ ЕГО ИНТЕНСИВНОСТИ И СДВИГ ПИКА С РО-СТОМ ТЕМПЕРАТУРЫ ОТ 10 ДО 760 К. НА ВСТАВКЕ ИЗОБРАЖЕНО УВЕЛИЧЕНИЕ FWHM ПИКА С РОСТОМ ТЕМПЕРАТУРЫ.

ARPES спектры недопированных купратов характеризуются большой шириной пика и ее сильной зависимостью от температуры. Эти особенности могут быть объяснены при учете сильного электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ) и поляронной природы квазичастиц в ВТСП соединениях. В данной работе электронная структура недопированного купрата описывается в рамках трехзонной p-d-модели, дополненной моделью Холстейна для учета сильного ЭФВ с бездисперсными локальными фононами. Электронная структура описывается с помощью поляронной версии обобщенного метода сильной связи (p-GTB). В методе p-GTB электронная структура формируется квазичастицами, построенными в виде возбуждений Франк-Кондоновского типа между локальными многоэлектронными поляронными состояниями кластера, при учете их дисперсии.

Зонная структура квазичастичных возбуждений представляет собой зоны хаббардовских фермионов, размытые в области наиболее сильного взаимодействия с резонансами Франка-Кондона. Область размытия характеризуется многочисленными расщеплениями на слабодисперсные подзоны хаббардовских поляронов и равномерным распределением спектрального веса по возбуждениям со всеми возможными волновыми векторами внутри этих подзон. При этом квазичастичные возбуждения теряют когерентность, спектральная функция принимает вид широкого распределения слабоинтенсивных пиков, относящихся к многофононным возбуждениям. Рост температуры приводит к заполнению возбужденных поляронных состояний, и, следовательно, квазичастичные переходы с участием этих состояний приобретают спектральный вес и дисперсию. Это вызывает перестройку зонной структуры от антиферромагнитного типа с максимумом в точке $\mathbf{k} = \left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$ к парамагнитному типу с максимумом в $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$, увеличение области и степени размытия. С ростом температуры распределение пиков некогерентных возбуждений становится шире, и при учете конечного времени жизни квазичастиц это проявляется в виде уширения спектральной функции (рис. 1), при изменении температуры от 200 до 760 К полная ширина на половине высоты (FWHM) пика увеличивается в два раза (вставка на рис. 1). Увеличение температуры приводит также к уменьшению интенсивности пика, его сдвигу и уменьшению диэлектрической щели.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-02-00098.

Исследование золотых фуллеренов как контрастных агентов для фотоакустической визуализации раковых заболеваний в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций

Г.И. Миронов

Марийский государственный университет, Йошкар-Ола, Россия E-mail: mirgi@marsu.ru

В настоящее время возникла острая необходимость теоретического объяснения физикохимических свойств нанокластеров золота, особенно полых наноструктур золота, золотых фуллеренов [1], которые можно применять в диагностике и терапии раковых заболеваний. Дело в том, что золотые фуллерены, внедренные в организм с помощью инъекции, как благородные материалы имеют тенденцию не взаимодействовать со здоровыми клетками, аккумулируясь на поверхности раковых клеток. Для того, чтобы процесс аккумуляции происходил интенсивнее, золотые фуллерены конъюгируют определенными белками [2], которые обладают способностью быстро находить опухолевые клетки. Эти аккумулированные на поверхности раковых клеток золотые наночастицы позволяют методом фотоакустической визуализации выявить область злокачественных образований на ранней стадии заболевания, тогда как метод магнитно-резонансной томографии позволяет это сделать это лишь на более поздней стадии.

Благодаря своим большим оптическим сечениям поглощения золотые фуллерены, которые поглощают свет в инфракрасной области спектра [3], обеспечивают превосходную эффективность преобразования оптической энергии в тепловую энергию – направив инфракрасный лазер на место локализации раковых клеток, мы можем локально за счет поглощения золотыми фуллеренами инфракрасного излучения повысить температуру до 42°С, при такой температуре раковые клетки начинают разрушаться. Многочисленные исследования показали, что локальная температура выше 40°С может изменить микроокружение опухоли и свойства передачи сигнала, вызывая необратимые повреждения белков и приводя к дефициту репарации двухцепочечной ДНК [4] и, как итог, к разрушению опухоли [4]. Таким образом, фототермическая терапия представляет собой улучшенную форму лечения рака.

Электронные и оптические свойства золотых фуллеренов изучаются в рамках модели Хаббарда [5] в приближении статических флуктуаций [6]. Получены выражения для фурьеобразов антикоммутаторных функций Грина для золотых фуллеренов Au₁₆, Au₂₀, Au₃₂, Au₄₂, полюса которых определяют энергетический спектр рассматриваемой системы. Вычислены термодинамические средние, характеризующие перескоки электрона с узла наносистемы на соседний узел, корреляционные функции, свидетельствующие о вероятности нахождения двух *d*-электронов с противоположно ориентированными проекциями спинов на одном узле рассматриваемых фуллеренов из атомов золота. Построены спектры оптического поглощения. Пики оптического поглощения отрицательно заряженных ионов изучаемых фуллеренов соответствуют ближней инфракрасной области спектра, где поглощение света кровью или мягкой тканью мало, поэтому эти ионы могут привлекаться как новый класс контрастных улучшений и фототерапевтических средств для диагностики и лечения раковых заболеваний [3,7].

1. P. Singh, S. Pandit et al., Int. J. Mol. Sci. 19, 1979 (2018).

2. X. Yi, F. Wang et al., Nanomedicine 9, 1347 (2014).

3. G.I. Mironov, Physics of the Solid State 61, 1144 (2019).

- 4. J.F. Hainfald, L. Lin, Nanomedicine 10, 1347 (2014).
- 5. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A 276, 238 (1963).
- 6. Г.И. Миронов, ФММ **105**, 355 (2008).

7. Г.И. Миронов, Журнал неорганической химии 64, 106 (2019).

Изучение магнитного состояния и размерных эффектов в наночастицах на основе 3d-металлов методами ЯМР

<u>К.Н. Михалев</u>^{*}, А.Ю. Гермов, Д.А. Прокопьев, М.А. Уймин, А.Е. Ермаков, А.С. Конев, В.С. Гавико

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

Магнитные наночастицы представляют значительный интерес как с фундаментальной точки зрения, так и в связи с возможностью их практического применения в медицине, спинтронике, сенсорных устройствах, суперконденсаторах и т.д. [1]. Для предохранения наночастиц от воздействия окружающей среды их желательно синтезировать в углеродной оболочке. С другой стороны, эта оболочка совместима с биологическими тканями, что значительно облегчает применение таких наночастиц в медицине.

Свойства наночастиц зависят от многих факторов: размера, фазового состава, толщины углеродной оболочки, способа синтеза и т.д. В нашей работе мы исследовали наночастицы M@C (M = Ni, Fe), синтезированные газофазным способом [2].

С фундаментальной точки зрения в наночастицах с размерами в несколько параметров решетки (3 — 9 нм) следует ожидать проявления новых квантовых размерных эффектов.

Ранее было показано [3], что такие локальные методы, как ЯМР, наиболее эффективны для изучения фазового состава, магнитного состояния и зарядового распределения в наночастицах с размерами меньше 10 нм.

В этой работе мы получили и проанализировали спектры ЯМР 57 Fe, 61 Ni в локальном поле в наночастицах Fe@C, Ni@C с размером 5-8 нм.

Спектр ЯМР $^{57}{\rm Fe}$ представляет собой суперпозицию нескольких неоднородно уширенных линий. Одна из них принадлежит металлическому α -железу с ОЦК-структурой. Низкочастотная часть спектра ЯМР $^{57}{\rm Fe}$ связана с линиями от карбидов железа ${\rm Fe}_{x}{\rm C}$.

Оказалось, однако, что спектр ЯМР ⁵⁷ Fe ОЦК-железа в наночастицах Fe@C значительно отличается от спектра металлического α -железа: он уширяется и смещается в область более высоких частот. Следует отметить, что речь идет о наночастицах, размер которых много меньше размера домена в ферромагнетике. Точно такой же эффект обнаружен при анализе спектров ЯМР ⁶¹Ni в наночастицах Ni@C. Таким образом, мы экспериментально обнаружили новый квантовый размерный эффект, природа которого до конца не ясна. Возможные причины обнаруженного изменения распределения сверхтонких полей в наночастицах на основе 3*d*-металлов обсуждаются в докладе.

Работа выполнена в рамках государственной программы, тема «Функция» № ААА-А18-118020290104-2, при поддержке проекта УрО РАН № 18-10-2-37.

- 1. E.G. Sharoyan, A.A. Mirrahkanyan, H.T. Gyulasaryan, A.N. Kocheryan, A.S. Makuryan, J. of Contemporary Phys. **52**, 147 (2017).
- 2. V.R. Galakhov, A.S. Shkvarin, A.S. Semenova, M.A. Uimin, A.A. Mysik, N.N. Shchogoleva, A.Ye. Yermakov, E.Z. Kurmaev, J. Phys. Chem. **114**, 22413 (2010).
- 3. К.Н. Михалев, А.Ю. Гермов, А.Е. Ермаков, М.А. Уймин, А.Л. Бузлуков, О.М. Саматов, ФТТ **59**, 500 (2017).

Weakness of correlation effects in BaNi₂As₂: ARPES and LDA+DMFT study

N.S. Pavlov^{1*}, T.K. Kim², A. Yaresko³, Ki-Young Choi⁴, I.A. Nekrasov¹, D.V. Evtushinsky⁵

¹ Institute of electrophysics UB RAS, Ekaterinburg, Russia
 ² Diamond light source, Harwell Campus, Didcot, United Kingdom
 ³ Max Planck institute for solid state research, Stuttgart, Germany
 ⁴ Agency for defense development, Convergence technology collaboration directorate, Daejon, Korea
 ⁵ Institute of physics, Ecole polytechnique federale Lausanne, Lausanne, Switzerland
 *E-mail: pavlovns@gmail.com

Electron-electron interactions in solids is one of the most intriguing problems in the modern physics. From empirical perspective it is already clear that the unconventional superconductivity is an intimately related phenomenon, while the understanding of the underlying connection is missing. Iron pnictides and chalcogenides became a class of unconventional superconductors offering broad opportunities for the investigation by the advanced experimental and theoretical techniques [1,2,3]. All iron-based superconductors exhibit strong band renormalization, originating from the electron-electron interactions. In order to get a view at the problem from a different angle, we have studied a compound where iron is completely substituted by nickel.

In this work we present a combined study of the electron-electron interactions in $BaNi_2As_2$, a material isostructural to the iron-based superconductors. To this purpose we have investigated [4] the electronic structure of $BaNi_2As_2$ in a wide binding energy range both theoretically, by LDA+DMFT [5], and experimentally, by ARPES. For more realistic comparison of the calculated spectral functions with ARPES data, we take into account several experimental features [6]: the photoemission cross-section, energy and angular resolution, and the photo-hole lifetime effects. This approach illustrates a way for quantitative comparison of theory and experiment.

In contrast to isostructural iron arsenides the $BaNi_2As_2$ within LDA+DMFT appears to be weakly correlated (effective mass enhancement about 1.2). This dramatic reduction of the correlation strength comes from the increase of 3*d*-orbital filling, when going from Fe to Ni, together with rather large bare Ni-3*d* LDA bandwidth. Nevertheless, even weakened electron correlations cause remarkable reconstruction of the bare $BaNi_2As_2$ LDA band structure and corresponding LDA+DMFT calculations provide better agreement with ARPES than just renormalized LDA results. Finally, the discovered good agreement ensures the applicability of the proposed scheme for the future research on the electronic systems with correlations of intermediate strength, including the intelligent search for new unconventional superconductors.

- 1. M.V. Sadovskii, Physics-Uspekhi 51, 1201 (2008).
- 2. G.R. Stewart, Reviews of Modern Physics 83, 1589 (2011).
- 3. A.A. Kordyuk, Low Temperature Physics 38, 888 (2012).
- 4. N.S. Pavlov, T.K. Kim, A. Yaresko, Ki-Young Choi, I.A. Nekrasov, D.V. Evtushinsky, e-print arXiv:1911.09300 (2019).
- 5. G. Kotliar, S.Y. Savrasov, K. Haule, V.S. Oudovenko, O. Parcollet, and C.A. Marianetti, Rev. Mod. Phys. **78**, 865, (2006).
- 6. A. Damascelli, Z. Hussain, Z.-X. Shen, Rev. Mod. Phys. 75, 473 (2003).

Dependence of superexchange interaction in CrO₂ on pressure

S.I. Polukeev*, V.A. Gavrichkov, S.G. Ovchinnikov

Kirensky institute of physics SB RAS, Krasnoyarsk, Russia *E-mail: psi@iph.krasn.ru

We derived simple and useful rules for the exchange sign from previous complex calculations of the super-exchange interaction in the oxides of transition elements under optical pumping and extreme pressure. Using these rules, we analyzed the behavior of the exchange interaction of a number of oxides of iron, cobalt, chromium, copper and manganese with increasing pressure.

Spin crossovers can be static and dynamic. The former take place under pressure, the latter can be induced by optical pumping at the characteristic frequency of dd or ff transitions. Moreover, the lifetime of the excited states of the d(f) ion can significantly exceed the time of change of the exchange interaction with the participation of optically excited magnetic ions $\sim 10^{-15}$ s. The dependence of the exchange interaction sign on the spin on a magnetic ion has been well studied, but these calculations are very complex for an arbitrary state of the magnetic ion. We re-derived a little-known conclusion about the connection of the type of super-exchange with the spin state of a magnetic ion, and also determined the limits of its applicability. Its strength is the relative ease of use when analyzing the super-exchange interaction in materials under pressure or optical pumping at the transition frequency. This characteristic is comparable to the simplicity of the well-known rules of Gudenath–Kanamori–Anderson, which scientists have used for many years to expressly analyze the magnetic state of dielectric materials. As we will see in the future, additional complications arise only in connection with the attraction of the Tanabe-Sugano diagrams.

In this work a Hamiltonian of superexchange interaction was derived in analytical form due to the many-electron approach based on the X-operators representation and technique of projection operators generalized on arbitrary quasiparticle energy spectra of Mott-Hubbard insulator. This approach was previously used to analyze the contribution from optically excited states to the superexchange interaction in Mott-Hubbard insulators.

In this paper we tried to illustrate the efficiency of a new method using the example of chromium oxide CrO_2 , analyzing the behavior of its magnetic state under pressure or by optical pumping. To do this, we first touch upon the method and its derivation in detail, and then show where there is a match with the experimental data, and where there are reasons for the discrepancy and what is their nature. We are also interested in what lies behind simple physical estimates when considering spin crossovers, and where appropriate inaccuracies can be made in deriving microscopic parameters for specific materials.

Support by RSF grant № 18-12-00022 is acknowledged.

- 1. V.A. Gavrichkov, S.I. Polukeev, and S.G. Ovchinnikov, Phys. Rev. B 95, 144424 (2017).
- S.I. Polukeev, V.A. Gavrichkov, S.G. Ovchinnikov, Journal of Siberian Federal University 11(2), 159 (2018).
- 3. V.A. Gavrichkov, S.I. Polukeev, S.G. Ovchinnikov, JETP 154, 835 (2018).

Универсальные микроскопические особенности в жидких металлах

Р.М. Хуснутдинов*, А.В. Мокшин

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия *E-mail: khrm@mail.ru

На основе принципа термодинамического подобия и закона соответствующих состояний выполнен анализ доступных экспериментальных данных (по рентгеновской и нейтронной дифракции, спектроскопии и вискозиметрии) для структурных, динамических и транспортных свойств жидких щелочных (Li, Na, K), щелочноземельных металлов (Mg, Ca, Sr) и металлов подгрупп никеля (Ni, Pd, Pt) и меди (Cu, Ag, Au). Установлено, что принцип термодинамического подобия формулируется для групп жидких металлов при специфическом переопределении температурной шкалы. С помощью масштабных соотношений, полученных в рамках принципа соответствующих состояний и экспериментальных данных по дифракции нейтронов и рентгеновских лучей для радиальной функции распределения $g(\mathbf{r})$ и статического структурного фактора $S(\mathbf{k})$ показано, что все элементы групп жидких щелочных, щелочноземельных и переходных металлов описываются единой г- и k-зависимостями. Установлен универсальный характер микроскопической коллективной динамики в жидких металлах. Обнаружены общие особенности в температурных зависимостях транспортных характеристик жидких щелочных, щелочноземельных и переходных и переходных и переходных и переходных и переходных и переходных металлов.

Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект № 19-12-00022).

D-мерная парамагнитная модель Хаббарда

Н.И. Чащин

Уральский государственный лесотехнический университет, Екатеринбург, Россия E-mail: nik.iv.chaschin@mail.ru

В данной работе на примере парамагнитной наполовину заполнененной ($\langle n \rangle$ =1) модели Хаббарда рассматривается влияние пространственной размерности D на физические параметры системы. Модель формализована интегральными уравнениями, полученными с помощью техники вариационных производных с последующим преобразованием Лежандра [1].

Ограничимся для простоты предположением, что для *D*-мерной кубической решетки зависимость от вектора импульса k определяется только его модулем *k*:

$$\mathbf{k} = (k_1, k_2, \dots k_D), \ k = \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + \dots + k_D^2}.$$
 (1)

В этом случае энергетический спектр свободного электрона в режиме сильной связи представляется в виде:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t \sum_{i=1}^{D} \cos(k_i) \approx -D \cos\left(\frac{\pi}{K_D}k\right),\tag{2}$$

где параметр K_D есть D-мерный радиус первой зоны Бриллюэна ($k_F = K_D/2$); в частности, $K_1 = \pi$, $K_2 = 2\pi^{1/2}$, $K_3 = (6\pi^2)^{1/3}$,

Оказывается, что роль эффективной константы взаимодействия в модели выполняет произведение $U \cdot C_D$, где функция C_D вычисляется через Г-функцию и имеет максимальное значение при D = 1. Для $D > 4 C_D \ll 1$, и это дает право размерность D = 4 считать пороговой для величины корреляционных эффектов в системе.

На правом рисунке в качестве примера представлены графики числа дважды занятых электронами узлов для различных значений кулоновского взаимодействия U. Расчеты выполнены для D = 1, D = 2, D = 3. Стрелки показывают численные значения U_D , когда $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle = 0$.



РИС. 1. Графики числа дважды занятых электронами узлов для различных значений кулоновского взаимодействия U.

- 1. Н.И. Чащин, ФММ **113**, 563 (2012).
- 2. N.I. Chaschin, arXiv:1806.05364v1 (2018).
Анализ задачи Кондо и задачи о поляроне с использованием квантового метода Монте-Карло

А.С. Черткова^{1,2*}, В.В. Выборова², А.Н. Рубцов^{1,2}

¹Российский квантовый центр, Москва, Россия ²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия *E-mail: chertkova.anastasia.phys@gmail.com

Последние достижения в экспериментальном наблюдении сильно коррелированных эффектов в ультрахолодных атомах позволяют изучать поведения примесей в подобных средах с высокой точностью [1,2]. Вместе с тем, существующие теоретические методы не обладают достаточной предсказательной силой в описании динамики таких систем [3], поэтому для изучения подобных задач используется численное моделирование. Одним из наиболее эффективных классов алгоритмов оказывается квантовый метод Монте-Карло [4]. Однако при решении задач туннелирования примесей, сильно взаимодействующих с квантованным полем, применение существующих вариантов этого метода не является целесообразным [5]. Поскольку время прохождения частицы через потенциальный барьер оказывается значительно больше времени ее взаимодействия с полем, наблюдается экспоненциальное снижение скорости работы алгоритмов, основанных на непосредственном вычислении действия интегралов по путям.

Для того, чтобы обойти это ограничение, нами был предложен новый вариант квантового метода Монте-Карло в терминах интегралов по траекториям, определенных на сетке с большим шагом по времени, и использующий точное интегрирование по «быстрым» степеням свободы.

Для применения нашего алгоритма мы выбрали модель полярона в конденсате Бозе-Эйнштейна. Цель исследования – рассмотрение динамики туннельного эффекта в поляронной задаче, описываемой гамильтонианам Фрелиха.

Основная идея модификации алгоритма состоит в том, чтобы найти точное решение невозмущенной задачи о частице в двухъямном потенциале, а взаимодействие с бозонным полем учесть при моделировании траекторий во мнимом времени. Высокая точность предложенного алгоритма уже была продемонстрирована на примере задачи о поляроне в двухъямном потенциале для одной моды возбуждений в конденсате Бозе-Эйнштейна с помощью метода точной диагонализации [6]. Для гибридизации линий непрерывного спектра наш метод также показал хорошую устойчивость при моделировании.

Результаты данной работы могут быть потенциально интересны в контексте экспериментальных исследований [1,2].

- 1. N.B. Jørgensen et al., Phys. Rev. Let. 117, 055302 (2016).
- 2. M.G. Hu et al., Phys. Rev. Let. 117, 055301 (2016).
- 3. F. Chevy, Physics 9, 86 (2016).
- 4. A.N. Rubtsov, V.V. Savkin, A.I. Lichtenstein, Phys. Rev. B 72, 035122 (2005).
- 5. Y.E. Shchadilova, F. Grusdt, A.N. Rubtsov, E. Demler (2014).
- 6. Выпускная квалификационная работа А.С. Чертковой «Моделирование туннельного эффекта для полярона квантовым методом Монте-Карло», дата защиты 28.05.2018, диссертационная комиссия МГУ им. М.В. Ломоносова кафедры квантовой электроники.

Влияние сильных электронных корреляций на особенности формирования и детектирования квазимайорановских состояний в одномерных системах

С.В. Аксенов, М.С. Шустин*

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия *E-mail: mshustin@yandex.ru

Недавно было объявлено об обнаружении квантованного пика дифференциальной проводимости при нулевом напряжении в полупроводниковых нанопроволоках с индуцированной за счет эффекта близости сверхпроводимостью [1]. Высота наблюдаемого пика была равна двум квантам проводимости $2e^2/\hbar$ в широком интервале магнитных полей, что авторами интерпретировалось как проявление в системе майорановских связанных состояний [2]. Однако вскоре после этого появились работы, сообщающие о том, что в исследуемых нанопроволоках может быть реализован режим сильных электронных корреляций [3]. При этом устойчивое квантование пика дифференциальной проводимости может быть связано с существованием андреевских состояний [4]. Учитывая вышесказанное, актуальной является задача исследования свойств квазимайорановских состояний в полупроводниковых нанопроволоках с сильным спин-орбитальным взаимодействием и наведенной сверхпроводимостью в режиме сильных электронных корреляций.

Гамильтониан описанной системы имеет вид:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{f\sigma} \left[ta_{f\sigma}^{+} a_{f+1,\sigma} + \eta_{\sigma} \left(\alpha a_{f\sigma}^{+} a_{f+1,\bar{\sigma}} + \Delta a_{f\sigma} a_{f\bar{\sigma}} + \Delta_{1} a_{f\sigma} a_{f+1\bar{\sigma}} \right) + h.c. \right] + U \sum_{f} n_{f\uparrow} n_{f\downarrow} + V \sum_{f\sigma\sigma'} n_{f\uparrow} n_{f+1\downarrow},$$

$$(1)$$

где в первой строчке фигурируют слагаемые, относящиеся к сверхпроводящей нанопроволоке без взаимодействия, вторая строка отвечает за наличие в системе локальных электронэлектронных взаимодействий. С использованием метода ренорм-группы для матрицы плотности [5], а также обобщения понятия майорановской поляризации [6] на случай системы с электронными взаимодействиями рассмотрен вопрос о реализации квазимайорановских состояний. При этом, в отличие от работы [7], был рассмотрен режим $U \gg t$, α , h, Δ , Δ_1 [8]. Показано, что сильные электронные корреляции, с одной стороны, могут индуцировать фазы с парой майорановских связанных состояний, а с другой стороны, способствуют подавлению состояний с одиночными майорановскими возбуждениями. При этом данные эффекты могут быть обнаружены посредством измерения калорических характеристик и спиновой поляризации нанопроволоки.

Работа поддержана РФФИ № 19-02-00348, Правительством Красноярского края и Краевым фондом науки № 19-42-240011.

- 1. H. Zhang et al., Nature 556, 74 (2018).
- 2. A.Y. Kitaev, Physics-Uspekhi 44, 131 (2001).
- 3. Y. Sato et al., Phys. Rev. B 99, 155304 (2019).
- 4. C. Moore et al., Phys. Rev. B 97, 165302 (2018).
- 5. S.R. White, Phys. Rev. Lett. 69, 2863 (1992).
- 6. N. Sedlmayr et al., Phys. Rev. B 93, 155425 (2016).
- 7. E. Stoudenmire et al., Phys. Rev. B 84, 014503 (2011).
- 8. S.V. Aksenov, A.O. Zlotnikov, M.S. Shustin, arXiv:1911.01035 [Cond-Mat] (2019).

ТЕОРИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ И НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ

Критическая динамика бозонной системы вблизи квантового фазового перехода

М.Г. Васин

Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Россия E-mail: dr_vasin@mail.ru



Рис. 1. T/ω_0 – отношение энергии тепловых флуктуаций к энергии нулевых колебаний системы.

Известно, что квантовые фазовые переходы по своей природе являются динамическими [1]. Однако в настоящее время подробно описана лишь недиссипативная квантовая динамика, применение которой в случае сложной многочастичной системы ограничено временем когерентности этой системы. При этом остаётся открытым вопрос, каким образом диссипация влияет на критическое поведение вблизи квантовой критической точки. А такое влияние существует, на что, например, указывает непрерывное изменение критических индексов претерпевающих фазовый переход квантовых систем при приближении к T = 0 [2–5].

В данной работе предлагается общий подход, позволяющий рассматривать как адиабатические, так и диссипативные процессы в многочастичных системах, подчиняющихся статистике Бозе-Эйнштейна, посредством единой теории, основанной на технике Келдыша-Швингера. Используя данный подход в критической динамике, можно выявить три различные критические моды: адиабатическую квантовую моду (релятивистская квантовая механика), диссипативную классическую моду (классическая крити-

ческая динамика) и диссипативную квантовую критическую моду [6]. Показано, что при переходе от высокотемпературного режима, в котором преобладают тепловые флуктуации, к квантовому режиму, в котором остаются только квантовые флуктуации, система приобретает эффективную размерность $d + z\Lambda(T)$, где z – динамический показатель, а $\Lambda(T)$ увеличивается от 0 до 1 при приближении температуры к нулю.

Таким образом, предложенная теория даёт единую картину квантовых критических явлений, учитывающаю как классическую, так и квантовую диссипацию, и позволяет описать наблюдаемый вблизи квантовой критической точки квантово-классический кроссовер критических показателей (см. рис. 1).

- 1. С.М. Стишов, УФН 174, 8, 853 (2004).
- 2. W.A. Erkelens et al., Europhys. Lett. 1, 37 (1986).
- 3. J.J.M. Steijger et al., J. Magn. and Magn. Mat. 31, 1091 (1983).
- 4. S.M. Stishov et al., Phys. Rev. B 91, 144416 (2015).
- 5. F.B. Carneiro, E.M. Bittar et al., arXiv:1912.05669v1 (2019).
- 6. M.G. Vasin, V.N. Ryzhov, V.M. Vinokur, Scientific Reports 5, 18600 (2015).

Модель Изинга на двумерной ромбической решетке. Точное решение

<u>Ф.А. Кассан-Оглы</u>¹*, А.И. Прошкин^{1,2}

¹Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия ²Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия *E-mail: felix.kassan-ogly@imp.uran.ru

Ромбическая решетка (diced lattice, mitsubishi lattice), дуальная к решетке кагоме, как известно, не является архимедовой решеткой, так как часть узлов имеет три ближайших соседа, а часть – шесть (в среднем на узел приходится четыре ближайших соседа). Классическая изотропная модель Изинга на ромбической решетке исследовалась рядом авторов (см., например, [1–3]), однако точного решения для анизотропной задачи до сих в явном виде получено не было.

В данной работе исследуется модель Изинга на двумерной ромбической решетке с учетом взаимодействий между ближайшими соседями в отсутствие магнитного поля. Получено точное выражение для максимального собственного значения трансфер-матрицы Крамерса-Ваннье в анизотропном случае, которое в термодинамическом пределе сходится к статистической сумме. Подробно исследовано температурное поведение свободной энергии, внутренней энергии, энтропии и теплоемкости в зависимости от различных знаков обменных взаимодействий. В изотропном случае модель испытывает единственный фазовый переход при температуре $T_c = 2/\operatorname{arcosh}[(1 + \sqrt{3})/2]$, значение которой совпадает в случае ферромагнитного и антиферромагнитного взаимодействия вотличие от решетки кагоме, которая в случае изотропного антиферромагнитного взаимодействия является фрустрированной, ромбическая решетка при нулевой температуре упорядочивается и в антиферромагнитном случае.

Получено выражение для спонтанной намагниченности в анизотропной задаче. Показано, что спонтанная намагниченность существует только в интервале от нулевой температуры до температуры фазового перехода. Выше температуры перехода спонтанная намагниченность отсутствует.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема Квант, № АААА-А18-118020190095-4), при частичной поддержке Уральского отделения РАН (проект № 18-2-2-11).

- 1. Phase transitions and critical phenomena. Volume 1. Exact results. Ed. by C. Domb and M.S. Green, Academic press (1972).
- 2. M. Fisher, Phys. Rev. 113, 969 (1959).
- 3. J.F. Valdés, W. Lebrecht, E.E. Vogel, Physica A 385, 551 (2007).

Магнитные фазовые переходы в несоизмеримые структуры в проводящих и оксидных соединениях 3d-элементов

В.В. Меньшенин

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

Определение несоизмеримых магнитных структур, нередко возникающих при термодинамических фазовых переходах в магнетиках, является нетривиальной задачей физики конденсированных сред. Идентификация таких структур, исходя из результатов магнитного рассеяния нейтронов, может быть неоднозначной. Для переходов из парамагнитного в магнитоупорядоченное состояние эту неоднозначность можно устранить, используя теоретикогрупповой подход и теоретико-полевые методы анализа фазовых переходов. Такая возможность была реализована на примере соединений $FeGe_2$ и $LiMn_2O_4$. В соединении $FeGe_2$ построены, исходя из симметрии системы, функционалы Гинзбурга-Ландау для всех возможных переходов в несоизмеримую магнитную структуру, проведен ренормгрупповой анализ переходов и найдено, что простая спираль может возникнуть только в результате двух фазовых переходов второго рода при близких температурах. Переход по одному представлению сопровождается появлением структуры типа продольной или поперечной спиновой волны. Для соединения $LiMn_2O_4$ определены все возможные переходы в несоизмеримую фазу, вид их магнитного порядка и критический индекс магнитного момента. Магнитная несоизмеримая структура в $LiMn_2O_4$, исходя из данных нейтронографии, пока не найдена.

1. В.В. Меньшенин, ЖЭТФ 157, 1 (2020).

2. В.В. Меньшенин, ФТТ 61, 3, 552 (2019).

Топологические солитоны в магнитных наноструктурах

К.Л. Метлов

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, Донецк E-mail: metlov@donfti.ru

Прогресс развития литографии, сопряжённый с прогрессом в микроэлектронике, привёл (в конце прошлого, начале нынешнего века) к появлению новых объектов в магнетизме – магнитных наноструктур. Их состояния (равновесные и промежуточные в динамике) – распределения намагниченности – сильно отличаются от хорошо изученных магнитных состояний бесконечных тонких плёнок [1]. Особенности состояний наноструктур, вызванные наличием у них боковых границ, являются предметом представленных исследований.

В докладе используется приближённое отображение магнитных состояний планарных магнитных наноструктур на функции комплексной переменной [2], которое позволяет рассматривать их аналитически. Вводится лагранжев подход к описанию динамики наноструктур в терминах коллективных переменных, определённых при помощи функций комплексных переменных [3]. Обсуждаются его отличия от широко используемого для моделирования вихревой динамики уравнения Тиля. Представлена карта основных и метастабильных состояний кругового наноцилиндра [4–6], выражения для частот линейной и нелинейной прецессии магнитного вихря [7] и другие аналитические результаты, полученные при помощи этого подхода. Рассмотрены топологические ограничения на положения вихрей и антивихрей, возникающие в планарных наноструктурах высокой связности [8].

- 1. A. Hubert and R. Schafer, Magnetic domains. The analysis of magnetic microstructures, Berlin, Springer(1998).
- 2. K.L. Metlov, Phys. Rev. Lett. 105, 107201 (2010).
- 3. K.L. Metlov, Phys. Rev. B 88, 014427 (2013).
- 4. K.L. Metlov and K.Y. Guslienko, J. Magn. Magn. Mater. 242–245, 1015 (2002).
- 5. K.L. Metlov and Y.P. Lee, Appl. Phys. Lett. 92, 112506 (2008).
- 6. K.L. Metlov, J. Appl. Phys. 113, 223905 (2013).
- 7. K.L. Metlov, J. Appl. Phys. 114, 223908 (2013).
- 8. A.B. Bogatyrev and K.L. Metlov, Phys. Rev. B 95, 024403 (2017).

Фазовые переходы в двумерных неупорядоченных моделях Поттса

А.К. Муртазаев¹*, А.Б. Бабаев^{1,2}

¹Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия ²Отдел математики и информатики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия *E-mail: akai2005@mail.ru

Изучение влияния различных дефектов структуры, содержащихся в твердом теле в виде примесей или в виде дислокаций на фазовые переходы (ФП) и критические явления (КЯ) представляет большой теоретический и экспериментальный интерес [1]. Это связано с тем, что большинство реальных твердых тел всегда содержит примеси и другие дефекты структуры, присутствие которых влияет на их физические свойства и, в частности, может существенно влиять на поведение систем при ФП. По этой причине существует серьезная необходимость знать закономерности влияния дефектов на те или иные свойства твердых тел. Без предварительных теоретических и экспериментальных исследований ни один материал не может быть использован для практических целей. Поэтому в последнее время усилия многих исследователей были направлены на то, чтобы понять, как те или иные дефекты структуры влияют на поведение различных систем при ФП.

В связи с этим целью настоящей работы является исследование на основе однокластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло (МК) влияния беспорядка, реализованного в виде вмороженных немагнитных примесей на ФП в низкоразмерных системах, для которых в однородном неразбавленном состоянии наблюдается ФП первого рода. Для этого рассматривались двумерная ферро- (ФМ) и антиферромагнитная (АФМ) модель Поттса с числом состояний спина q = 3 на треугольной решетке. В случае неупорядоченной АФМ модели Поттса с q = 3 исследовалось и критическое поведение.

Гамильтониан спиновой системы, описываемой моделью Поттса, с числом состояний спина *q* имеет следующий вид [2]:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \cos \theta_{i,j},\tag{1}$$

 $\theta_{i,j}$ – угол между взаимодействующими спинами S_i-S_j, J – параметр обменного ферро- (J>0)и антиферромагнитного (J<0)взаимодействия, $\rho_i=1$, если узелiзанят магнитным атомом, и $\rho_i=0$, если в iузле немагнитная примесь. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями при концентрациях спинов $p=1.00;\,0.90;\,0.80;\,0.70;\,0.65.$ Исследовались системы с линейными размерами $L\times L=N,\,L=20\div120.$ Для определения температуры ФП и анализа характера ФП использовался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка. Температуры ФП $T_l(p)$ в единицах $|J|/k_B$ равны: $T_l(1.0)=0.8515(1),\,T_l(0.90)=0.79(1),\,T_l(0.80)=0.65(2),\,T_l(0.70)=0.42(3),\,T_l(0.65)=0.35(4).$ Методика определения температуры ФП методом кумулянтов Биндера рассмотрена в работе [3].

Полученные данные свидетельствуют о том, что внесение слабого вмороженного беспорядка (c = 0.10, c = 1 - p) в виде немагнитных примесей в рассматриваемую АФМ модель Поттса с q = 3 на треугольной решетке приводит к ФП второго рода. Кроме того, для этой модели исследовано критическое поведение в зависимости от степени разбавления немагнитным беспорядком. Численно установлена независимость отношения критических индексов β/ν и γ/ν при изменении концентрации немагнитных примесей c от 0.10 до 0.35, что является следствием слабой универсальности рассматриваемой неупорядоченной модели.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проект № 19-02-00153).

^{1.} O. Vasilyev, B. Berche, M. Dudka, Yu. Holovatch, Phys. Rev. E 92, 042118 (2015).

^{2.} FY. Wu, ExactlySolved Models: A Journey in Statistical Mechanics, World Scientific (2009).

^{3.} A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, Materials Letters 238, 321 (2019).

Исследование влияния начальных состояний, анизотропии и дефектов структуры на неравновесное критическое поведение трехмерной модели Гейзенберга

В.В. Прудников*, П.В. Прудников, А.С. Лях

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия *E-mail: prudnikv@univer.omsk.su

Осуществлено численное Монте-Карло исследование влияния различных начальных состояний, магнитной анизотропии типа «легкая ось» и дефектов структуры на неравновесное критическое поведение классической трехмерной модели Гейзенберга. Анализ временной зависимости намагниченности и автокорреляционной функции для изотропной модели Гейзенберга показал существенное влияние начальных состояний на релаксацию намагниченности и эффекты старения в поведении автокорреляционной функции, характеризующиеся аномальным замедлением релаксации и корреляции в системе с ростом времени ожидания.

Исследование анизотропной модели Гейзенберга показало, что в долговременном режиме поведение намагниченности и автокорреляционной функции характеризуется критическими показателями трехмерной модели Изинга с более быстрым временным спаданием автокорреляционной функции, чем для изотропной модели.

Выявлено, что присутствие дефектов структуры при эволюции системы из низкотемпературного начального состояния приводит к аномально сильному замедлению автокорреляционной функции. Данные особенности в поведении автокорреляционной функции характеризуются эффектами «сверхстарения» с показателем «сверхстарения» $\mu = 2.6(1)$ и связаны с пиннингом доменных стенок на дефектах структуры в процессе неравновесного изменения доменной структуры системы. При эволюции из высокотемпературного начального состояния дефекты структуры приводят к усилению эффектов старения в режиме старения, а в долговременном режиме их влияние оказывается несущественным.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, проекты № 17-12-00279, 18-42-550003, и грантом МД-6868.2018.2 Президента РФ.

Компьютерное моделирование критического поведения мультислойных магнитных структур и низкоразмерных магнетиков

П.В. Прудников*, В.В. Прудников, В.О. Борзилов, М.М. Болдырева, Д.В. Евсин

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия *E-mail: prudnikovpv@omsu.ru

Мультислойное сочетание магнитных пленок наномасштабной толщины, разделенных слоем немагнитного металла, характеризуется эффектами гигантского магнитосопротивления. Наномасштабная периодичность создает в магнитных мультислойных структурах мезоскопические эффекты пространственной спиновой корреляции с медленной релаксационной динамикой намагниченности при замораживании системы в неравновесном состоянии. По сравнению с объемными магнитными системами, в которых медленная динамика и эффекты старения проявляются вблизи критической точки, магнитные сверхструктуры с наномасштабной периодичностью дают возможность увеличить время релаксации за счет эффектов, связанных с увеличенной в этих структурах характеристической корреляционной длиной спин-спиновых корреляций.

В данной работе методами Монте-Карло осуществлено исследование неравновесного критического поведения мультислойных магнитных структур, описываемых анизотропной моделью Гейзенберга. Будет представлен обзор аномальных эффектов в поведении мультислойных магнитных структур и неупорядоченных низкоразмерных магнетиков. Будет проведено исследование влияния эффектов анизотропии и взаимодействия Дзялошинского-Мория на поведение спиновых систем вблизи температуры фазового перехода второго рода. Мультислойное сочетание магнитных пленок наномасштабной толщины, разделенных слоем немагнитного металла, характеризуется эффектами гигантского магнитосопротивления.

Исследования поддержаны грантами Президента РФ МД.6868.2018.2, МД-2229.2020.2 и РФ-ФИ 17-02-00279, 18-42-550003, 19-32-90261, 20-32-70189.

Для проведения расчетов были использованы ресурсы центра данных ДВО РАН, г. Хабаровск, суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М.В. Ломоносова, межведомственного суперкомпьютерного центра РАН г. Москвы.

Калибровочная теория переходов сверхпроводник – изолятор в двумерных матрицах джозефсоновских контактов

М.Г. Васин

Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Россия E-mail: dr_vasin@mail.ru

Двумерная матрица джозефсоновских контактов, представляющая собой массив сверхпроводящих (СП) островков, разделенных несверхпроводящим материалом, является модельной системой для изучения переходов сверхпроводник – изолятор [1]. Свойства таких систем определяются отношением двух характерных энергий: энергии джозефсоновской связи между двумя соседними островками, E_J , и энергии, необходимой для переноса заряда 2e, E_C . В зависимости от отношения этих энергий $X = E_J/E_C$ и температуры система может находиться как в сверхпроводящем состоянии, $E_J > E_C$, так и в изолирующем, $E_J < E_C$. Обе эти энергии задаются свойствами используемых материалов, геометрическими размерами островков и пространства между ними. Однако величиной энергии джозефсоновской связи можно управлять с помощью внешнего магнитного поля, что позволяет наблюдать переходы сверхпроводник – металл – изолятор в эксперименте.

В недавних экспериментальных и теоретических работах было обнаружено, что в неупорядоченных сверхпроводящих плёнках, находящихся вблизи перехода сверхпроводник – изолятор, состояния сверхпроводника и изолятора являются дуальными [2–4].

В представленной работе был осуществлён последовательный переход от описания модели в терминах сверхпроводящих островков к квантово-полевому дуальному описанию в терминах калибровочных полей. Это позволило определить возможные состояния системы и переходы между ними методами статистической физики. Было показано, что в квазиклассическом приближении в системе могут происходить независимые переходы Березинского – Костерлица – Таулеса (БКТ) в электронной и вихревой подсистемах. В результате матрица джозефсоновских контактов может находиться в четырёх состояниях: резистивном, сверхпроводящем, в состоянии изолятора и в «заблокированном» состоянии, когда переходы зарядов и вихрей между СП островками невозможны. Показано, что данная картина меняется в квантовом пределе, когда БКТ-переходы вырождаются в единственный квантовый фазовый переход второго рода сверхпроводник – изолятор.

Предложенная теория позволяет объяснить различные сценарии [2,5] переходов сверхпроводник – изолятор в неупорядоченных сверхпроводящих плёнках.

- 1. R. Fazio, G. Schön, Phys. Rev. B 43, 5307 (1991).
- 2. T.I. Baturina, V.M. Vinokur, Annals of Physics 331, 236 (2013).
- 3. M.C. Diamantini, P. Sodano, C.A. Trugenberger, Nuclear Physics B 474, 641 (1996).
- 4. И.В. Протопопов, М.В. Фейгельман, Письма в ЖЭТФ **85** 10, 621 (2007).
- 5. В.Ф. Гантмахер, В.Т. Долгополов, УФН 180 1, 3 (2010).

Особенности температурного поведения магнитной теплоемкости фрустрированных одномерных спиновых систем

А.В. Зарубин*, Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прошкин

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

Магнитные фрустрации – чрезвычайно сложное явление, которое порождается конкурирующими взаимодействиями в системе и определяет необычные свойства магнетиков, активно исследуемых последние годы [1,2].

В работе изучаются фрустрационные свойства изинговской цепочки с учётом обменных взаимодействий атомных спинов на узлах нескольких соседей [3,4]. Сформулированы критерии возникновения магнитных фрустраций при наличии конкуренции между энергиями обменных взаимодействий, а также найдены сами положения фрустрации на магнитной фазовой диаграмме основного состояния системы.

Получены точные выражения для магнитного вклада в теплоёмкость системы. Исследованы особенности температурного поведения теплоёмкости в режиме фрустраций и его окрестностях. Показано кардинальное отличие в поведении магнитной системы во фрустрационной области и вне её.

Обнаружено, что одной из общих особенностей фрустированных систем является эффект расщепления максимума функции при температурной эволюции теплоёмкости на несколько пиков в непосредственной окрестности режима фрустрации.

Выявлены различия в формировании структуры и сложного поведения температурной эволюции теплоёмкости, которые демонстрируют несколько сценариев в поведении пиков функции в области фрустрации системы и вне её при различных значениях соотношений параметров обменных взаимодействий в спиновой системе.

Данный эффект можно наблюдать в реальных антиферромагнетиках на основе редкоземельных металлов и соединениях актиноидов, а также ряде металлорганических координационных полимеров, молекулярных и квазиодномерных фрустрированных магнетиков (см. обсуждение темы в работе [3]).

Результаты работы позволяют получить описание поведения теплоёмкости широкого класса магнетиков с фрустрациями и рассмотреть их свойства на микроскопическом уровне.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема Квант, № АААА-А18-118020190095-4), при частичной поддержке Уральского отделения РАН (проект № 18-2-2-11).

1. Frustrated spin systems, Ed. H.T. Diep, World Scientific (2013).

2. А.Н. Васильев и др., Низкоразмерный магнетизм, Физматлит (2018).

3. А.В. Зарубин, Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прошкин, А.Е. Шестаков, ЖЭТФ 155, 914 (2019).

4. A.V. Zarubin, F.A. Kassan-Ogly, A.I. Proshkin, J. Phys.: Conf. Ser. 1389, 012009 (2019).

Волновая турбулентность электрокапиллярных волн в 1D геометрии

Н.М. Зубарев^{1,2}, Е.А. Кочурин^{1*}

¹Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия ²Физический институт им. П.М. Лебедева РАН, Москва, Россия *E-mail: kochurin@iep.uran.ru

В рамках одномерной слабо нелинейной модели исследуется турбулентность капиллярных волн на поверхности диэлектрической жидкости с высокой проницаемостью в горизонтальном электрическом поле. В пределе сильного внешнего поля поверхностные волны могут распространяться без искажений вдоль или против его направления, что сходно с альфвеновскими волнами в идеально проводящей жидкости [1]. Взаимодействие встречных нелинейных волн приводит к развитию волновой турбулентности поверхности жидкости [2]. Результаты расчетов показывают, что спектр турбулентности разделяется на две области: низкочастотную бездисперсионную область, где доминируют электростатические силы, и высокочастотную дисперсионную область, в которой становится значительным влияние капиллярных сил. В первой области спектр поверхности приобретает степенную зависимость с показателем, близким к -3.5 как в k-, так и в ω -представлениях, что хорошо согласуется с оценкой, получаемой из размерного анализа спектров слабой турбулентности. Во второй высокочастотной области пространственный спектр поверхности близок к закону $k^{-5/2}$, что соответствует $\omega^{-5/3}$ в терминах частот. Этот спектр не совпадает со спектром Захарова-Филоненко, полученным для чисто капиллярных волн. Возможное объяснение этого факта заключается во влиянии когерентных структур (типа ударных волн), обычно возникающих в средах со слабой дисперсией.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ № 20-38-70022.

1. N.M. Zubarev, Phys. Lett. A 333, 284 (2004).

2. Е.А. Кочурин, Письма в ЖЭТФ 109(5), 306 (2019).

Особенности формирования ближнего порядка в магнитомягких сплавах Fe – X (X = Al, Si, Ga, Ge). Первоприципное моделирование

А.Р. Кузнецов^{1,2*}, Ю.Н. Горностырев^{1,2}, И.Г. Шмаков¹

¹Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия ²Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия *E-mail: a_kuznetsov@imp.uran.ru

Сплавы замещения на основе ОЦК Fe, легированные 3*p* (Al, Si) и 4*p* (Ga, Ge) элементами в концентрации, ниже границы растворимости, вызывают интерес [1,2] благодаря наблюдаемым явлениям индуцированной магнитной анизотропии (Fe – Al, Si), гигантской магнитострикции (Fe – Ga) и размягчению упругих модулей (Fe – Ga, Ge). Считается, что эти особые физические свойства обусловлены присутствием ближнего порядка (БП), однако природа его остается дискуссионной.

С целью выяснить механизм и факторы, определяющие формирования БП в сплавах Fe-X (X = Al, Si, Ga, Ge), мы использовали комбинированный подход, включающий первопринципный (VASP-PAW) расчет энергий межатомного взаимодействия и статистическое Монте-Карло моделирование структуры (алгоритм Метрополиса) в зависимости от температуры, магнитного состояния и состава сплавов.

Показано, что энергия эффективного взаимодействия Х – Х в ОЦК Fe зависит от магнитного состояния матрицы. В результате В2-тип БП, ответственный за усиление магнитной анизотропии, формируется при $T > T_C$ и фиксируется при закалке, в то время как в ферромагнитном состоянии (*T* < *T*_C) реализуется равновесный D0₃-тип БП. Релаксация дает существенный вклад во взаимодействие вакансия – легирующий атом. Показано, что энергия связи вакансии с примесью высока в случае Ga и Ge (~ 0.45 эВ), что в два раза больше, чем для Al и Si. Энергия связи увеличивается при формировании комплексов Vac – легирующий атом. В кластере вакансии с двумя легирующими атомами энергия взаимодействия вакансии с растворенными атомами становится высокой, а в случае конфигураций Vac-4Ga, Vac-4Ge энергия взаимодействия близка к энергии образования вакансии в железе, в результате чего эффективная энергия образования вакансий близка к нулю. В результате в сплавах Fe – X (X = Ga, Ge) формирование БП В2-типа с участием вакансий оказывается предпочтительным в ферромагнитном состоянии. Монте-Карло моделирование проведено при конечной температуре. Ближний порядок в сплаве был слабым при отсутствии вакансий в моделируемом кристаллите, но при введении вакансий ближний порядок оказался существенным благодаря кластеризации легирующих атомов с вакансиями. В кристаллите наблюдалось множество мелких кластеров, содержащих вакансию и легирующие атомы. Полученные результаты позволяют объяснить основные наблюдаемые особенности ближнего порядка в сплавах Fe - X (X = Al, Si, Ga, Ge), определяющие их магнитные свойства.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Структура», № АААА-А18-118020190116-6), при частичной поддержке РФФИ (проект № 18-02-00391). Работа была выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мегакласса» НИЦ «Курчатовский институт», http://ckp.nrcki.ru/.

1. О.И. Горбатов, А.Р. Кузнецов, Ю.Н. Горностырев и др., ЖЭТФ **139**, 969 (2011). 2. Y. He, J.M.D. Coey, R. Schaefer et al., Phys. Rev. Materials **2**, 014412 (2018).

Коллективная динамика однокомпонентной плазмы

<u>А.В. Мокшин</u>*, И.И. Файрушин

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия *E-mail: anatolii.mokshin@mail.ru

Однокомпонентная плазма представляет собой наиболее подходящую многочастичную систему для развития микроскопической теории жидкости. Обусловлено это, главным образом, специфическим потенциалом межчастичного взаимодействия, а также достаточно большим массивом доступных экспериментальных данных и результатов молекулярно-динамического счета, которые могут быть использованы для проверки корректности теоретических выводов [1–4].

В настоящей работе будет представлена микроскопическая теория коллективной динамики частиц (ионов) однокомпонентной плазмы, где в качестве входных параметров используются лишь потенциал взаимодействия – потенциал Юкавы – и структурные характеристики – функция парного распределения частиц и структурный фактор. Будет показано, что микроскопическая теория реализуется на широком диапазоне волновых векторов, обобщает гидродинамическую теорию и воспроизводит известные гидродинамические выражения в длинноволновом пределе. Теория корректно воспроизводит все известные особенности спектров динамического структурного фактора для широкого диапазона волновых чисел, а также закон дисперсии акустических коллективных возбуждений в однокомпонентной плазме. Полученные теоретические результаты сопоставляются с результатами известных теоретических моделей и подходов.

Работа поддержана РФФИ (проект № 18-02-00407).

- 1. Z. Donko, G.J. Kalman and P. Hartmann, J. Phys.: Condens. Matter 21, 413101 (2008).
- 2. Yu.V. Arkhipov et al., Phys. Rev. Lett. 119, 045001 (2017).
- 3. J. Ortner, Physica Scripta T, 69 (2000).
- 4. F. Graziani et al., Frontiers and Challenges in Warm Dense Matter, Springer International Publishing, Switzerland (2014).
- 5. A.V. Mokshin and B.N. Galimzyanov, J. Phys.: Condens. Matter 30, 085102 (2018).

Сценарии плавления двумерных систем с ограниченными деформируемыми потенциалами

<u>В.Н. Рыжов</u>*, Е.А. Гайдук, Ю.Д. Фомин, Е.Н. Циок

Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Россия *E-mail: ryzhov@hppi.troitsk.ru

После появления теории фазовых переходов в двумерных вырожденных системах – теории Березинского–Костерлица–Таулеса (БКТ) [1–3] – мощное развитие получили теории двумерного плавления. Как известно, в случае трех измерений плавление всегда происходит посредством перехода первого рода. В то же время в случае двух измерений ситуация гораздо более сложная. В настоящее время можно говорить, по крайней мере, о трех возможных сценариях плавления. Прежде всего, это теория Березинского–Костерлица–Таулеса–Хальперина–Нельсона–Янга (ВКТНNY) [3–5], в которой был предложен нестандартный сценарий плавления двумерных кристаллов посредством двух непрерывных переходов с промежуточной гексатической фазой. При этом фазовый переход первого рода также может реализоваться [6]. Кроме того, сравнительно недавно был предложен еще один сценарий плавления, в рамках которого плавление также может происходить посредством двух переходов, однако при этом переход твердое тело – гексатическая фаза происходит посредством непрерывного перехода перехода первого перехода переход переход переход переход в с дама проиходит посредством непрерывного перехода переход переход переход переход переход облазваться [6]. Кроме того, сравнительно недавно был предложен еще один сценарий плавления, в рамках которого плавление также может происходить посредством двух переходов, однако при этом переход твердое тело – гексатическая фаза – изотропная жидкость – посредством перехода первого рода [7–14].

В докладе проанализированы различные сценарии плавления двумерных систем, а также подробно обсуждаются результаты молекулярно-динамического исследования фазовой диаграммы и сценариев плавления двумерных сфер Герца, служащих для описания свойств систем с деформируемыми потенциалами (коллоидов, звездообразных полимеров, глобул и т.д.) [15–16]. Показано, что в зависимости от параметров потенциала в системе существует большой набор различных кристаллических фаз, включая додекагональный квазикристалл, максимумы и минимумы на кривой плавления, водоподобные аномалии. При этом в зависимости от положения на фазовой диаграмме плавление системы происходит в соответствии с различными сценариями, включающими все три упомянутых выше сценария. В частности, оказалось, что, несмотря на двухстадийное плавление, теплоемкость имеет один максимум, который соответствует переходу из кристалла в гексатическую фазу.

Работа поддержана грантом РНФ № 19-12-00092.

- 1. В.Л. Березинский, ЖЭТФ **59**, 907 (1970).
- 2. J.M. Kosterlitz, D.J. Thouless, J. Phys. C 6, 1181 (1973).
- 3. В.Н. Рыжов, Е.Е. Тареева, Ю.Д. Фомин, Е.Н. Циок, УФН 187, 921 (2017).
- 4. D.R. Nelson, B.I. Halperin, Phys. Rev. B 19, 2457 (1979).
- 5. A.P. Young, Phys. Rev. B 19, 1855 (1979).
- 6. В.Н. Рыжов, ЖЭТФ **100**, 1627 (1991).
- 7. E.P. Bernard and W. Krauth, Phys. Rev. Lett. 107, 155704 (2011).
- 8. S.C. Kapfer and W. Krauth, Phys. Rev. Lett. 114, 035702 (2015).
- 9. E.N. Tsiok, D.E. Dudalov, Yu.D. Fomin, and V.N. Ryzhov, Phys. Rev. E 92, 032110 (2015).
- 10. E.N. Tsiok, Y.D. Fomin, V.N. Ryzhov, Physica A 490, 819 (2018).
- 11. D.E. Dudalov, Yu.D. Fomin, E.N. Tsiok, V.N. Ryzhov, Soft Matter 10, 4966 (2014).
- 12. D.E. Dudalov, Yu.D. Fomin, E.N. Tsiok, V.N. Ryzhov, J. Chem. Phys. 141, 18C522 (2014).
- 13. N.P. Kryuchkov, S.O. Yurchenko, Y.D. Fomin, E.N. Tsiok, V.N. Ryzhov, Soft Matter 14, 2152 (2018).
- 14. E.A. Gaiduk, Y.D. Fomin, E.N. Tsiok, V.N. Ryzhov, Molecular Physics 117, 29109 (2019).
- 15. Y.D. Fomin, E.A. Gaiduk, E.N. Tsiok, V.N. Ryzhov, Molecular Physics 116, 3258 (2018).
- 16. E.A. Gaiduk, Y.D. Fomin, E.N. Tsiok, V.N. Ryzhov, arXiv:1911.06086.

Структура и динамика решетки $R_2Ge_2O_7$ (R = Tb – Lu, Y): ab initio расчет

<u>В.С. Рюмшин</u>*, В.А. Чернышев

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия *E-mail: krios_two@mail.ru

Германаты с редкоземельной подрешеткой $R_2Ge_2O_7$ (R = Tb - Lu, Y) привлекают внимание исследователей своими структурными, оптическими и магнитными свойствами [1–3]. Они кристаллизуются в разных структурных типах [4]. Их кристаллическая структура изучена экспериментально [1], однако фононный спектр измерен только для $Y_2Ge_2O_7$ [5]. Для всего остального ряда нет ни расчета, ни эксперимента как по фононному спектру, так и по упругим постоянным. Представляется актуальным первопринципное исследование структуры и динамики решетки, а также упругих свойств $R_2Ge_2O_7$.

Расчеты были проведены в рамках теории функционала плотности и МО ЛКАО подхода с использованием гибридного функционала PBE0, учитывающего как локальный, так и нелокальный (в формализме Хартри-Фока) обмен. Для расчетов была использована программа CRYSTAL17 [6], предназначенная для моделирования периодических структур в рамках МО ЛКАО подхода.

Для описания внутренних оболочек редкоземельных ионов и Y использовались псевдопотенциалы, замещающие внутренние электроны по 4f включительно. Внешние оболочки редкоземельного иона и Y, участвующие в химической связи, описывались валентным базисным набором. Для ионов Ge и O были использованы полноэлектронные базисные наборы.

Был проведен расчет кристаллической структуры. Впервые были рассчитаны фононные спектры в Γ точке для $R_2Ge_2O_7$ (R = Tb - Lu), интенсивности ИК и КР мод, а также упругие постоянные. Из анализа векторов смещений определена степень участия ионов в каждой моде. Построена зависимость модуля Юнга от направления в кристалле.

Показано, что в рамках теории функционала плотности с использованием гибридного функционала PBE0 удается адекватно воспроизвести структуру и динамику решетки $R_2Ge_2O_7$ (R = Tb - Lu, Y). Результаты расчета фононных спектров могут быть использованы для интерпретации ИК и КР экспериментов изоструктурных соединений.

Работа была выполнена при поддержке Министерства Образования и Науки Российской Федерации (проект № 3.9534.2017/8.9).

1. L.T. Denisova et al., Inorganic Materials 55, 952 (2019).

2. D.M. Moran et al., Journal of alloys and compounds 180, 171 (1992).

- 3. L.D. Sanjeewa et al., Inorganic chemistry 57, 12456 (2018).
- 4. G. Bocquillon et al., The Rare Earths in Modern Science and Technology 209 (1980).
- 5. R. Saez-Puche et al., Journal of alloys and compounds 184, 25 (1992).

6. R. Dovesi et al., Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science 8, e1360 (2018).

Высокопроводящее состояние и ферромагнетизм в квазиодномерных системах

Л.М. Свирская

Южно-Уральский государственный гуманитарно-педагогический университет, Челябинск, Россия E-mail: svirskayalm@mail.ru

Скачкообразный переход из диэлектрического в высокопроводящее состояние, возникающий под влиянием внешних воздействий (давления, температуры, изменения плотности) в системах с пониженной размерностью, можно рассматривать как результат отключения взаимодействия токоносителей с элементарными возбуждениями [1-3]. В случае, когда соседние спины связаны гейзенберговским взаимодействием вида:

$$H = -2I \sum_{n} \overrightarrow{S}_{n} \overrightarrow{S}_{n+1}, \tag{1}$$

дисперсионный закон для спиновых волн в одномерной решетке

$$E = 4IS\left(1 - \cos ka\right) \tag{2}$$

приводит к условиям невозможности излучения ферромагнона зонным электроном:

$$v_{\rm max,e} > v_{\rm max,magn}, \ m_{0,e}^* < m_{0,\rm magn}^*,$$
 (3)

$$\Delta_e > \Delta_{\text{magn}}.$$
(4)

При этом максимальная скорость, эффективная масса и ширина энергетической зоны ферромагнона зависят от произведения обменного интеграла I и величины спина S в узле кристаллической решетки:

$$v_{\max, magn} = \frac{4aIS}{\hbar}, \ m_{0, magn}^* = \frac{\hbar^2}{4a^2 IS},$$
 (5)

$$\Delta_{\text{magn}} = 8IS. \tag{6}$$

В случае достаточно узкой энергетической зоны электрона, когда излучение зонного фонона невозможно ($\Delta_e < \Delta_{ph}$), что способствует установлению состояния высокой проводимости (СВП), излучение зонного ферромагнона может, согласно (4), оказаться возможным. Это может привести к соответствующему магнонному вкладу в электропроводность и препятствовать возникновению СВП. Для перехода в СВП благоприятна ширина энергетической зоны электрона, удовлетворяющая условию:

$$\Delta_{\rm magn} < \Delta_{\rm e} < \Delta_{\rm ph},$$
 (7)

при котором невозможно излучение ни зонного фонона, ни зонного ферромагнона.

Из (6) и (7) следует, что для сосуществования СВП и ферромагнетизма благоприятны достаточно малые значения произведения IS, а при данном спине S – достаточно малые значения обменного интеграла. Здесь имеется аналогия с возможностью сосуществования сверхпроводимости и ферромагнетизма [4] при достаточно малых значениях *I*.

Экспериментально наблюдаемый эффект переключения в СВП в квазиодномерных системах с ферромагнитным порядком [5] может быть обусловлен (в отличие от предположения Огга [6]) образованием триплетных электронных пар, так же, как в случае сосуществования сверхпроводимости и ферромагнетизма [7].

- 1. С.В. Вонсовский, М.С. Свирский, Л.М. Свирская, ФММ 73, 36 (1992).
- С. В. Бонсовский, М.С. Свирский, т.М. Свирскай, ФИИ 73, 50 (1952).
 S.V. Vonsovsky, M.S. Svirsky, J. magn. magn. mater 116, 21 (1992).
 Л.М. Свирская, Вестник ЮУрГУ, серия «Математика, механика, физика» 6, 1091 (2012).
 С.В. Вонсовский, М.С. Свирский, ДАН СССР 122, 204 (1958).
 С.Г. Смирнова, О.В. Демичева, Л.Н. Григоров, Письма в ЖЭТФ 48, 212 (1988).

- 6. R.A. Ogg, Phys. Rev. **69**, 243 (1946). 7. С.В. Вонсовский, М.С. Свирский, ЖЭТФ **46**, 1619 (1964).

Thermodynamic and magnetic properties of one-dimensional decorated chain in Ising model

E.S. Tsuvarev^{1*}, F.A. Kassan-Ogly², A.I. Proshkin^{1,2}

¹Ural federal university, Ekaterinburg, Russia ²Mikheev institute of metal physics UB RAS, Ekaterinburg, Russia *E-mail: eguny@mail.ru

The one-dimensional decorated Ising chain in the magnetic field is considered. The Hamiltonian of this lattice is represented in following form:

$$\mathcal{H}(s) = -J_d \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - J \sum_{j=1,d+2,\dots}^N s_j s_{j+d+1} - H \sum_{i=1}^N s_i,$$
(1)

where J_d is the nearest-neighbour interaction between decorated spin and nodal spin as well as between decorated spins, J is the exchange interaction between nodal spins only, H is an external magnetic field. The index d denotes the number of the so-called decorations [1] of chain.

Figure 1 illustrates the lattice of spins corresponding to linear decorated chain described by Hamiltonian (1). Red circles are associated with decorated spins and blue circles with nodal spins. Each spin has two states $s = \pm 1$.



РИС. 1. The linear decorated chain with the nearest-neighbour exchange interaction J_d and the exchange interaction J.

In the considered method of transfer matrix invented by Kramers and Wannier [2] all thermodynamic and magnetic quantities of the model are expressed only through its largest eigenvalue λ_{max} . Moreover, in this work unlike the usual Kramers-Wannier method, the transfer matrix is generalized [3] to an arbitrary number of translation of a linear chain.

However, taking into account that the first sum and the third sum in the Hamiltonian (1) runs through all spins of the lattice, and the second sum runs through the nodal spins only, the partition function in the thermodynamic limit ($N \rightarrow \infty$) takes the form:

$$Z_N = \lambda_{\max}^{N/(d+1)}.$$
(2)

It is curious that if *d* tends to infinity, then this task reduces to the Ising's problem [4] since with an increase in the number of decoration the contribution to energy from nodal spins becomes more and more insignificant.

1. M.E. Fisher, Phys. Rev. 113, 969 (1958).

- 2. H.A. Kramers and G.H. Wannier, Phys. Rev. 60, 252 (1941).
- 3. E.S. Tsuvarev et al., J. Phys.: Conf. Ser. 1389, 012008 (2019).
- 4. E. Ising, Zeitschrift fur Physik 21, 253 (1925).

Новая классификация фазовых переходов, основанная на критических индексах

В.Н. Удодов

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова, Абакан, Россия E-mail: udodov@khsu.ru

Рассмотрена классификация равновесных фазовых переходов (ФП), связанная с критическим индексом теплоемкости α , индексом корреляционной длины и с индексом δ , определяющим форму критической изотермы. Классификация развивает подход Р. Бэкстера, основанный на формуле для рода ФП [1]:

$$r = 2 - \alpha, \tag{1}$$

где α – критический индекс теплоемкости. При этом род ФП является произвольным вещественным числом в некотором интервале, которое может быть измерено экспериментально или рассчитано теоретически. В простых случаях новая классификация дает результаты, совпадающие с классификацией П. Эренфеста. Формула (1) справедлива, только если критическая температура положительна. Если критическая температура равна нулю, то формула принимает вид [2,3]:

$$r = 1 - \alpha. \tag{2}$$

Так как индекс теплоемкости часто является дробным, то мы приходим к понятию ФП дробного рода [2,3]. Например, для трехмерной традиционной модели Изинга [4]:

$$\alpha = \alpha' = 0.125 \pm 0.015,\tag{3}$$

следовательно, род ФП:

$$r = r' = 2 - \alpha = 1.875 \pm 0.015.$$
 (4)

Это значит, что теплоемкость в точке ФП обращается в бесконечность по степенному закону. Для изотропных магнетиков род ФП равен:

$$r = 2 - \alpha = 2.12,$$
 (5)

и теплоемкость, связанная с ФП, стремится к нулю в точке ФП, при этом скачок теплоемкости при ФП равен нулю (теплоемкость является непрерывной функцией температуры), в отличие от обычных ФП 2-го рода по Эренфесту. Аналогичная ситуация с нулевым скачком теплоемкости будет и для сверхтекучего перехода в гелии-4.

Показано, что в задаче связей теории перколяции для одномерных конечных кластеров род ФП может быть отрицательным или равным нулю, и выяснен физический смысл этого.

Можно доказать, что если род ФП даже незначительно выше первого, то будет наблюдаться ФП непрерывного типа с нулевым скачком состояния, когда двухфазное равновесие невозможно. Предложена общая формула для рода ФП, верная, в частности, для нулевой критической температуры.

Рассмотрен ФП при критической температуре при изменении внешнего поля, когда род ФП определяется формулой (*H* – напряженность внешнего поля):

$$r = 1 + \frac{1}{\delta}, \quad H \to 0, \quad T = T_C.$$
 (6)

Определен диапазон изменения рода $\Phi\Pi$ при изменении температуры и поля. Для систем бесконечного размера при изменении температуры (в нулевом поле) род $\Phi\Pi$ заключен в интервале от 1 до $+\infty$. Род $\Phi\Pi$ равен ∞ для одномерной модели Изинга. При критической температуре при изменении поля род $\Phi\Pi$ заключен в интервале от 1 до 4/3 (см. (6)).

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Республики Хакасия в рамках научного проекта № 19-41-190003.

- 1. Р. Бэкстер, Точно решаемые модели в статистической механике, Мир (1985).
- 2. V. Udodov, World Journal of Condensed Matter Physics 5, 2, 55 (2015).
- 3. В.Н. Удодов, ФТТ **57**, 10, 2018 (2015).
- 4. А.З. Паташинский, В.Л. Покровский, Флуктуационная теория фазовых переходов, Наука (1982).

Переход в сверхпроводящее состояние вблизи абсолютного нуля

В.Н. Удодов

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова, Абакан, Россия E-mail: udodov@khsu.ru

Известно, что из фазовой диаграммы сверхпроводников следует существование равновесного фазового перехода второго рода (ФП 2-го рода) в нулевом магнитном поле и ФП 1-го рода в ненулевом магнитном поле [1]. Однако осталось неясным, что будет при температуре, стремящейся к абсолютному нулю. Ниже показано, что при низких температурах сверхпроводящие переходы могут быть третьего, четвертого (и более высокого), а также дробного рода по классификации Р. Бэкстера [2].

Оказывается, в пределе нулевой температуры для скачка второй производной от химического потенциала выполняется формула:

$$\Delta \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_P = -\Delta \left(\frac{\partial^2 \mu}{\partial T^2}\right) \approx (1/(4\pi)) H_C(0) \left(\frac{\partial^2 H_C}{\partial T^2}\right)_P,\tag{1}$$

где $H_C(T)$ – критическое поле. Обычно для нулевой температуры $H_C(0) > 0$ [1], и вторая производная от критического поля по температуре, скорее всего, не равна нулю, тогда вторая производная от химпотенциала будет испытывать конечный скачок, а теплота $\Phi\Pi$, скачки энтропии и объема, как можно показать, равны нулю, то есть наблюдается нетрадиционный $\Phi\Pi$ 2-го рода по Эренфесту [2] с нулевым скачком теплоемкости.

Во многих случаях зависимость критического поля от температуры описывается простой эмпирической формулой [1]:

$$H_C(T) = H_C(0) \left[1 - \left(\frac{T}{T_C}\right)^2 \right],$$
(2)

где $T_C = T_C(H = 0) = T_{C \max}$ – максимальная критическая температура в нулевом поле. Однако в литературе отсутствует обсуждение точности (2). Можно считать, что (2) – начало разложения в ряд по x [3]:

$$x = \left[1 - \left(\frac{T}{T_C}\right)^2\right].$$
(3)

Тогда

$$C = H_C(T) = H_C(0)[x - A_1x^2 + A_2x^3 + A_3x^4...].$$
(4)

Сначала рассмотрим случай, когда отличен от нуля только A_1 , причем $A_1 = +1/2$, тогда при температуре T, стремящейся к нулю, наблюдается $\Phi\Pi$ 4-го рода по Эренфесту или Бэкстеру [3]. Если в (4) ограничиться третьей степенью x, то возможны $\Phi\Pi$ 2, 4-го и 6-го рода. Можно показать, что в рамках подхода Бэкстера при низких температурах род $\Phi\Pi$ в сверхпроводящее состояние может быть любым вещественным числом в интервале от 2 до 6, то есть наблюдается нетрадиционная критическая точка при $T = T_C = 0$. Если температуру $\Phi\Pi$ устремить к максимальной критической, то $x \to 0$ и род $\Phi\Pi$ устремится к двойке в согласии с экспериментальными данными. Полученные результаты, скорее всего, справедливы для сверхпроводников 1-го рода при полном термодинамическом равновесии.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Республики Хакасия в рамках научного проекта № 19-41-190003.

- 1. А.А. Абрикосов, Основы теории металлов, Наука (1987).
- 2. Р. Бэкстер, Точно решаемые модели в статистической механике, Мир (1985).
- 3. В.Н. Удодов, Вестник ХГУ **9**, 5, 3 (2009).

Авторский указатель

Belemuk A.M., 54

Choi Ki-Young, <mark>69</mark> Chtchelkatchev N.M., 54

Efetov K., 11 Evtushinsky D.V., 69

Gavrichkov V.A., 70 Grigoriev P.D., 42

Igoshev P.A., 53 Irkhin V.Yu., 53

Kassan-Ogly F.A., 91 Katsnelson M., 13 Kim T.K., 69 Kugel K.I., 54

Mikheyenkov A.V., 54 Mogilyuk T.I., 42 Mukhin S.I., 43

Nekrasov I.A., 69

Ovchinnikov S.G., 70

Pavlov N.S., 69 Polukeev S.I., 70 Proshkin A.I., 91

Seidov S.S., 43

Tretiakov O.A., 35 Tsuvarev E.S., 91

Volovik G.E., 9

Yaresko A., 69

Агзамова П.А., 59 Аксенов С.В., 74 Арифуллин М.Р., 60 Арсеев П.И., 36 Архипов А.А., 59 Астрецов Г.В., 18 Бабаев А.Б., 80 Барабанов А.Ф., 30 Бегунович Л.В., 27 Бердинский В.Л., 60 Билинский Ю.М., 36

Болдырева М.М., 82 Борзилов В.О., <mark>82</mark> Борисов А.Б., 23 Вальков В.В., <mark>30, 51</mark> Васин М.Г., 76, 83 Верховский С.В., 61 Волкова З.Н., <mark>61</mark> Выборова В.В., 73 Гавико В.С., **68** Гайдук Е.А., 88 Галимзянов Б.Н., 62 Геращенко А.П., 61 Гермов А.Ю., 61, 68 Глазов М.М., 10, 20 Горностырев Ю.Н., 86 Гудин С.А., **24** Дзебисашвили Д.М., 30 Дякин В.В., **38**, **39** Евсин Д.В., <mark>82</mark> Ермаков А.Е., <mark>68</mark> Зарубин А.В., 84 Захаров В.Е., 12 Злотников А.О., 52 Зотова М.В., 63 Зубарев Н.М., 85 Иванов А.А., 46 Игошев П.А., 56 Каган М.Ю., 14 Каманцев А.П., 65 Кассан-Оглы Ф.А., 77, 84 Кирчанов В.С., 25, 64 Кокорина Е.Е., 26 Коледов В.В., **65** Колесов К., 65 Конев А.С., <mark>68</mark> Конев В.В., 44, 47 Коровушкин М.М., 30 Коршунов М.М., 27, 48 Кочурин Е.А., **85** Кугель К.И., 14 Кудряшова О.В., 38, 39 Кузнецов А.Р., 86 Лихтенштейн А.И., 15 Ляпилин И.И., 28 Лях А.С., <mark>81</mark> Макаров И.А., 66 Максимов П.А., 29, 40 Маширов А.В., **65** Медведев М.В., 26

Мельников А.С., 16 Меньшенин В.В., 41, 78 Метлов К.Л., 79 Миронов Г.И., 67 Михалев К.Н., 61, 68 Мицкан В.А., **30** Мокшин А.В., 62, 71, 87 Москвин А.С., 31, 33, 47 Муртазаев А.К., 80 Некрасов И.А., 26, 56 Николаев С.В., 32, 63 Новокшонов С.Г., 57 Овчинников С.Г., 32, 63, 66 Орлов Ю.С., **32** Павлов Н.С., 26, 56 Панов Ю.Д., 31, 33, 44, 47, 49 Петров А.В., 65 Петухова О.Е., 46 Попов М.Р., 46 Прокопьев Д.А., 68 Прошкин А.И., 77, 84 Прудников В.В., 81, 82 Прудников П.В., 81, 82 Раевский В.Я., 38, 39 Рахманов А.Л., 14 Рожков А.В., 14 Рорингер Г., 18 Рубаков В.А., 17 Рубцов А.Н., 18, 73 Рыбаков Ф.Н., 23 Рыжов В.Н., <mark>88</mark> Рюмшин В.С., <mark>89</mark> Садовский М.В., 34 Сбойчаков А.О., 14 Свирская Л.М., 90 Солин Н.И., 24 Стрельцов С.В., 19 Сурис Р.А., 20 Суслов Д.С., 65 Таскаев С.В., 65 Терентьев Ю.А., 65 Тогушова Ю.Н., 27 Удодов В.Н., 92, 94 Уймин М.А., <mark>68</mark> Улитко В.А., 33, 44, 47, 49 Файрушин И.И., 87 Фомин Ю.Д., <mark>88</mark> Хомский Д.И., 19 Хуснутдинов Р.М., 71 Циберкин К.Б., 45 Циок Е.Н., 88 Чарикова Т.Б., 46

Чащин Н.И., 72 Чернышев В.А., 59, 89 Черткова А.С., 73 Чиков А.А., 44, 47 Шавров В.Г., 58, 65 Шелушинина Н.Г., 46 Шестаков В.А., 48 Шляпников Г.В., 21 Шмаков И.Г., 86 Шнейдер Е.И., 63 Шустин М.С., 74 Ясинская Д.Н., 33, 49



Международная зимняя школа физиков-теоретиков

«КОУРОВКА-ХХХVIII»

23 – 29 февраля 2020 г.

Тезисы докладов

Ответственный за выпуск — В.В. Меньшенин Компьютерная вёрстка — З.Н. Волкова Обложка — П.А. Агзамова

Орфография, а также оформление рисунков соответствуют качеству предоставленных оригиналов

Формат 70×108/16

Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН 620108, г. Екатеринбург, ул. С.Ковалевской, 18