

**XIII Сибирский семинар
по высокотемпературной сверхпроводимости
и физике наноструктур**



**Сборник
ТЕЗИСОВ**

г. Новосибирск, 2021

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирский государственный университет
Новосибирский государственный технический университет
Сибирский федеральный университет
Институт физики им. Л.В.Киренского СО РАН
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского
Научный совет РАН по проблеме «Физика низких температур»

ХIII Сибирский семинар по высокотемпературной сверхпроводимости и физике наноструктур ОКНО-2021

24 – 25 мая 2021 года

Новосибирск

Сборник тезисов докладов

Новосибирск, 2021

УДК 538.945+ 538.955+ 538.91+ 538.935+ 537.9

Сборник тезисов докладов XIII Сибирского семинара по высокотемпературной сверхпроводимости и физике наноструктур ОКНО-2021 / Ответственный за выпуск к.ф.-м.н. Е.Н. Ткачев. Новосибирск: ИНХ СО РАН, 2021, 51 с. Тираж – 100 экз.

Сборник содержит тезисы докладов молодых учёных, приглашённых и ключевых докладчиков, представленных на XIII Сибирском семинаре по высокотемпературной сверхпроводимости и физике наноструктур ОКНО-2021, организованном совместно ИНХ СО РАН, НГУ, НГТУ, СФУ, ИФ СО РАН, ОмГУ и Научным советом РАН по проблеме «Физика низких температур» (24-25 мая 2021 г.).

Материалы семинара содержат в краткой форме результаты исследований различных научных школ России. Тематика семинара объединяет фундаментальные и прикладные проблемы, связанные со сверхпроводящими материалами (включая наноструктуры), природой сверхпроводимости, физикой наноструктур, магнитных плёнок и спинтроникой.

Приглашённые и ключевые доклады представлены руководителями ведущих научных групп и отражают самые современные исследования сверхпроводимости и физики наноструктур в России. Устные доклады представлены молодыми учёными, аспирантами и студентами государственных университетов и институтов РАН.

Тезисы докладов представлены в авторской редакции.

Организационный комитет

Сопредседатели: к.т.н. В.А. Кузнецов, ИНХ СО РАН, НГТУ
д.ф.-м.н., профессор С.Г. Овчинников, ИФ СО РАН, СФУ
д.ф.-м.н., профессор П.В. Прудников, ОмГУ
Учёный секретарь: к.ф.-м.н. Е.Н. Ткачев, ИНХ СО РАН

Программный комитет

д.ф.-м.н., доцент А.Н. Вакилов, ОмГУ
к.т.н. В.А. Кузнецов, ИНХ СО РАН, НГТУ
к.ф.-м.н. А.Н. Лавров, ИНХ СО РАН
д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН И.А. Некрасов, ИЭФ УрО РАН
д.ф.-м.н., профессор С.Г. Овчинников, ИФ СО РАН, СФУ
д.ф.-м.н., профессор В.В. Прудников, ОмГУ
д.ф.-м.н., профессор П.В. Прудников, ОмГУ

ISBN 978-5-90168-835-9

© Федеральное государственное
бюджетное учреждение науки
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН, 2021

Топология кристаллической решетки и электронные корреляции в кобальтатах

А. Н. Лавров

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090
lavrov@niic.nsc.ru

Соединения с сильными электронными корреляциями, берущие начало от моттовских изоляторов, привлекают внимание целым рядом необычных и полезных физических свойств, простирающихся от высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) и колоссального магнетосопротивления до мультиферроидного поведения и нестандартных термоэлектрических характеристик. Движение носителей заряда в сильно-коррелированных системах (СКС) является крайне сложным процессом, поскольку корреляции не позволяют электронам в частично заполненных зонах формировать обычные металлических состояния и заставляют их самоорганизовываться в различные зарядовые, спиновые и орбитальные сверхструктуры. Как правило, заряд- и спин-упорядоченные состояния в СКС являются изоляторами. Электрическая проводимость появляются только в том случае, когда некоторая фрустрация вносится в зарядовое и/или спиновое упорядочение, вызывая «плавление» порядка. Наиболее известный способ внесения фрустрации – зарядовое допирование, вызывающее, в частности, преобразование АФМ диэлектрических купратов в ВТСП и переход изолятор-металл в манганатах, происходящий совместно с плавлением зарядового и/или АФМ порядка.

Один из интригующих источников фрустрации – геометрическая магнитная фрустрация, которая является неотъемлемым свойством треугольных решеток с АФМ типом обмена. Удобным полигоном для исследования роли геометрической фрустрации являются слоистые кобальтаты (Рисунок 1), которые могут быть образованы плоскостями CoO_2 как с квадратной решеткой (слоистые перовскиты, такие как $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_4$ и $\text{R}\text{BaCo}_2\text{O}_{5+x}$), так и с треугольной решеткой (Na_xCoO_2 , $\text{R}\text{BaCo}_4\text{O}_{7+x}$).

В данном докладе будет дан сравнительный анализ магнитных и электрон-транспортных свойств слоистых кобальтатов с различной топологией кристаллической решетки.

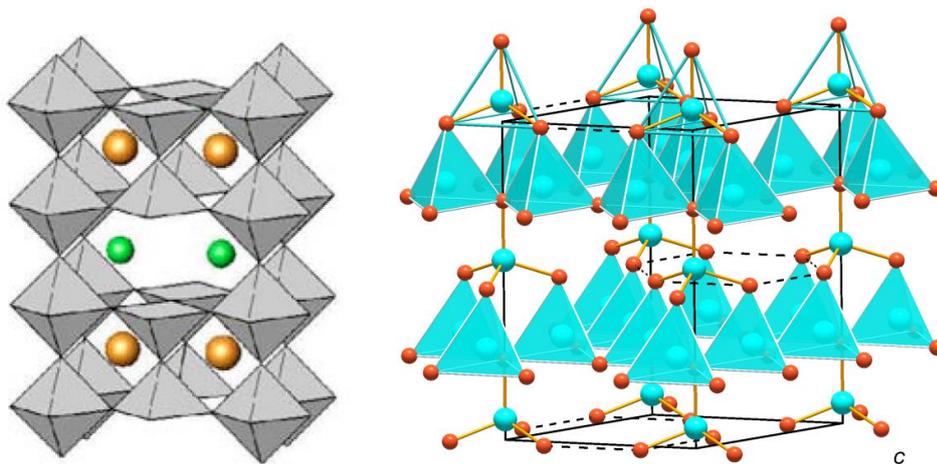


Рисунок 1 – Кобальтаты с перовскитоподобной структурой $\text{R}\text{BaCo}_2\text{O}_{5+x}$ (а) и структурой сведенборгита $\text{R}\text{BaCo}_4\text{O}_{7+x}$ (б). На рисунке (б) показаны только ионы кобальта и кислорода

Размерные эффекты в сверхизоляторе

А. Ю. Миронов

¹Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 13, Новосибирск, 630090
mironov@isp.nsc.ru

В данной работе представлены результаты исследования низкотемпературных линейных и нелинейных транспортных свойств неупорядоченных нитей NbTiN толщиной 8 - 10 нм, длиной 0,22 - 2,4 мм и шириной 100 нм - 50 мкм [1] на основе сверхизолирующих пленок NbTiN. [2]. Мы демонстрируем, что как пороговое напряжение, характеризующее низкотемпературную сверхизолирующую фазу, так и характерное для сверхизолятора поведение температурной зависимости сопротивления в окрестности критической температуры Березинского-Костерлица-Таулесса, исчезают при увеличении беспорядка, уводящем систему от границы перехода сверхпроводник-изолятор по беспорядку (SIT). Мы обнаружили, что уменьшение эффективного размера системы подавляют как ее изолирующие, так и сверхизолирующие свойства. Результатом такого подавления, проявляющийся в температурных зависимостях сопротивления, показан на рис. 1а. Более того, пороговое напряжение линейно уменьшается с уменьшением размера системы (см. рис. 1б), что свидетельствует о крайне однородном распределении электрического поля в системе. При этом, при уменьшении длины системы происходит размытие порогового перехода из сверхизолирующей в проводящую фазу, аналогичное размытию перехода Березинского-Костерлица-Таулесса в сверхпроводниках при уменьшении ширины системы.

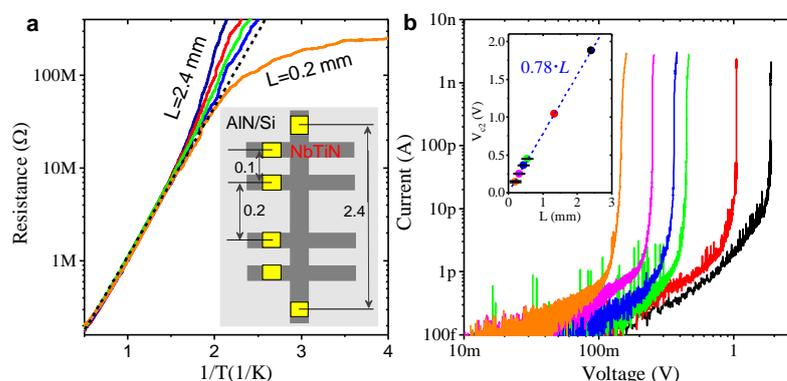


Рис. 1: (а) температурная зависимость сопротивления. (б) Вольт-амперные зависимости пленки толщиной 10 нм. Вставить Зависимость порогового напряжения от размера.

Работа была поддержана грантом РФФ № 18-72-10056.

- [1] M. V. Burdastyh, S. V. Postolova, I. A. Derbezov, A. V. Gaisler, M. C. Diamantini, C. A. Trugenberger, V. M. Vinokur, A. Yu. Mironov, JETP Letters, **2019**, 109(12), 795–798.
[2] A. Yu. Mironov, D. M. Silevitch, T. Proslie, S. V. Postolova, M. V. Burdastyh, A. K. Gutakovskii, T. F. Rosenbaum, V. M. Vinokur & T. I. Baturina, Scientific Reports, **2018**, 8, 4082.

Разработка перспективных ВТСП проводников для применения в магнитных системах УТС

В. В. Гурьев^{1,2}, В. С. Круглов¹, И. В. Куликов¹, В. Е. Крылов¹, П. А. Лукьянов²,
А. В. Овчаров¹, Д. Н. Раков², В. В. Сычугов¹, С. В. Шавкин¹

¹*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
пл. Академика Курчатова, 1, Москва, 123182*

²*АО ВНИИНМ им. А.А. Бочвара*

ул. Рогова, 5а, Москва, 123098

Gurev_VV@nrcki.ru

В электромагнитных системах будущих проектов в области управляемого термоядерного синтеза предполагается использовать кабели, изготовленные из лент на основе высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП). В мире ведутся интенсивный поиск технологических решений по изготовлению ВТСП проводников, удовлетворяющих высоким требованиям к токонесущей способности и прочностным характеристикам в сильном магнитном поле.

В настоящей работе представлены результаты электрофизических исследований серий образцов ВТСП проводников, изготовленных в НИЦ «Курчатовский институт» на основе мишеней различного химического состава, включающих как стехиометрические мишени $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ (где Re обозначает Y, Gd, Sm, Eu, Dy или их комбинацию) так и нестехиометрическую систему YBCO, имеющее соотношение катионов, отличное от стандартного. Все мишени были изготовлены в АО «ВНИИНМ». Эпитаксиальное осаждение сверхпроводящего слоя проводилось методом импульсного лазерного осаждения (PLD) на предварительно подготовленные подложки на основе нержавеющей стали с текстурированными слоями YSZ и CeO_2 . Для каждого типа мишени подбирался свой оптимальный режим осаждения.

Испытания токонесущей способности проводили транспортным методом в жидком азоте (температура 77К, внешнее поле до 1.5 Тл) и в жидком гелии (температура 4.2 К, внешнее поле до 12 Тл) при двух ориентациях магнитного поля: по нормали к ленте и в плоскости ленты.

Установлено, что для всех образцов, при достижении некоторой пороговой толщины, величина критического тока выходит на насыщение, что связано с ухудшением качества текстуры. Это пороговое значение различно для различных химических составов и увеличивается в ряду $\text{Y} \rightarrow \text{Dy} \rightarrow \text{Eu} \rightarrow \text{Gd} \rightarrow \text{Sm}$.

Обнаружена обратная корреляция между величиной критического тока, измеренным при азотной температуре и при гелиевой температуре.

Показано, что использование мишеней нестехиометрического состава позволяет добиваться рекордных критических токов при гелиевых температурах, что, обусловлено появлением частиц Y_2O_3 выступающих в роли центров пиннинга.

Электронная структура аналога железного сверхпроводника BaCo_2P_2

Н. С. Павлов¹, И. А. Некрасов¹, Д. В. Евтушинский²

¹Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²Institute of Physics, Ecole Polytechnique Federale Lausanne, Lausanne, Switzerland
pavlovns@gmail.com

На сегодняшний день синтезировано достаточно много различных классов сверхпроводящих систем. Одним из них является класс сверхпроводящих соединений, содержащих FeAs [1] или FeSe [2]. В данной работе исследована электронная структура аналога железного сверхпроводника BaCo_2P_2 . Теоретическое моделирование электронной структуры BaCo_2P_2 производилось в рамках теории функционала электронной плотности (LDA). Для учёта корреляционных эффектов на Co-3d состояниях дополнительно к LDA использовался метод решения модели Хаббарда в рамках теории динамического среднего поля (DMFT) [3] – LDA+DMFT [4]. Экспериментально данное соединение исследовано с помощью фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) [5] в широком диапазоне энергий связи.

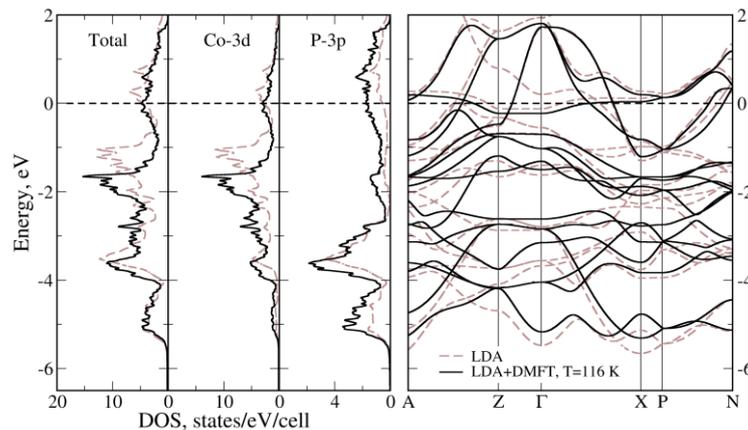


Рисунок 1 – Плотность состояний (слева) полная и парциальная для Co-3d и P-3p состояний. Зонная структура (справа). LDA (серый пунктир) и LDA+DMFT (черные сплошные линии). Ноль соответствует уровню Ферми

Результаты расчётов приведены на Рисунке 1. Параметры взаимодействия модели Хаббарда составляли $U=4,0$ эВ, $J=0,85$ эВ. На уровне Ферми есть небольшое смещение LDA+DMFT квазичастичных зон за счёт электронных корреляций. Эффективная масса Co-3d состояний на уровне Ферми составила ($m^*/m \sim 1,2-1,4$). Заметное влияние электронных корреляций – смещение основного пика в плотности Co-3d состояний с 1 до 1,7 эВ. Это отличает BaCo_2P_2 от сверхпроводников на основе FeAs, где за счёт корреляций происходит общее сжатие зонной структуры Fe-3d состояний ($m^*/m \sim 3$) и приближение основных пиков ближе к уровню Ферми.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ № 20-02-00011.

- [1] A. V. Kaiser, V. Skakalova. *Chem. Soc. Rev.*, **2011**, 40, 3786.
- [1] М. В. Садовский. *УФН*, **2008**, 178, 1243.
- [2] М. В. Садовский. *УФН*, **2016**, 186, 1035.
- [3] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.*, **1996**, 68, 13.
- [4] G. Kotliar et al., *Rev. Mod. Phys.*, **2006**, 78, 865.
- [5] A. Damascelli, Z. Hussain, Zh.-X. Shen, *Rev. Mod. Phys.*, **2003**, 75, 473.

Влияние рассеяния на немагнитных примесях на лондоновскую глубину проникновения в сверхпроводящих соединениях железа

В. А. Шестаков, М. М. Коршунов

Институт физики им. Л. В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН,
ул. Академгородок, 50/38, Красноярск, 660036
v_shestakov@iph.krasn.ru

Теоретические расчёты [1-4] показывают, что при рассмотрении сверхпроводимости соединений на основе железа в рамках спин-флуктуационного механизма внесение немагнитных примесей в систему может приводить к переходу из сверхпроводящего состоянием с s_{\pm} параметром порядка в s_{++} состояние. Данный переход заключается в том, что при увеличении интенсивности рассеяния на примесях Γ , пропорциональной концентрации примесей, параметр порядка в одной из зон меняет знак, в то время как в пределах другой зоны параметр порядка сохраняет свой знак.

Расчёты лондоновской глубины проникновения $\lambda_L(T, \Gamma)$ в двухзонной модели сверхпроводящих соединений железа с немагнитными примесями показывают, что поведение $\lambda_L(T, \Gamma)$ при низких температурах ($T < 0.1T_{c0}$) может указывать на наличие перехода между состояниями с s_{\pm} - и s_{++} параметром порядка. А именно, указывают такие особенности, как (i) характер изменения наклона графиков $\Delta\lambda_L(T)$:

$$\Delta\lambda_L(T) = \lambda_L(T) - \lambda_L(0)$$

с введением примесей; (ii) скачок в зависимости $\lambda_L(T=0)$ от концентрации примесей; (iii) изменение характера температурной зависимости плотности сверхтекучей жидкости $\rho_s(T)$:

$$\rho_s(T) = \lambda_L^2(0) / \lambda_L^2(T).$$

Это открывает возможности для экспериментального подтверждения существования рассматриваемого перехода [5].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-90109, 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] D. V. Efremov et al. *Phys. Rev. B*, **2011**, 84, 180512.
- [2] М. М. Коршунов, Ю. Н. Тогушова, О. В. Долгов. *Усп. физ. наук*. **2016**, 186(12), 1315.
- [3] Z. J. Yao. *Phys. Rev. B*, **2012**, 86, 184515.
- [4] H. Chen et al. *Phys. Rev. B*. **2013**, 88, 184509.
- [5] G. Ghignani et al, *Phys. Rev. Lett.* **2018**, 121, 107001.

Удивительная простота электронной структуры сложного сверхпроводящего соединения $W_{20}O_{58}$

А. А. Слободчиков¹, И. А. Некрасов¹, Н. С. Павлов¹, М. М. Коршунов²

¹Институт электрофизики УрО РАН,

ул. Амундсена, 106, Екатеринбург, 620016

²Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН,

Академгородок 50, стр. 38, Красноярск, 660036

slobodchikov@iep.uran.ru

Соединения триоксида вольфрама с нестехиометрией по кислороду WO_{3-x} известны давно, их структура и свойства хорошо изучены [1]. Совсем недавно появилось сообщение об открытии сверхпроводимости в соединении $W_{20}O_{58}$ с $T_c = 80K$ и с $T_c = 94K$ при интеркалировании литием [2]. В системе $W_{20}O_{58}$ 78 атомов в элементарной ячейке, образованной искаженными WO_6 октаэдрами, имеющими либо общую грань, либо общую вершину (рис. 1, слева).

Для расчёта зонной структуры, плотности состояний и поверхности Ферми (ПФ) мы использовали метод DFT/GGA в рамках FP-LAPW, реализованными в пакете Elk [4].

Расчет показал, что, несмотря на большое количество атомов (78!) в элементарной ячейке, основной вклад в состояния вблизи уровня Ферми вносят преимущественно $5d_{xz,yz}$ -состояния атомов вольфрама, расположенные в центрах имеющих общую грань октаэдров, образующих зигзагообразные нити. По этой причине ПФ весьма простая и состоит из пяти двумерных и нескольких квазиодномерных листов [4].

Кроме того, мы исследовали электронную структуру системы $W_{20}O_{58}$ с идеальными октаэдрами WO_6 . С одной стороны идеализация упростила электронную структуру — только 6 зон пересекают уровень Ферми в отличие от 10 для реальной системы. С другой стороны, ПФ идеальной системы содержит трехмерные листы и несколько двумерных — можно сказать, что чем сложнее кристаллическая структура, тем проще ПФ! (рис.1, в центре и справа)

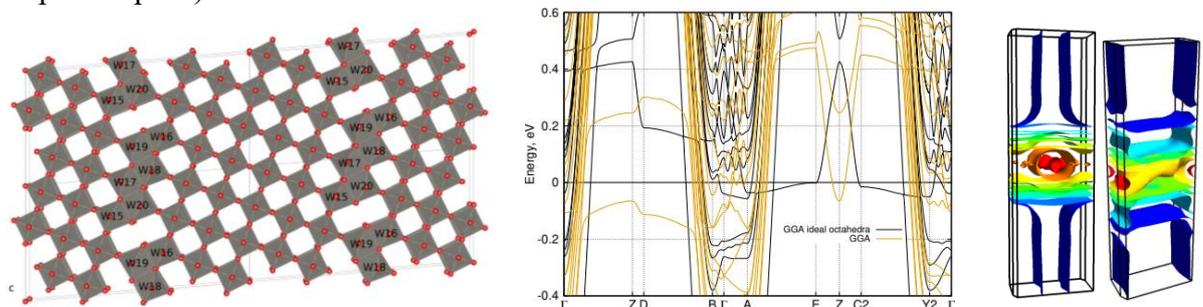


Рисунок 1 – (слева) кристаллическая структура $W_{20}O_{58}$ (суперячейка $2 \times 2 \times 1$); (центр) зонная структура $W_{20}O_{58}$ реального (оранжевые) и с идеальными октаэдрами (черный); (справа) поверхность Ферми реального $W_{20}O_{58}$ и с идеальными октаэдрами.

[1] Bursill, L. Hyde, B. CS families derived from the ReO_3 structure type: An electron microscope study of reduced WO_3 and related pseudobinary systems. *J. Solid State Chem.* **1972**, 4, 430–446.

[2] A. Shengelaya, K. Conder, K. A. Muller, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **2020**, 33, 301.

[3] The Elk Code. Available online: <http://elk.sourceforge.net/>

[4] A.A. Slobodchikov, I.A. Nekrasov, N.S. Pavlov, and M.M. Korshunov, *Nanomaterials* **2021**, 11, 97.

Неравновесное критическое поведение мультислоистых магнитных наноструктур

М. М. Болдырева, П. В. Прудников

Омский государственный университет им Ф. М. Достоевского,
просп. Мира 55а, Омск, 644077
ffi-95@mail.com

Исследования особенностей неравновесного критического поведения мультислоистых магнитных структур могут служить основой для лучшей интерпретации экспериментальных данных [1]. Существует внушительное количество статей направленное на исследования возникновения эффектов старения в различных материалах [2]. Эффекты старения характеризуются замедлением корреляционных и релаксационных процессов с увеличением "возраста" системы, как времени между подготовкой и началом измерения характеристик образца [3].

В данной работе приведены результаты исследования методом Монте-Карло неравновесного поведения магнитной мультислоистой структуры Co/Cu/Co при медленной эволюции системы из неравновесного начального состояния для толщин пленки $N = 7$; 9 монослоев и линейным размером системы $L = 128$.

Расчеты проводились из высокотемпературного начального состояния системы для получения зависимости автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ от времен ожидания, где t_w - это время ожидания, t - время наблюдения.

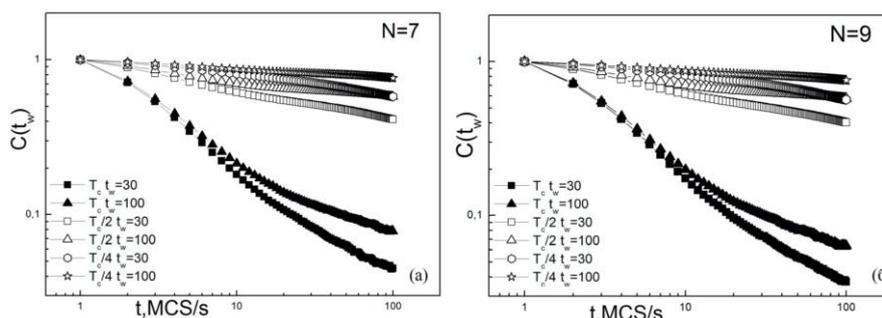


Рисунок 1 – Зависимость $C(t, t_w)$ при $t_w = 30; 50; 100$ при $N = 7$ (а) и $N = 9$ (б). Измерения проводились при критической температуре T_c и при $1/2$ от T_c .

Обнаружено возникновение эффектов старения автокорреляционной функции, т.е. зависимость временного спада корреляционных эффектов от времени ожидания t_w . Выявленные эффекты старения для нашей модели многослойной структуры получены в хорошем согласии с экспериментальными результатами представленными в работе [4].

Работа поддержана грантами РФФИ No 20-32-90226, 20-32-70189, Министерством образования и науки РФ в рамках государственного поручения No 0741-2020-0002, и Совета по грантам Президента РФ NoMD-2229.2020.2 Расчеты проводились с использованием ресурсов, предоставленных Shared Facility Center Data Center ДВО РАН (Хабаровск), Суперкомпьютерный центр МГУ им. М.В. Ломоносова.

- [1] S. S. Parkin S.S. *Nature Nanotechnology*, **2015**, 10. P.195-198.
- [2] C. Chappert, A. Fert, F. Van Dau. *Nature Materials*, **2007**, 6. 813.
- [3] V. V .Prudnikov, P. V. Prudnikov, M. V. Mamonova, M. M. Firstova, A. A. Samoshilova. *J.Phys. Communication*. **2019**, 3. 015002.
- [4] T. Mukherjee, M. Pleimling, C. Binek. *Phys. Rev.* **2010**, 82. 134425.

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

А. Д. Демьяненко, А. С. Лях, В. В. Прудников, П. В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
просп. Мира, 55 а, Омск, 644077
orms11@mail.ru

Трехмерная модель Гейзенберга является одной из традиционных статистических моделей, используемых для описания фазовых переходов в различных спиновых системах. Известно, что поведение систем вблизи температуры фазового перехода второго рода характеризуется медленной динамикой, так как их время релаксации аномально растет с приближением к критической температуре. В результате, такая система при критической температуре не может достичь состояния равновесия в течение всего процесса релаксации. Неравновесное поведение системы демонстрирует в этом случае целый ряд необычных свойств: эффекты старения, память о начальных состояниях и нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы [1].

В работе осуществлено численное Монте-Карло исследование влияния 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 с ростом времени ожидания. Исследование анизотропной модели Гейзенберга выявило, что поведение намагниченности и автокорреляционной функции в долговременном режиме характеризуются критическими показателями трехмерной модели Изинга с более быстрым временным спаданием автокорреляционной функции, чем для изотропной модели. Для анизотропной модели Гейзенберга проведен расчет динамической восприимчивости и флуктуационно-диссипативного отношения при эволюции системы из высокотемпературного начального состояния.

Показано, что присутствие дефектов структуры в изотропной модели при ее эволюции из низкотемпературного начального состояния приводит к аномально сильному замедлению автокорреляционной функции и характеризуется эффектами "сверхстарения", связанными с пиннингом доменных стенок на дефектах. При эволюции из высокотемпературного начального состояния в режиме старения дефекты приводят к усилению эффектов старения, а в долговременном режиме их влияние оказывается несущественным. Для анизотропной модели Гейзенберга присутствие дефектов изменяет характеристики неравновесного поведения как при эволюции из высокотемпературного, так и низкотемпературного начальных состояний: для высокотемпературного начального состояния влияние дефектов характеризуется изменением критических показателей неравновесного поведения со значениями, соответствующими структурно неупорядоченной трехмерной модели Изинга; для низкотемпературного начального состояния выявлено аномально сильное замедление автокорреляционной функции, обусловленное эффектами "сверхстарения".

Работа поддержана РФФИ, проект No.20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и грантом МД-2229.2020.2 Президента РФ.

[1] В.В. Прудников, П.В. Прудников, М.В. Мамонова. *УФН*, **2017**, 187, 817.

Изучение отклика сверхизолятора на высокочастотные импульсы

Д. Е. Дураков^{1,2}, А. Ю. Миронов¹

¹Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 13, Новосибирск, 630090

²Новосибирский государственный университет,
ул. Пирогова, 1, Новосибирск, 630090
d.durakov@g.nsu.ru

В связи с бурным развитием квантовых систем обработки информации (квантовые компьютеры) появился серьезный интерес к детекторам, обладающим высоким быстродействием. Данным требованиям соответствуют сверхпроводниковые детекторы. Но возможно ли создание быстродействующих детекторов на основе сверхизолирующего состояния, которое дуально противоположного сверхпроводящему состоянию, и у которого при подаче напряжения выше порогового будут образовываться области, где будет разрушаться сверхизолирующее состояние, и образовываться импульс тока? Таким образом, целью работы являлось изучение отклика сверхизолирующей плёнки после подачи на неё высокочастотного импульса и нахождение релаксационной ёмкости исследуемого образца.

Для этой цели были взяты две плёнки нитрида ниобия титана толщиной 10 нм, выращенные методом атомарно-слоевого осаждения в Аргонской национальной лаборатории. Сопротивление плёнок в нормальном состоянии отличалось в несколько раз. Общий вид мезоструктур представляет собой холловский мостик. Плёнки были помещены в криостат растворения $^3\text{He}/^4\text{He}$ для осуществления перехода образца в сверхизолирующее состояние. Измерения тока, проходящего через образец, проводились по двухточечной схеме. Ток, протекающий через образец, проходил через усилитель тока и измерялся с помощью осциллографа.

В работе проводилось 4 эксперимента для частот 0.1 кГц, 1 кГц, 10 кГц и 100 кГц. У более высокоомной плёнки пороговое напряжение составляет около 1.8 В. Для неё проводилось по 5 измерений, в которых менялась амплитуда прямоугольного импульса. Максимальное напряжение равнялось 2 В, а минимальное изменялось от 0 до 1.6 В с шагом по 0.4 В. У низкоомной плёнки пороговое напряжение равнялось 174,5 мВ. Для неё проводилось по 4 измерения, в которых менялась амплитуда прямоугольного импульса. Максимальное напряжение равнялось 0,2 В, а минимальное изменялось от 0 до 0,15 В с шагом по 0.05 В. Также проводились эксперименты в которых менялось максимальное напряжение и скважность сигнала. Измерения проводились при температуре 20 мК.

Итак, высокоомный образец имеет два релаксационных процесса. Первый процесс, характеризующийся ёмкостью C_1 , показывает переход образца из сверхизолирующего в нормальное состояние, который осуществляется за 0,1 мкс. Далее наблюдается небольшой рост тока до равновесного значения. Этот рост характеризуется ёмкостью C_2 , которая обратная пропорциональна частоте сигнала. Обе ёмкости почти не зависят от скачка напряжения ΔU . Также была оценена диэлектрическая проницаемость сверхизолятора через ёмкость и геометрические характеристики образца, которая оказывается экстремально большой для всего диапазона частот.

У низкоомного образца была обнаружена задержка сигнала при переходе сверхизолятора в нормальное состояние причём задержка увеличивается при уменьшении максимального напряжения. Также при пропуске сигнала длительностью в 7 мкс образец не успевает на него реагировать.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №18-72-10056.

Неравновесная агрегация структурного беспорядка и формирование когерентных структур дефектов в критической динамике двумерной XY-модели с развитой вихревой неравновесностью

А. П. Попова, И. С. Попов, П. В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
проспект Мира, 55-А, Омск, 644077
anka_omsk@mail.ru

Двумерная XY-модель занимает особое место среди классических спиновых моделей статистической механики [1,2], что связано с существованием в системе топологического фазового перехода Березинского-Костерлица-Таулесса. Введение в систему структурного беспорядка приводит к возникновению пиннинга вихрей на дефектах [2,3]. Влияние замороженного структурного беспорядка исследовалось во многих работах [3]. В работе [4] осуществлено исследование влияния неравновесного отжига структурного беспорядка вихрями в неравновесной критической релаксации двумерной XY-модели. Были выявлены неравновесные кооперативные эффекты взаимодействия дефектов через подсистему вихрей, что приводило к формированию когерентных структур дефектов и агрегации дефектов в кластеры в вихревых ядрах.

В данной работе было осуществлено исследование неравновесного отжига структурного беспорядка вихрями в неравновесной критической релаксации двумерной XY-модели с «обобщенной» моделью структурного беспорядка, с замороженной и отжигаемой частями. Показано, что включение в систему «обобщенного» структурного беспорядка, с замороженной и отжигаемой частями, приводит к модификации неравновесных эффектов агрегации дефектов в кластеры при изменении спиновых концентраций неподвижных C_q и подвижных C_a дефектов структуры. С ростом C_q наблюдается существенное замедление динамики роста кластеров дефектов. При этом процесс неравновесного критического огрубления, связанный с ростом наиболее крупных кластеров дефектов, становится менее выраженным, по сравнению со случаем [4]. Показано, что с ростом C_q наблюдается размывание временной границы между режимами роста полосовых (stripes) когерентных структур и формирования структур типа глыб (clumps), для двумерной XY-модели описанных в работе [4] и наблюдаемых в работах [5,6].

Исследование выполнено при поддержке РФФИ в рамках проектов 20-32-90207 и 20-32-70189, при поддержке грантов Президента России в рамках проектов МК-1333.2020.2, МД-2229.2020.2 и при поддержке Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002). Вычисления производились с задействованием вычислительных ресурсов Центра обработки и хранения научных данных ДВО РАН (г. Хабаровск), Суперкомпьютерного центра МГУ им. Ломоносова (г. Москва), Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН (г. Москва) и Суперкомпьютерного центра РАН (г. Санкт-Петербург).

- [1] S.-K. Ma. Modern theory of critical phenomena. Westview Press, New York, 2000.
- [2] S. E. Korshunov, *Phys. Usp.*, **2006**, 49, 225.
- [3] V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, M. V. Mamonova, *Phys. Usp.*, **2017**, 60, 762.
- [4] I. S. Popov, A. P. Popova, P. V. Prudnikov, *EPL*, **2020**, 128, 26002.
- [5] A. W. Sandvik, S. Daul, et al, *Phys. Rev. Lett.*, **2002**, 89, 247201.
- [6] D. Valdez-Balderas, D. Stroud, *Phys. Rev. B*, **2005**, 72, 214501; *Phys. Rev. B*, **2006**, 74, 174506; *Phys. Rev. B*, **2008**, 77, 014515.

Природа формирования псевдощелевого состояния в ВТСП купратах

В. И. Кузьмин¹, С. В. Николаев², С. Г. Овчинников^{1,2}

¹Институт физики им. Л.В. Киренского, Федеральный исследовательский центр
"Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук".
Академгородок 50/38, Красноярск, 660036

²Сибирский Федеральный Университет, проспект Свободный 79, Красноярск, 660041
sgo@iph.krasn.ru

В докладе приводятся основные свойства фазовой диаграммы ВТСП купратов и обсуждаются свойства самого необычного состояния выше критической температуры T_c сверхпроводящего перехода - псевдощелевого состояния. Это состояние наиболее ярко проявляется в области слабо допированных дырочных купратов выше T_c . В настоящее время накоплен большой объем экспериментальных данных по свойствам этого состояния. Для его объяснения предложено несколько возможных механизмов, однако адекватное их теоретическое описание отсутствует. Изменения псевдощелевого состояния связаны с изменением поверхности Ферми с допированием. Ранее нами была построена теория электронной структуры в обобщенном приближении среднего поля, которая предсказала два перехода Лифшица с изменением топологии поверхности Ферми [1]. Переход Лифшица наблюдается в купратах, однако форма поверхности Ферми оказалась не в виде предсказанных контуров, а в виде арок конечного размера, зависящего от температуры и допирования. Недавно нами было проведено исследование электронной структуры в купратах при различных концентрациях допирования и температурах методом кластерной теории возмущений, учитывающей не только точно внутриатомные кулоновские корреляции в рамках модели Хаббарда, но и все ближние корреляции вплоть до девятой координационной сферы на квадратной решетке в результате точной диагонализации каждого кластера 4×4 , на которые разбивается исходная решетка. Для учета межкластерных взаимодействий в приближении Хаббард 1 (среднего поля) применялся аппарат X -операторов Хаббарда, построенных на базе точных многоэлектронных волновых функций кластера. В результате получена сложная эволюция поверхности Ферми с ростом допирования и температуры [2], согласующаяся с топологическими переходами Лифшица и с конечными арками поверхности Ферми. Два перехода Лифшица разделяют состояния с сильной псевдощелью, со слабой псевдощелью и с нормальной Ферми жидкостью. Показана взаимосвязь переходов Лифшица с изменениями ближнего антиферромагнитного порядка. Для полной картины нормального и псевдощелевого состояния не хватает такого же многоэлектронного описания эффектов электрон-фононного взаимодействия, что является предметом активных исследований в настоящее время.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований 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] M.M.Korshunov, S.G.Ovchinnikov. *Europ J.Physics B*, 2007, 57, 271.

[2] V.I .Kuz'min, M.A.Visotin, S.V.Nikolaev, S.G.Ovchinnikov. *Physical Review B*, 2020, 101, 115141.

Моделирование критических свойств сложных систем первопринципными и Монте-Карло методами

М. М. Болдырева¹, В. О. Борзилов¹, М. А. Шляхтич^{1,2}, П. В. Прудников¹

¹Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
проспект Мира, 55-А, Омск, 644077

²Сибирский Федеральный Университет, проспект Свободный 79, Красноярск, 660041

prudnikovpv@omsu.ru

Исследование макроскопических статистических систем, характеризующихся медленной динамикой, а также изучение свойств ультратонких магнитных пленок и магнитных сверхструктур на их основе вызывает значительный интерес как с экспериментальной, так и с теоретической точек зрения [1, 2].

В докладе будет представлено численное описание особенностей критического поведения неупорядоченных низкоразмерных систем [3] и мультислойных магнитных структур из ферромагнитных пленок, описываемых анизотропной моделью Гейзенберга [4]. Исследуется конкуренция эффектов обменного взаимодействия, анизотропии и взаимодействия Дзялошинского-Мория. Для сопоставления поведения модельных систем с реальными материалами параметры моделирования и значения обменных интегралов рассчитывались на основе первопринципных вычислений в пакете VASP.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ. Для проведения расчетов были использованы вычислительные ресурсы Лаборатории прикладного моделирования, теоретической физики и параллельных вычислений ОмГУ и ЦКП «Центр данных ДВО РАН».

[1] R.A. Duine, K.-J. Lee, S.S.P. Parkin, M.D. Stiles, *Nature Phys.*, **2018**, 14, 217.

[2] В.В. Прудников, П.В. Прудников, М.В. Мамонова, *УФН*, **2017**, 187, 817.

[3] I.S. Popov, A.P. Popova, P.V. Prudnikov, *EPL* **2019**, 128, 26002.

[4] V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, D.E. Romanovskiy, *J. Phys. D*, **2016**, 49, 235002.

Влияние эффектов перемешивания на магнитные и адсорбционные свойства пленки Fe на поверхности Ag

М. В. Мамонова, А. С. Макаричева

Омский государственный университет имени Ф. М. Достоевского, Омск, Россия
mamonovamv@omsu.ru

В работе исследовалось влияние заместительной адсорбции на энергетические и магнитные характеристики монослойной ферромагнитной плёнки железа на поверхности серебра. Заместительная адсорбция характеризуется тем, что адсорбированные атомы металла могут выталкивать приповерхностные атомы субстрата в пленку и занимать их место. Исследования проводились с применением двух подходов функционала спиновой плотности: вариационного метода [1] с учётом температурных эффектов и неоднородного распределения намагниченности и первопринципного, реализованного с помощью VASP [2]. Проводились расчеты энергии адсорбции и магнитного момента системы Fe/Ag в зависимости от ориентации грани подложки, параметра покрытия Θ и доли адатомов в пленке p .

Первопринципные расчеты для ориентации грани (100) показали, что наибольший магнитный момент атома железа наблюдается при параметре покрытия $p=1$ (непрерывная пленка), но при этом энергия адсорбции положительна, что демонстрирует невозможность образования непрерывной пленки. Наиболее энергетически выгодной является структура типа «сэндвич» при $p=0$. Результаты расчетов для $p=0,25$ и $p=0,75$ показали, что смена позиций в ячейке замещающих атомов не влияет на характеристики. Для $p=0,5$ есть два случая замещения: послойное и в шахматном порядке. Послойное расположение оказалось энергетически более выгодно, но с меньшей намагниченностью.

Таблица 1. Доля адатомов в пленке p , полная энергия E , магнитный момент всей системы μ , магнитные моменты атомов железа $\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4$ системы Fe/Ag

p	E_{tot} , эВ	E_{ads} , эВ	μ , μ_B	μ_1 , μ_B	μ_2 , μ_B	μ_3 , μ_B	μ_4 , μ_B
1	-105,3	0,34	3,0	3,05	3,05	3,05	3,05
0,75	-108,3	-0,29	2,9	2,7	2,9	2,9	2,8
0,5 (послойная)	-109,6	-0,89	2,8	2,7	2,9	2,7	2,9
0,5 (шахматная)	-108,1	-0,86	2,9	2,8	2,8	2,9	2,9
0,25	-109,1	-1,47	2,8	2,8	2,9	2,8	2,8
0	-109,6	-2,04	2,9	2,9	2,9	2,9	2,9

Таким образом в работе выявлено сильное влияние перемешивания и энергетическая выгодность образования структуры типа «сэндвич». При $T=0$ и параметре покрытия $\Theta=1$ на Ag непрерывная пленка Fe образовываться не будет. Выводы, полученные в первопринципных расчетах, подтверждаются вариационным методом и экспериментальными исследованиями [3].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ. Для проведения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН».

[1] М. В. Мамонова, В. В. Прудников, А. С. Макаричева, *Вестник Омского университета*, **2020**, 25(3), 18-22.

[2] P.G. Kresse and J. Furthmuller, *Phys. Rev.* **1996**, B, 11169.

[3] A. Hahlin, C. Andersson, J. Hunter Dunn, B. Sanyal, O. Karis and D. Arvanitis, *Phys. Rev.*, **2006**, B, 134423.

Обменное взаимодействие в магнитных диэлектриках при спиновых кроссоверах

С. И. Полукеев¹, В. А. Гавричков¹, С. Г. Овчинников^{1,2}

¹Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН,
ул. Академгородок, 50, стр.38, Красноярск, 660036

²Сибирский федеральный университет,
просп. Свободный, 79, Красноярск, 660041
psi@iph.krasn.ru

Суперобменное взаимодействие в оксидах переходных элементов, магнитные катионы которых находятся в электронной конфигурации d^n ($n=2-9$) содержит два вклада (ФМ и АФМ), каждый из которых представляет собой отдельную обменную петлю. Знак частичного вклада в полное суперобменное взаимодействие не зависит непосредственно от спина катиона $S(d^n)$, но определяется соотношением спинов электрон-дырочной пары $S(d^{n-1}) = S(d^{n+1})$ (случай АФМ взаимодействия) или $S(d^{n-1}) = S(d^{n+1}) \pm 1$ (случай ФМ взаимодействия). Основным фактором сравнения ФМ и АФМ вкладов является тип перекрытия (σ или π) d - орбиталей магнитного катиона и p - орбиталей иона кислорода, а также конкретная последовательность энергетических уровней электрон-дырочной пары для данного катиона.

Исследован вклад оптически возбуждённых многоэлектронных состояний в суперобменное взаимодействие в мотт-халлардовских диэлектриках La_2CuO_4 и $FeVO_3$. Суперобменный гамильтониан выведен аналитически из гамильтониана pd -модели в представлении операторов Хаббарда. Гамильтониан содержит не только спин-спиновые взаимодействия, включающие оптически возбуждённые состояния, но и более сложные взаимодействия негейзенберговского типа, сопровождающиеся экситонами и биэкситонами. Гамильтониан не аддитивен по основным и оптически возбуждённым состояниям магнитного катиона, но аддитивен по виртуальным возбуждённым состояниям электрон-дырочной пары, возникающей в процессе суперобмена

Расчёт суперобменного взаимодействия в оптически невозбуждённом борате железа $FeVO_3$ приводит к АФМ взаимодействию $J < 0$, что соответствует наблюдаемому АФМ упорядочению. При этом эффекты оптической накачки имеют частотно-селективный характер. Знак суперобменного взаимодействия J между двумя Fe^{3+} , один из которых находится в оптически возбуждённом состоянии, может измениться с АФМ на ФМ ($J > 0$) при резонансной оптической накачке на частоте $d-d$ переходов $A(^6A \rightarrow ^4T_1)$, $B(^6A \rightarrow ^4T_2)$, $C(^6A \rightarrow ^4A_1, ^6A \rightarrow ^4E)$.

С ростом давления суперобменное взаимодействие может изменить знак с АФМ на ФМ только в оксидах переходных элементов в конфигурации $d^5 (FeVO_3)$ и $d^7 (CoO, Ni_2O_3)$.

- [1] V. A. Gavrichkov, S. I. Polukееv, S. G. Ovchinnikov. *Phys.Rev. B*, **2020**, *101*, 094409.
- [2] V. A. Gavrichkov, S. I. Polukееv, S. G. Ovchinnikov. *Phys.Rev. B*, **2017**, *95*, 144424.
- [3] S. G. Ovchinnikov, V. A. Gavrichkov, S. I. Polukееv, A. V. Malakhovskii. *Physics of Metals and Metallography*, **2019**, *120 (13)*, 91.
- [4] S. I. Polukееv, V. A. Gavrichkov, S. G. Ovchinnikov. *Journal of SFU*, **2018**, *11(2)*, 159.
- [5] V. A. Gavrichkov, S. I. Polukееv, S. G. Ovchinnikov. *JETP. B*, **2018**, *127*, 713.
- [6] R. V. Mikhaylovskiy, et. al. *Phys. Rev. Lett*, **2020**, *125*, 157201.

Спиновая поляризация низкоэнергетических возбуждений в сильно коррелированной сверхпроводящей проволоке

С. В. Аксенов¹, М. С. Шустин^{1,2}

¹Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН,
Академгородок, 50/38, Красноярск, 660036

²Сибирский федеральный университет,
просп. Свободный, 82А, Красноярск, 660041
asv86@iph.krasn.ru

Проблема экспериментального обнаружения майорановских возбуждений в низкоразмерных твердотельных системах до настоящего времени выступает главным и естественным препятствием для практической реализации топологических квантовых вычислений. Одной из наиболее популярных систем, где ведется поиск такого рода квазичастиц, являются гибридные проволоки полупроводник с сильной спин-орбитальной связью/сверхпроводник (а с недавних пор и проволоки полупроводник/ферромагнетик/сверхпроводник). Поскольку традиционный подход, основанный на туннельной спектроскопии отмеченных структур и ставящий своей целью детектирование отличительных свойств майорановского состояния: его нулевой энергии и пространственной нелокальности, - дает неоднозначные результаты [1], необходимо исследовать и другие характеристики этих квазичастиц.

В данном докладе будут обсуждаться особенности спиновой поляризации низкоэнергетических возбуждений в сверхпроводящей проволоке со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы в магнитном поле. Предполагается, что спаривание реализуется между электронами, находящимися как на одном узле, так и на ближайших соседях (расширенный s-тип). Как следствие, возможны две топологически нетривиальные фазы, с одним и двумя майорановскими возбуждениями, соответственно. Поскольку эксперименты указывают на возможность создания режима сильных электронных корреляций в полупроводниковых проволоках InAs [2], которые являются базой для упомянутых гибридных структур, то особое внимание нами будет уделено модификации спиновой поляризации с учетом многочастичных взаимодействий. Анализ этой проблемы проводится на основе метода ренорм-группы для матрицы плотности (DMRG) [3].

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН №32 «Наноструктуры: физика, химия, биология, основы технологий», РФФИ (проекты № 19-02-00348, 20-32-70059), Правительства Красноярского края, Краевого фонда науки в рамках проекта «Изучение краевых состояний в одно- и двумерных топологических сверхпроводниках» (№ 20-42-243005). А.С.В. выражает благодарность гранту Президента РФ МК-1641.2020.2 за оказанную поддержку. Ш.М.С. благодарит фонд развития теоретической физики и математики «БАЗИС» за поддержку.

[1] P. Yu, J. Chen, M. Gomanko, et al. *Nature*, **2021**, 17, 482.

[2] Y. Sato, S. Matsuo, C.-H. Hsu, et al. *Phys. Rev. B*, **2019**, 99, 155304.

[3] S. V. Aksenov, A. O. Zlotnikov, M. S. Shustin. *Phys. Rev. B*, **2020**, 101, 125431.

Многофункциональные материалы на основе оксидов висмута, лития, вольфрама и молибдена: синтез, термодинамика

А. Н. Семерикова¹, Н. И. Мацкевич¹, В. Н. Шлегель¹, Д. А. Самошкин^{1,2},
С. В. Станкус², В. Д. Григорьева¹, В. П. Зайцев^{1,3}

¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090

²Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 1, Новосибирск, 630090

³Сибирский государственный университет водного транспорта,
ул. Щетинкина, 33, Новосибирск, 630099
semerikova@niic.nsc.ru

Соединения на основе оксидов висмута, лития, вольфрама и молибдена являются перспективными многофункциональными материалами для использования в твердотельных топливных элементах, керамических оксидных генераторах, физике высоких энергий, спинтронике.

В настоящей работе методом твердофазного синтеза впервые получен керамический оксид состава $\text{Bi}_{12.5}\text{Ho}_{1.5}\text{CoO}_{22.3}$. Впервые низкоградиентным методом Чохральского выращены монокристаллы $\text{Li}_2\text{W}_{1-x}\text{Mo}_x\text{O}_4$ ($x = 0.04; 0.025; 0.0125$), включая Li_2WO_4 , из Li_2CO_3 , MoO_3 , WO_3 , прошедших глубокую очистку, по технологии, описанной в работе [1]. Мы не нашли в литературе информации, кроме работ авторов, о выращивании монокристаллов $\text{Li}_2\text{W}_{1-x}\text{Mo}_x\text{O}_4$ для $x = 0.04; 0.025; 0.0125$. Монокристалл вольфрамата лития (Li_2WO_4) был выращен ранее методом Чохральского в работе [2] и методом Бриджмена в работе [3]. Согласно результатам рентгенофазового анализа, структура $\text{Bi}_{12.5}\text{Ho}_{1.5}\text{CoO}_{22.3}$ является кубической, пространственная группа $Fm\bar{3}m$, монокристаллы $\text{Li}_2\text{W}_{1-x}\text{Mo}_x\text{O}_4$ ($x = 0.04; 0.025; 0.0125; 0$) кристаллизуются в структуре фенакита.

Для определения термодинамических характеристик $\text{Bi}_{12.5}\text{Ho}_{1.5}\text{CoO}_{22.3}$, Li_2WO_4 , $\text{Li}_2\text{W}_{1-x}\text{Mo}_x\text{O}_4$ ($x = 0.04; 0.025; 0.0125$) были использованы методы реакционной калориметрии и ДСК. Методом реакционной калориметрии были определены стандартные энтальпии образования и рассчитаны энтальпии решетки. Теплоемкость была измерена методом ДСК в интервале 320–997К. Измерения осуществлялись на установке DSC 404 F1 со скоростью нагрева 6К/мин в проточной атмосфере аргона (20 мл/мин). Показано, что зависимости стандартных энтальпий образования и энтальпий решетки для $\text{Li}_2\text{W}_{1-x}\text{Mo}_x\text{O}_4$ ($x = 0.04; 0.025; 0.0125$), включая Li_2WO_4 , являются линейными, что свидетельствует в пользу выращивания фенакита. Показано, что для $\text{Li}_2\text{W}_{1-x}\text{Mo}_x\text{O}_4$ ($x = 0.025; 0.0125; 0$) отсутствуют фазовые переходы (320–997К).

Настоящая работа поддержана РФФ (проект 19-19-00095).

[1] Yu. A. Borovlev, N. V. Ivannikova, V. N. Shlegel, Ya. V. Vasiliev, V. A. Gusev. *J. Cryst. Growth*, **2001**, 229, 305.

[2] И. Д. Третьак, П. В. Панасюк. *Физ. Электроника*, **1974**, 9, 90.

[3] P. Chen, Y. Chen, L. Jiang, F. Liao, H. Chen, K. Zhao, M. Xue, Y. Zhang. *J. Alloys Compd.*, **2019**, 784, 370.

Влияние угла отклонения поверхности GaAs(111) на характеристики движения капель галлия в процессе неравновесных отжигов

А. А. Спирина¹, Н. Л. Шварц^{1,2}

¹Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 13, Новосибирск, 630090

²Новосибирский государственный технический университет,
просп. Карла Маркса, 20, Новосибирск, 630073
an.spirits@isp.nsc.ru

Высокотемпературные отжиги подложек GaAs приводят к образованию капель галлия на поверхности из-за более интенсивной скорости испарения мышьяка, чем галлия. Интерес к механизму зарождения капель обусловлен их использованием в таких технологиях как капельная эпитаксия, капельное травление и рост нанопроволок по механизму пар-жидкость-кристалл. Экспериментально показано, что капли галлия движутся по поверхности в процессе неравновесного отжига (отжига в вакуум) [1]. С помощью моделирования было получено, что причиной движения капель является достижение равновесной концентрации мышьяка в объеме жидкого галлия [2].

В данной работе рассматривается вопрос влияния угла отклонения поверхности GaAs(111) от сингулярности на направление и скорость движения капель галлия в процессе неравновесных отжигов. Исследование проводилось с помощью моделирования методом Монте-Карло в программном комплексе SilSlim3D [3]. Рассматривались вицинальные поверхности GaAs(111) с ширинами террас L (расстоянием между ступенями) 3.5, 5.5 и 7 нм. Для поверхностей GaAs(111)A получена температурная зависимость скорости движения капель галлия. Для подложек с $L = 3$ нм скорость капель возрастает с температурой, а для поверхностей с $L = 5.5$ и 7 нм скорость капель уменьшается с ростом температуры. При $L = 3$ нм плотность ступеней на поверхности настолько высока, что приводит к строго определенному направлению движения капель: перпендикулярно ступеням. На поверхностях с большим расстоянием между ступенями плотность ступеней ниже, то есть направление движения капель в большей степени определяется анизотропией травления поверхностей (111)A и (111)B жидким галлием на латеральной границе раздела капля-подложка. Поскольку с температурой возрастает скорость травления GaAs жидким галлием, совместно со строгим определением направления движения капель это приводит к увеличению скорости движения капель с температурой на поверхностях с $L = 3$ нм. На поверхностях с большим L направление движения капель меняется в сторону наиболее шероховатых латеральных фасеток. С ростом температуры хаотичность смены направления движения капель на таких поверхностях только усугубляется. Это приводит к уменьшению скорости направленного движения капель с ростом температуры для поверхностей с ширинами террас больше 3 нм.

С помощью моделирования показано, что наличие капель галлия на вицинальных поверхностях приводит к формированию эшелонов ступеней вблизи капель. Планируется изучение вопроса влияния угла отклонения поверхности от сингулярности на морфологию эшелона и его устойчивость в процессе отжига.

Работа поддержана РФФИ (проект №19-31-90023) и программы РАН.

- [1] S. Kanjanachuchai, C. Euaruksakul, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2013**, 5, 7709.
- [2] A. Spirina, N. Schwartz, *Mater. Sci. Semicond. Process*, **2019**, 100, 319.
- [3] A. Zverev, C. Zinchenko, N. Schwartz, Z. Yanovitskaja, *Nanotech. in Russia*, **2009**, 4, 215.

Исследование неравновесного критического поведения тонких гейзенберговских пленок методами Монте-Карло

М. А. Шляхтич^{1,2}, П. В. Прудников²

¹Сибирский федеральный университет,
просп. Свободный, 79, Красноярск, 660041

²Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
просп. Мира, 55А, Омск, 644077
mmed@mail.ru

В данной работе проводилось численное исследование тонких ферромагнитных пленок при применении к описанию их физических свойств анизотропной модели Гейзенберга с гамильтонианом [1]

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

где $S_i = (S_{xi}, S_{yi}, S_{zi})$ – трехмерный единичный вектор в узле i , $J > 0$ характеризует обменное взаимодействие ближайших спинов, носящее ферромагнитный характер, Δ – параметр анизотропии. Значение $\Delta = 0$ соответствует изотропной модели Гейзенберга, а $\Delta = 1$ – модели Изинга. Периодические граничные условия накладывались в плоскости образца. Моделирование проводилось для систем с линейным размером L и числом слоев N . Начиная с начальных конфигураций, система обновлялась с помощью алгоритма Метрополиса при критических температурах $T_c = 1.15$ для $N = 3$, $T_c = 1.31$ для $N = 5$, $T_c = 1.39$ для $N = 7$ [2].

В этой статье исследуются неравновесные свойства ферромагнитных пленок с применением методов Монте-Карло, а также метода коротковременной динамики для получения значений динамических z , θ' и статических β/v критических индексов до достижения системой состояния равновесия. Была обнаружена зависимость критических показателей от толщины тонкой ферромагнитной пленки. Эффекты старения наблюдались при неравновесном критическом поведении. Характерное время релаксации, которое расходится при температуре перехода в термодинамическом пределе, получается как функция размера системы и времени ожидания.

Была исследована временная эволюция намагниченности $m(t)$ и второго момента $m^{(2)}(t)$ из высокотемпературного ($m_0 \ll 1$) и низкотемпературного ($m_0 = 1$) начальных состояний. Для исследования явлений старения рассчитана двухвременная автокорреляционная функция. Обнаружены эффекты старения для неравновесного режима $(t - t_w) \gg t_w$. Были получены временные зависимости автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ для $t_w = 0, 20, 50, 70, 100, 150$ MCS/s. Чтобы оценить время корреляции спиновой системы, были вычислены безразмерные динамические автокорреляционные функции [3] $R(t, t_w) = (\langle C(t, t_w) \rangle - \langle m(t_w) \rangle^2) / (\langle C(t_w, t_w) \rangle - \langle m(t_w) \rangle^2) \sim e^{-t/\tau}$. Характерное время корреляции $\tau(L; T_c) \sim L^z$ увеличивается с увеличением времени ожидания.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ. Для проведения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН», Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН, Суперкомпьютерного центра МГУ им. М.В. Ломоносова.

[1] K. Binder, D.P. Landau, *Phys. Rev. B* **1976**, 13, 1140.

[2] M A Medvedeva, P V Prudnikov, *J. Phys.: Conf. Ser.* **2014**, 510, 012024.

[3] R.N. Bhatt, A.P. Young, *EPL* **1992**, 20, 59.

Первопринципные расчеты магнитной анизотропии ферромагнитных пленок на поверхности платины

М. Ю. Макеев, М. В. Мамонова, А. А. Зенова

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
Ул. Нефтезаводская, 11, Омск, 644053
mihailmaki603@gmail.com

Данная работа посвящена ab-initio расчету энергетических и магнитных характеристик ферромагнитных пленок железа и кобальта на поверхности платины. Расчет энергии магнитной анизотропии (МАЭ), определяемой как разность полных энергий системы при различных ориентациях магнитного момента, является сложной задачей, связанной с большим ресурсопотреблением и длительностью расчетов. Использовался программный комплекс VASP [1]. В основе расчетов лежит теория функционала плотности DFT, совместно с приближением обобщенного градиента и разложением по присоединенным плоским волнам PAW PBE.

Исследована система, состоящая из ферромагнитных пленок, адсорбированных с обеих сторон на немагнитной металлической пластине толщиной от 3 до 15 моноатомных слоев. Использовалась периодическая суперячейка с постоянной решетки, соответствующей подложке, полученной в результате расчетов с учетом полной оптимизации решетки.

Рассчитаны значения энергии магнитной анизотропии неколлинеарных спиновых конфигураций атома Fe на подложке Pt. Получены значения энергетической выгоды ферро- и антиферромагнитных конфигураций.

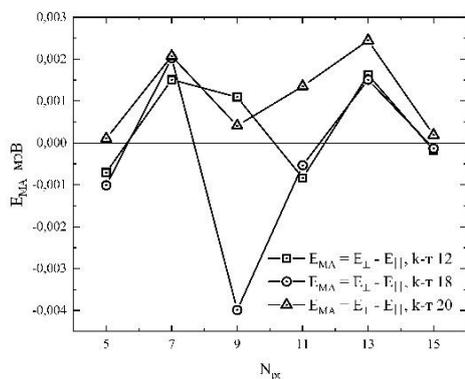


Рисунок 1 – Величина магнитной анизотропии E_{MA} от толщины немагнитной прослойки при разных размерах k-сетки.

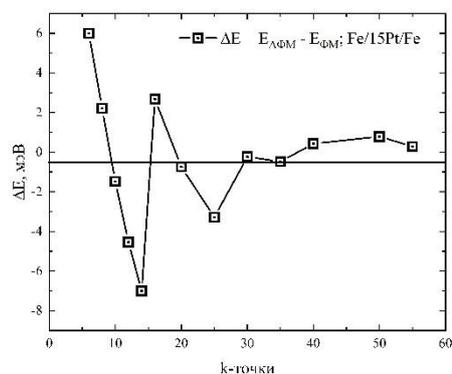


Рисунок 2 – Значение разности энергий ΔE при разных размерах k-сетки.

Анализ сходимости МАЭ по количеству k-точек показало, что должны использовать больший размер сетки порядка 30x30x1, что приводит к резкому увеличению времени вычислений и памяти. Использование недостаточного количества k-точек может даже привести к изменению знака, так как показано на рисунках.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ. Для проведения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН».

[1] P.G. Kresse and J. Furthmuller, *Phys. Rev.* **1996**, B, 11169.

Моделирование динамического фазового перехода во внешнем осциллирующем поле в магнитной пленке, описываемой анизотропной моделью Гейзенберга

А. В. Ейхлер

Омский государственный университет имени Ф.М.Достоевского,
просп. мира, 55, Омск
alexey987@bk.ru

Исследование неравновесных явлений и их динамическое поведение является актуальным вопросом, примеры которых можно найти даже в социальных системах [1].

В данной работе исследовался динамический фазовый переход в гейзенберговской магнитной пленке, при котором происходит переход из динамически неупорядоченной в упорядоченную фазу [2] при изменении полупериода $t_{1/2}$ внешнего осциллирующего поля H с амплитудой H_0 вдоль O_z . При динамически упорядоченной фазе параметр порядка $Q = 0$, при динамически неупорядоченной $Q = 1$.

$$Q = \frac{1}{2t_{1/2}} \int_0^{2t_{1/2}} M_z(t) dt. \quad (1)$$

Исследовалась тонкая пленка с анизотропией типа «легкая» ось. Гамильтониан, описывающий систему:

$$H = -J \sum_{i,j} \left[(1 - \Delta(N)) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z \right] - h \sum_i S_i^z, \quad (2)$$

где S трехмерный единичный вектор в узле. J константа обменного взаимодействия. В нашем случае $\Delta(N) \neq 0$, что соответствует анизотропной модели. Значения параметра анизотропии были взяты из работы [3] для пленок различной толщины.

На Рис. 1 приведено поведение параметра порядка Q от Θ , безразмерной величины, зависящей от полупериода $t_{1/2}$ при начальной температуре $T = 0.8J$ и времени метастабильного состояния $\langle \tau \rangle$.

$$\Theta = \frac{t_{1/2}}{\langle \tau \rangle}$$

Поведение параметра Q соотносится с поведением параметра порядка при термодинамическом фазовом переходе.

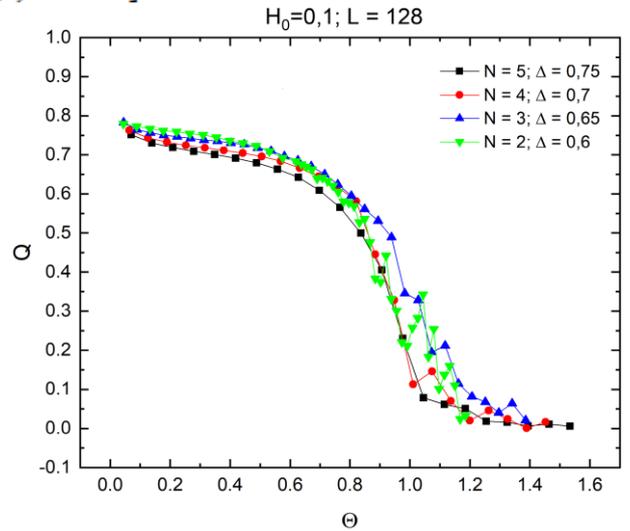


Рисунок 1 – Зависимость Q от Θ при $H_0=0,1$ для разных значений N , начальной температуры T и Δ .

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект No 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ.

- [1] B. Slavko, K. Glavatskiy, and M. Prokopenko, *Phys. Rev. E* **2019**, 99, 042143.
- [2] G. Korniss, C.J. White, P.A. Rikvold, M.A. Novotny, *Phys. Rev. E*, **2000**, 63, 016120.
- [3] P.V. Prudnikov, P. V., Prudnikov, V. V., Mamonova, M. V., & Piskunova, N. I. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 482, 201–205 (2019)

Вычисление ренормализационной константы трёхмерной однородной модели Изинга

В. В. Бражник, А. Н. Вакилов

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
просп. Мира, 55а, Омск, 644077

brazhnik_valeriya@mail.ru, vakilovan@omsu.ru

Было проведено моделирование методом Монте-Карло термодинамического поведения трёхмерной модели Изинга вблизи критической точки с применением кластерного алгоритма Вольфа [1]. С использованием метода перевзвешивания были вычислены различные термодинамические величины, такие, как: намагничённость, восприимчивость, корреляционная длина и ренормализационная константа связи, определяющая фиксированную (неподвижную) точку ренормализационного преобразования. При фиксированном значении отношения корреляционной длины к линейному размеру системы была получена температурная зависимость ренормализационной константы связи.

Теория фазовых переходов второго рода характеризуется аномально большими взаимодействием флуктуаций параметра порядка и является теорией без малого параметра [2]. Поэтому ряды теории возмущений являются расходящимися и адекватно описать критические свойства реальных систем возможно только с применением специальных методов суммирования [3]. Ренормализационная константа связи является неподвижной точкой ренормгруппового преобразования и определяет критические характеристики системы и критические индексы. Вычисление таких критических характеристик непertурбативным методом Монте-Карло представляет большой интерес.

Ренормализационная константа связи может быть связана с магнитными моментами как

$$g_R = 3 \left(\frac{L}{\xi} \right)^3 \left(1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2} \right).$$

В данной работе было выполнено моделирование решёток с линейным размером $L = 64, 80, 96, 110, 128, 140$ при $T_c = 4,5115$. Усреднение проводилось по $2 * 10^6$ состояниям, соответствующим одному шагу Монте-Карло. Один шаг соответствовал 10 переворотам кластера Вольфа. Было получено значение $g_R^{\infty} = 23,56(1)$ с учётом условия достижения термодинамического предела $L/\xi > 4$ [4,5], которое согласуется с теоретико-полевым [4] и численным [5] значениями.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект # 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ.

[1] U. Wolff. *Phys. Rev. Lett.* **1989**, 62, 361.

[2] К. Вильсон, Дж. Когут. *УФН.* **1985**, 146 (3), 459–491.

[3] И.М. Суслов. *ЖЭТФ.* **2005**, 127, 1350–1402.

[4] J. K. Kim, A.J. de Souza, D.P. Landau. *Phys. Rev. E.* **1996**, 54, 2291.

[5] H. G. Ballesteros, L. A. Fernández, V. Martín-Mayor, A. Muñoz Sudupe. *Phys. Lett. B.* **1998**, 441(1-4), 330.

Исследование влияния высокотемпературного отжига на термоэлектрические свойства $\text{CuCrS}_{2-y}\text{Se}_y$

И. Н. Катаманин^{1,2}, А. И. Романенко¹, Г. Е. Чебанова¹, М. В. Дрожжин^{1,2},
М.-К. Хан³, S.-J. Kim³, Hongchao Wang⁴

¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090

²Новосибирский государственный технический университет,
просп. Карла Маркса, 20, Новосибирск, 630073

³Department of Chemistry and Nano Science, Ewha Womans University,
Seoul 120-750, Korea

⁴School of Physics, State Key Laboratory of Crystal Materials, Shandong University, Jinan
250100, PR China

katamanainivan@gmail.com

Термоэлектричество является альтернативным способом преобразования тепловой энергии в электрическую. Такой способ генерации электрической энергии имеет ряд преимуществ, таких как: экологичность, надежность вследствие отсутствия движущихся частей, компактность и неприхотливость к источнику тепла [1].

С позиции эффективности термоэлектрического преобразования, термоэлектрические материалы характеризуются параметром фактора мощности $PF=\sigma S^2$ и безразмерным параметром добротности $ZT=\sigma S^2 T/k$, где σ – электропроводность, S – коэффициент Зеебека, k – теплопроводность, T – температура. Все эти параметры зависят от концентрации носителей заряда, и улучшение одного параметра приводит к ухудшению другого. В связи с этим важной задачей является поиск новых перспективных термоэлектрических материалов, оптимально сочетающих в себе данный набор параметров [2].

Исследуемое соединение $\text{CuCrS}_{2-y}\text{Se}_y$ является поликристаллическим слоистым халькогенидом. Согласно изученным литературным данным, при высокотемпературном отжиге у таких материалов укрупняются кристаллические зерна, а также улучшается контакт между соседними зернами, что приводит к увеличению электропроводности.

В данной работе исследуется коэффициент Зеебека в диапазоне температур 77,4-300 К и электропроводность в диапазоне температур 4,2-300 К образцов $\text{CuCrS}_{2-y}\text{Se}_y$ до и после отжига. Отжиг производился при 950 °С в течение 72 часов для CuCrSe_2 и при 900 °С в течение 8 часов для CuCrS_2 . Условия отжига промежуточных образцов масштабировались равномерно.

Неотожженный образец CuCrS_2 является полупроводником р-типа с экспоненциальной температурной зависимостью электропроводности. При замещении S на Se полупроводниковое поведение меняется на металлическое. При полном замещении электропроводность увеличилась на 3 порядка, при этом коэффициент Зеебека уменьшился в 2 раза. У отоженных образцов с преобладанием селена в составе коэффициент Зеебека значительно увеличился, однако уменьшилась электропроводность. В то же время для образца CuCrS_2 отжиг негативно повлиял на коэффициент Зеебека, но значительно увеличил электропроводность.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 21-53-53008 ГФЕН_а).

[1] Иоффе А.Ф. Полупроводниковые термоэлементы. М. : АН СССР. – 1960. – 188с.

[2] Бернштейн А. С. Термоэлектрические генераторы. / А. С. Бернштейн. – М.: «Государственное энергетическое издательство», – 1956. – 48 с.

На пути к разнообразию эпитаксиальных соотношений и повышению качества кристаллической структуры тонких пленок МАХ-фаз: прогнозирование и эксперимент

И. А. Тарасов¹, М. А. Высотин^{1,2}, Л. А. Лященко¹, О. А. Максимова^{1,2},
З. И. Назарова², А. Н. Назаров², С. Н. Варнаков¹, С. Г. Овчинников^{1,2}

¹Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН,
Академгородок, 50/38, Красноярск, 660036
²Сибирский федеральный университет,
просп. Свободный, 82А, Красноярск, 660041
tia@iph.krasn.ru

Материалы МАХ-фаз ($M_{n+1}AX_n$, $n = 1, 2$ или 3) [1] представляют собой семейство нано-слоистых гексагональных соединений. В этих материалах **М** является ранним переходным металлом, **А** – элемент основной группы, а **Х** – это *С* или *N* ($n = 1-3$). Эти системы имеют атомно-слоистую структуру, состоящую из слоёв **М-ХМ** (M_2X), чередующихся с атомными слоями **А**-элемента. Атомные слои укладываются вдоль оси *С*. Долгое время считалось (с 1960-х годов), что слоистая структура МАХ может быть получена только с использованием ранних переходных металлов в качестве основного компонента слоев **М**, что, по существу, приводит к образованию лишь парамагнитных соединений. Первая МАХ-фаза ($Cr_{0,75}Mn_{0,25}$) $_2GeC$ с дальним магнитным порядком была синтезирована в виде эпитаксиальной тонкой пленки на *MgO* (111) в 2013 году. Последующие исследования обнаружили несколько тройных и четвертных МАХ-фаз на основе *Mn* с конкурирующими ферро- и антиферромагнитными (внутри- и межплоскостные) взаимодействиями, приводящими к общему сложному магнитному отклику, зависящему от поля и температуры.

Широкая вариативность состава и присущая им слоистая структура делает их идеальной модельной системой для изучения сложных магнитных явлений, которые происходят в атомно-слоистых материалах, выходящих за рамки традиционного ферромагнитного (FM), антиферромагнитного (AFM) и парамагнитного (PM) порядков. Близость энергетической выгоды различных магнитных порядков обуславливает возможность его контролируемого изменения с помощью различных механизмов: напряжений кристаллической решетки, температурного воздействия, приложения магнитного поля и т.д.

В рамках данного сообщения обсуждаются вопросы текущего состояния исследования магнитной свойств тонких пленок МАХ-фаз, а также вопросы прогнозирования условий синтеза и возможных эпитаксиальных ориентаций с различными монокристаллическими материалами. Предлагается кристалло-геометрический подход для прогнозирования эпитаксиальных ориентаций, габитусных плоскостей и атомных структур границ раздела, включая атомарно-гладкие и ступенчатые, между МАХ-фазами и различными подложками, в том числе с буферными слоями. Обсуждаются предварительные результаты для случая фазы Mn_2GaC на монокристаллических подложках Al_2O_3 .

Исследования выполняются при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта № 20-42-240012, Правительства РФ в рамках гранта по созданию лабораторий мирового уровня (соглашение № 075-15-2019-1886).

[1] M. Sokol, et al., *Trends in Chemistry*, **2019**, 1, 210.

Массивы вертикально ориентированных углеродных нанотрубок: синтез, свойства, применение

А. В. Окотруб, А. В. Куреня, Д. В. Городецкий, К. И. Баскакова,
О. В. Седельникова, Л. Г. Булушева

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090
spectrum@niic.nsc.ru*

Композиционные материалы на основе полимерной матрицы с различными наноуглеродными включениями являются перспективными материалами для электромагнитных экранов. Массивы многослойных углеродных нанотрубок (МУНТ), ориентированных перпендикулярно поверхности, обладают анизотропией механических, электрических и оптических свойств, что позволяет создавать новые типы функциональных материалов и устройств. МУНТ были синтезированы на кремниевых подложках методом CVD в реакции каталитического термоллиза смесей ферроцен/толуол. Композитные пленки MWNT с наполнителем из полистирола и железа были получены методами обработки в растворе, вальцеванием и вытягиванием. Обсуждено влияние способа синтеза на диэлектрические свойства композита углеродный наполнитель/полимер. Вальцевание и растяжение – эффективные способы получения анизотропных композитов [1, 2]. Измерения магнитной восприимчивости, а также записи петель изотермического гистерезиса, выполненные в трех перпендикулярных направлениях магнитного поля, подтвердили, что нанотрубки имеют преимущественную ориентацию в матрице. Сильная диамагнитная анизотропия в композитах обусловлена не только МУНТ, но и полистирольной матрицей [3]. Вклад наночастиц железа в общий магнитный отклик сильно зависит от их концентрации в композите, а также от нековалентной укладки матрица-наполнитель, которая влияет на магнитные межчастичные взаимодействия. Мы исследуем электромагнитный отклик МУНТ в терагерцовом диапазоне частот. Композиты показали повышенную диэлектрическую проницаемость и анизотропию в спектрах пропускания при увеличении содержания железа [4]. Такое поведение было связано с механизмом, основанным на электропроводности и поляризации ICN и интерфейсов ICN / MWCNT. Поскольку терагерцовое поле проникает внутрь MWCNT, заполнение их полостей может быть способом изменения электромагнитных свойств композитов, содержащих MWCNT. Формирование периодических структур на поверхности подложки позволяет создавать материал со свойствами метаповерхности [5].

[1] A.V. Okotrub et al. “Transmission of terahertz radiation by anisotropic MWCNT/polystyrene composite films”, *Phys. Status Solidi B* 248, **2011**, 2568.

[2] N.R. Arutyunyan et al. “Light polarizer in visible and THz range based on single-wall carbon nanotubes embedded into poly(methyl methacrylate) film”, *Laser Physics Letters* **2016**, 13, N 065901.

[3] T.L. Makarova et al. “Assessing carbon nanotube arrangement in polystyrene matrix by magnetic susceptibility measurements” *Carbon* 2016, 96, 1077.

[4] O.V. Sedelnikova et al. “Iron-filled multi-walled carbon nanotubes for terahertz applications: effects of interfacial polarization, screening and anisotropy”, *Nanotechnology* **2018**, 29, N 174003.

[5] G.V. Gorokhov, et al. “Creation of metasurface from vertically aligned carbon nanotubes as versatile platform for ultra-light THz components”, *Nanotechnology* **2020**, 31, 255703.

Природа низкотемпературной теплоемкости низкоразмерных углеродных материалов

А. Н. Пономарев¹, А. Е. Резванова¹, М. С. Барабашко²

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,
пр. Академический 2/4, г. Томск, Россия, 63405*

²*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины,
пр. Науки 47, г. Харьков, Украина, 61103
alex@ispms.ru*

Исследована природа низкотемпературной теплоемкости низкоразмерных углеродных материалов, в частности фуллерита C₆₀ и УНТ. Предложена модель возбуждений динамической конфигурации для описания низкотемпературной теплоемкости фуллерита C₆₀ и расчет зависимости скорости звука. Показано, что эта модель описывает динамику кластерных образований ближнего порядка в фуллерите C₆₀, поскольку учитывает возбуждения как атомной, так и электронной подсистем. В рамках этой модели показано, что низкоэнергетические туннельные состояния, расположенные на границах доменов C₆₀, вносят доминирующий вклад в низкотемпературные эффекты в теплоемкости и скорости звука C₆₀.

Низкотемпературное поведение теплоемкости неупорядоченных нанотрубок сильно зависит от структурных изменений и в области низких температур также не объясняется фононным вкладом. Выражение для электронной теплоемкости получено с учетом многократного упругого рассеяния электронов на примесях и структурных неоднородностях типа ближнего порядка. Рассчитанная электронная теплоемкость зависит от диаметра нанотрубки, концентрации примесей, параметров ближнего порядка (структурной неоднородности) и описывает особенности низкотемпературного поведения теплоемкости, наблюдаемые в неупорядоченных УНТ.

Таким образом, мы предложили, что низкотемпературные аномалии теплоемкости в низкоразмерных углеродных структурах могут иметь электронную природу, а не быть связаны с изменением размерности колебаний атомов. Эти аномалии определяются электронами, рассеянными на точечных дефектах и участвующими в формировании нового ближнего порядка при низких температурах.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2019-0031.

[1] M.S. Barabashko et al. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures* **2017**, 25, 661-666.

[2] A.N.Ponomarev et al. *Physica E* **2015**, 66, 13.

Электронный транспорт и магнитные свойства в монокристалле $\text{CuCr}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}\text{S}_2$

Е. Н. Ткачев, А. Н. Лавров, Е. В. Коротаев, Л. А. Ткачева,
М. М. Сыроквашин, И. Ю. Филатова, Б. М. Кучумов

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090
etkachev@niic.nsc.ru*

В данной работе монокристаллические образцы CuCrS_2 и $\text{CuCr}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}\text{S}_2$ были получены методом химических транспортных реакций (ХТР) из предварительно синтезированных порошковых дисульфидов. Полученные соединения были охарактеризованы рентгеноструктурным и рентгеновским микронзондовым анализом.

На Рис. 1 температурная зависимость удельного сопротивления $\text{CuCr}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}\text{S}_2$ демонстрирует полупроводниковую зависимость с аномалией 30-50 К. На вставке Рис. 1 показана температурная зависимость эффективной энергии активации, из которой видно, что выше температуры 37.3 К значения энергии активации ≈ 200 -250 К. А ниже температуры 37.3 К значения энергии активации почти равны нулю. Исходный образец CuCrS_2 демонстрирует подобное поведение температурной зависимости электросопротивления, но с гораздо меньшей амплитудой аномалии.

Из измерений магнитных свойств (Рис. 2) видно, что монокристаллы (с железом и без) представляют собой гетероструктуры из CuCrS_2 и ферромагнитной шпинели CuCr_2S_4 . переход от одной фазы к другой осуществляется интеркаляцией/ деинтеркаляцией слоя меди: $\text{Cu}_2\text{Cr}_2\text{S}_4 \rightarrow \text{CuCr}_2\text{S}_4 + \text{Cu}$. Ионы хрома находятся преимущественно в состоянии Cr^{3+} со спином $S=3/2$, меди – Cu^{1+} со спином $S=0$. Полную намагниченность M можно разложить на компоненты, относящиеся к фазам CuCrS_2 и CuCr_2S_4 (вставка Рис. 2). Первая является фрустрированным антиферромагнетиком с $T_N \approx 37$ К и предпереходной областью 2D-AF, начинающейся от ~ 100 К. Вторая – ферромагнетик с температурой Кюри ~ 370 -380 К. Расчет эффективного момента дает значения $\sim 4.1 \mu_B$ при комнатной температуре, что превышает ожидаемые значения $3.87 \mu_B$ для ионов Cr^{3+} . Разницы между магнитными свойствами образцов с железом и без не наблюдается.

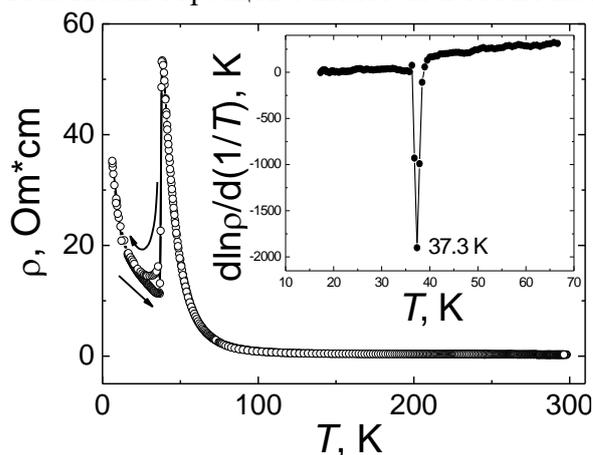


Рисунок 1 – Температурная зависимость удельного электросопротивления $\text{CuCr}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}\text{S}_2$. На вставке – температурная зависимость эффективной энергии активации

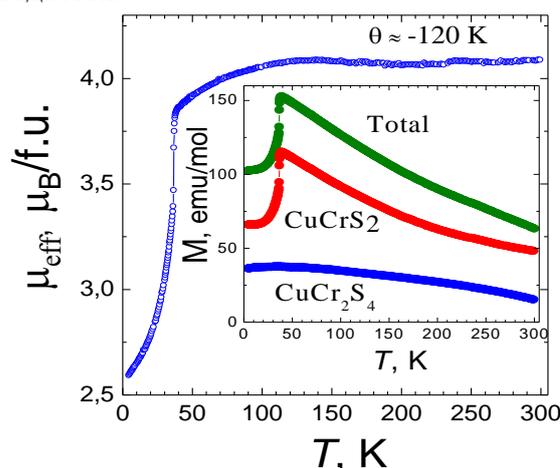


Рисунок 2 – Температурная зависимость эффективного магнитного момента $\text{CuCr}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}\text{S}_2$. H//ab На вставке – температурная зависимость намагниченности $\text{CuCr}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}\text{S}_2$

Диэлектрические характеристики интеркалированного фторированного графита с бромом и ацетонитрилом

М. А. Гребёнкина^{1,2}, Г. Н. Чехова¹, Д. В. Пинаков¹,
А. В. Гусельников¹, Л. Г. Булушева¹, А. В. Окотруб¹

¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090

²Новосибирский государственный университет,
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090
grmariya@mail.ru

Интеркалированные соединения фторированного графита (ИСФГ) представляют собой матрицу, состоящую из слоёв графена с присоединёнными атомами фтора, с внедрёнными в межслоевое пространство посторонними молекулами-гостями [1]. Изучение диэлектрических характеристик ИСФГ позволяет уточнить структуру материала и определить процессы, происходящие в материале при приложении внешнего электрического поля. Однако подобных работ существует крайне мало [2].

В данной работе были исследованы три матрицы фторированного графита с разным содержанием фтора ($C_2F_{1,05}$, $C_2F_{0,85}$, $C_2F_{0,60}$). В качестве внедрённых молекул были выбраны бром Br_2 и ацетонитрил CH_3CN , чтобы рассмотреть влияние неполярных и полярных молекул на диэлектрические свойства ИСФГ. Измерения диэлектрической проницаемости проводились с помощью импедансной спектроскопии в частотном диапазоне 1 Гц – 7 МГц. Измерения зависимости диэлектрической проницаемости от температуры в диапазоне от $-180^\circ C$ до $25^\circ C$ были выполнены на частотах 1 кГц и 10 кГц с 2-4 циклами последовательных охлаждения и нагрева.

В результате было показано, что диэлектрическая проницаемость ИСФГ увеличивается с уменьшением содержания фтора в матрице фторированного графита. Также на увеличение диэлектрической проницаемости в 1,6 раза для матрицы $C_2F_{1,05}$ и в 1,8 раза для матрицы $C_2F_{0,85}$ влияет замена внедрённых неполярных молекул брома Br_2 на полярные молекулы ацетонитрила CH_3CN . Для наименее фторированной матрицы $C_2F_{0,60}$ отмечено существенное увеличение диэлектрической проницаемости относительно матриц с высоким содержанием фтора за счёт образования ионов Br_2^- , Br_3^- вследствие переноса заряда с нефторированных областей на Br_2 . Внедрённые молекулы брома ведут себя в межплоскостном пространстве аналогично состоянию жидкости, что проявляется во влиянии коллективного эффекта вымораживания движения молекул и ионов брома на температурную зависимость диэлектрических свойств. Для ИСФГ с ацетонитрилом CH_3CN было продемонстрировано снижение диэлектрической проницаемости при понижении температуры. Данный эффект был связан с влиянием вымораживания движения внедрённых молекул ацетонитрила CH_3CN . Полученные значения диэлектрической проницаемости ИСФГ были использованы для оценки размера нефторированных областей на слоях матрицы и количества внедрённых полярных молекул ацетонитрила CH_3CN .

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-29-19073.

- [1] G. N. Chekhova, D. V. Pinakov, Yu. V. Shubin, V. P. Fadeeva, V. D. Tikhova, A. V. Okotrub, L.G. Bulusheva. *J. Fluor. Chem. Elsevier B.V.*, **2020**, 232, 109482.
[2] E. B. Amitin, V. G. Bessergenev, A. A. Varchenko, S. S. Ilyasov and N. F. Yudanov. *Phys. Scr.*, **1989**, 40, 759–760.

Тепловые свойства одно- и двухслойного графена с беспорядком

Н. Г. Бобенко¹, В. Е. Егорушкин¹, Н. В. Мельникова²

¹ Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,
проспект Академический 2/4, Томск, 634021,

² Национальный исследовательский Томский государственный университет,
улица Ленина 36, Томск, 634050
nadejdabobenko@gmail.com

Структурный беспорядок существует в любом реальном материале, и графен не является исключением. Листы одно- и двухслойного графена содержат различные типы беспорядка: волны на поверхности до 0,1 нм, неровный край графеновой ленты, вакансии, атомы замещения, междоузельные атомы, адсорбаты остатки полимеров между слоями. В процессе осаждения графенов на подложку происходит модификация структуры, связанная с изменениями концентрации примеси. Это приводит к возникновению структурного ближнего порядка, который может оказывать влияние на физические свойства графена.

Электронный перенос в неупорядоченном графене и биграфене исследован с учетом рассеяния электронов на примеси и различных структурах ближнего порядка [1]. Предложено новое выражение для электронной теплопроводности $K_{el}(T)$ системы, находящейся в процессе преобразования «упорядочение-расслоение». Показано, что вклад в $K_{el}(T)$ от рассеяния электронов на примесях линейно зависит от температуры для одно- и двухслойного графена. Вклад в $K_{el}(T)$ от рассеяния электронов на ближнеупорядоченных комплексах $\sim T^2$ для однослойного графена и $\sim T^{1.5}$ в биграфене, что соответствует экспериментальным данным по полной теплопроводности [2, 3]. Рассчитанная $K_{el}(T)$ в биграфене выше, чем в однослойном графене, но порядок величины $K_{el}(T)$ в этих системах одинаковый и составляет $\sim 10\text{--}15\%$ от значения полной теплопроводности. Рассчитанное через теплопроводность значение электропроводности имеет хорошее согласие с экспериментальными данными [2]. Таким образом показано, что роль структурных дефектов и дефектных комплексов в формирование транспортных свойств одно- и двухслойного графена значительна.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2019-0031.

- [1] N.G. Bobenko, V.E. Egorushkin, N.V. Melnikova Nataliya. *Synth. Met.*, **2020**, 270, 116590.
- [2] J.H. Seo, I. Jo, A.L. Moore, L. Lindsay, Z.H. Aitken, M.T. Pettes, X. Li, Z. Yao, R. Huang, D. Broido, N. Mingo, R.S. Ruoff, L. Shi, *Scien.*, **2010**, 328, 213–216.
- [3] M.T. Jo, L. Pettes, E. Lindsay, A. Ou, A.L. Weathers, Z. Moore, L. Yao Shi, *AIP Adv.*, **2015**, 5, 053206.

Химическая модификация углеродных нанотрубок для применения в качестве газовых сенсоров

В. И. Сысоев¹, Л. Г. Булушева¹, А. В. Окотруб^{1,2}

¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090

²Новосибирский государственный университет,
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090
sysoev@niic.nsc.ru

Детектирование низких концентраций токсичных, пожаро- и взрывоопасных веществ в воздухе является крайне актуальным для охраны труда, здоровья и контроля качества окружающей среды. Диоксид азота (NO₂) является одним из распространённых загрязнителей, который является побочным продуктом при химическом производстве, металлургии, а также выделяется с выхлопом автомобилей. Традиционными материалами для резистивных газовых сенсоров являются металлы, оксиды металлов, неорганические полупроводники, проводящие полимеры и углеродные материалы. Все эти классы веществ имеют свои преимущества и ограничения в отношении рабочей температуры, долговременной стабильности, чувствительности, а также характерных времен отклика и регенерации. Среди них углеродные нанотрубки (УНТ) являются перспективной платформой для создания сенсорных материалов, благодаря химической стабильности, электрическим свойствам и высокой удельной поверхности.

В настоящей работе разработана методика нанесения тонких пленок УНТ на непроводящие подложки для применения в качестве чувствительного элемента в газовых сенсорах. Изучено влияние ковалентной модификации внешней стенки двуслойных УНТ (ДУНТ) на кинетику отклика и чувствительность материалов. Исследовано влияние функционализации ДУНТ на сенсорные свойства. В диапазоне температур от 25 до 150°C фторированные ДУНТ показывают большие времена адсорбции и десорбции по сравнению с немодифицированными ДУНТ, что может быть связано с более высокой энергией связывания, что согласуется с экспериментальными данными и DFT-расчётами, полученными на графене и его производных [1]. В то же время присоединение фтора к внешней стенке приводит к изменению зарядового состояния поверхности трубки и характера проводимости ДУНТ, что приводит к увеличению чувствительности при температурах выше 70-80°C. Исходя из отклика и регенерации пленок при циклическом воздействии при разных температурах, была подобрана рабочая температура сенсора, равная 150°C. Разработанная методика получения пленок позволяет получить чувствительные элементы, позволяющие определять диоксид азота на уровне 10⁻⁸ об.% (10 ppb), а фторирование ДУНТ позволяет увеличить чувствительность сенсора примерно на порядок при той же температуре и достичь предела обнаружения менее 1 ppb. Помимо этого, изучено влияния влажности на сенсорный отклик и регенерацию, а также разработана методика модификации поверхности ДУНТ, которая позволяет усилить чувствительность сенсорного элемента по отношению к влажности за счет перфорации внешней стенки.

[1] V.I. Sysoev, A.V. Okotrub, I.P. Asanov, P.N.Gevko, L.G. Bulusheva. *Carbon*, **2017**, 118, 225-232.

Однослойные углеродные нанотрубки с серой: заполнение, характеристика, транспортные и сенсорные свойства

О. А. Гурова, О. В. Седельникова, В. И. Сысоев, Л. Г. Булушева, А. В. Окоотруб

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090
gurova@niic.nsc.ru*

Инкапсуляция серы в полость однослойных углеродных нанотрубок (ОУНТ) приводит к новым физическим свойствам ОУНТ из-за изменения в электронной структуре и химической активности материала.

Одним из наиболее эффективных и простых методов заполнения ОУНТ является ампульный метод синтеза. В данной работе мы использовали ОУНТ (TUBALL™), приобретенные в компании OCSiAl. Средний диаметр нанотрубки 1,7 - 1,9 нм. По данным атомно-абсорбционной спектроскопии, количество каталитических частиц железа в ОУНТ составляло ~ 7 масс.%. Для открытия углеродных «шапочек» ОУНТ прокаливались при 500°C на открытом воздухе. Удаление каталитического железа производилось с помощью комбинированного метода очистки с использованием соляной кислоты и магнитной сепарации [1]. Перед заполнением порошок нанотрубок и элементарная сера перетиралась в агатовой ступке. Полученную смесь засыпали в кварцевую ампулу, ампулу откачивали и запаивали. Заполнение ОУНТ производилось при 750°C в течение 1 часа с последующим понижением температуры до 600°C в течение 14 часов [2]. Для определения количества инкапсулированной серы, часть ОУНТ после заполнения обрабатывали толуолом чтобы смыть поверхностную серу. Структура исходных и заполненных серой ОУНТ была охарактеризована методами сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии, спектроскопией комбинационного рассеивания света, оптической и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Были измерены транспортные и сенсорные свойства ОУНТ.

О.В. Седельникова благодарит за поддержку Президента РФ СП-1593.2021.1

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

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

Элементы терагерцовой оптики на основе микропрофилированных массивов УНТ

Д. В. Городецкий¹, О. В. Седельникова¹, К. И. Баскакова¹, А. Г. Куреня¹,
А. С. Матвеева¹, Г. В. Горохов², Д. С. Быченко², П. П. Кужир²,
С. А. Максименко², Л. Г. Булушева¹, А. В. Окотруб¹

¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090*

²*Научно-исследовательское учреждение "Институт ядерных проблем" БГУ,
ул. Бобруйская, 11, Минск, 220006
gorodetskiy@niic.nsc.ru*

Управление фазой, поляризацией, направлением распространения электромагнитных волн в широком диапазоне частот и передача излучения в заданную точку с низкими потерями является важной задачей современной фотоники. В сверхвысокочастотном радиодиапазоне, терагерцовом и инфракрасном диапазоне для управления электромагнитной волной используют искусственно созданные периодические элементы (фотонные кристаллы). В микроволновой области в качестве оптических элементов применяются материалы на основе металлических структур. Повышение степени поглощения электромагнитного излучения в металлах при увеличении частоты падающей волны ограничивает работоспособность таких систем в высокочастотной области. Материалы на основе массивов многослойных УНТ имеют значительно меньшие диссипативные потери в ТГц области частот, что делает их перспективным материалом, для создания на их основе элементов терагерцовой оптики.

Массивы ориентированных углеродных нанотрубок были синтезированы на кремниевых и кварцевых подложках размером 16×16 мм в проточном аэрозольном CVD реакторе. Профилирование массивов УНТ проводилось с использованием лазерного гравера (JPT, Китай), генерирующего излучение с длиной волны 1064 нм и мощностью до 20 Вт. В результате, были получены метаструктуры на основе массивов УНТ с различным дизайном поверхности на кремниевых и кварцевых подложках, а также метаповерхности из массивов УНТ без подложки с фиксирующим полимерным покрытием. Сформированный лазерным излучением профиль состоит из периодических полос микронного разрешения либо из окружностей, соответствующих зонам Френеля падающего электромагнитного излучения. Полученные образцы были исследованы методами оптической, растровой электронной микроскопии, спектроскопией комбинационного рассеяния света, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопией и NEXAFS-спектроскопией.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ № 20-52-00020.

Электрохимические свойства композиционных материалов на основе термически обработанного оксида графита и МУНТ для электродов суперконденсаторов

К. М. Попов, В. И. Сысоев, В. Е. Архипов, Л. Г. Булушева, А. В. Окотруб

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090
popov@niic.nsc.ru*

В работе представлено исследование структуры и свойств композиционных материалов для электродов суперконденсаторов. В качестве основы композита использовали термически обработанный оксид графита (ТОГ), обладающий высокой удельной поверхностью (более 500 м²/г). Многослойные углеродные нанотрубки (МУНТ) выступают как наполнитель, улучшающий электропроводность композита и создающий более развитую иерархическую структуру. Предлагаемые материалы получены без использования связующего материала, что увеличивает электропроводность материала и количество адсорбционных мест двойного слоя для ионов электролита.

С целью увеличения смачивания водой МУНТ были обработаны в смеси кислот H₂SO₄/HNO₃. Для приготовления композиционных материалов использовали лиофильную сушку суспензий смеси оксида графита и окисленных МУНТ. Полученный аэрогель термически обрабатывали для удаления кислородсодержащих функциональных групп. Для приготовления электрода термически обработанный аэрогель прессовали. Электрохимические свойства композитов ТОГ/МУНТ были исследованы в водных растворах электролитов (6М КОН, 1М H₂SO₄). Показано влияние температуры обработки и соотношения компонент в композите ТОГ/МУНТ на электрохимические свойства композитных электродов. Электрохимическая ёмкость электродов находится в диапазоне от 10 до 200 Ф/г в 6М растворе КОН при скоростях развёртки потенциала в диапазоне от 1000 до 2 мВ/с.

Применение ТГц спектроскопии для оценки пористости композита ГА-МУНТ

А. Е. Резванова¹, В. В. Николаев², А. Н. Пономарев¹, М. С. Барабашко³

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,
пр. Академический 2/4, Томск, 634055*

²*Томский Государственный университет,
пр. Ленина 36, Томск, 634050*

³*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины,
пр. Науки 47, г. Харьков, Украина, 61103
nastyia.rezvanova@mail.com*

В работе исследована взаимосвязь поглощающей способности и величины пористости для композитного материала гидроксиапатита (ГА) с добавками многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ). Содержание МУНТ составляло 0, 0.1 и 0.5 масс.%. Методом терагерцовой спектроскопии [1,2] выполнены измерения коэффициента поглощения образцов в диапазоне частот излучения 0.2-1,6 ТГц с помощью спектрометра T-SPEC. Установлена корреляция между поглощающей способностью материала и численными значениями пористости. Образец ГА без добавок МУНТ обладает наибольшим коэффициентом поглощения. Увеличение концентрации нанотрубок приводит к уменьшению пористости и коэффициента поглощения.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2021-0007.

[1] Prince Bawuah et al. *J. of Inf., Millimeter, and Terahertz Waves*, **2020**, 41, 450–469.

[2] Mira Naftaly et al. *Sensors*, **2020**, 20, 3120.

Зависимость концентрации фтора и водорода от угла поворота при функционализации турбостратного графена

А. А. Белослудцева¹, Ю. А. Чумаков¹, Н. Г. Бобенко¹

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,
просп. Академический, 2/4, Томск, 634055
Anna.bel@ispms.tsc.ru

В отличие от хорошо изученного однослойного графена, турбостратный графен, структура которого определяется углом поворота графеновых слоев относительно друг друга, привлек к себе внимание лишь недавно. Поворот, как новая степень свободы, приводит к зависимости свойств от угла поворота в этом материале. Поверхности турбостратного графена может иметь структуры высокой симметрии АА, АВ (ВА), доля которых определяется углом поворота. Экспериментальные исследования [1] и теоретические расчеты [2] показывают, что фторирование и гидрирование поверхности турбостратного графена неравномерно. Существует 3 типа центров адсорбции, преобладающих в зависимости от угла поворота. В [2] показано, что для углов $0^\circ < \theta < 16^\circ$ и $44^\circ < \theta < 60^\circ$ центрами адсорбции будут являться области со стекингом АА и АВ (ВА), а при $16^\circ < \theta < 44^\circ$ атомы адсорбата располагаются на фуллереноподобных каркасных структурах С48 и С72. Использование данных о зависимости доли площадей сверхструктур от угла турбостратного графена позволит определить диапазон углов наилучшей функционализации материала.

Нами с применением имитационного моделирования было создано ПО для построения кристаллической решетки турбостратного графена, с возможностью задавать размер решетки, угол поворота и определять с выбранной точностью размеры площадей с АА и АВ (ВА) стекингом. Расчеты показали, что АА и АВ структуры отсутствуют в промежутке $20^\circ < \theta < 40^\circ$, а в промежутках от $0^\circ < \theta < 1^\circ$ и от $59^\circ < \theta < 60^\circ$ меняются скачком.

Зависимость максимальной концентрации чужеродных атомов при функционализации турбостратного графена фтором и водородом проводилась путем сопоставления единице определенного типа сверхструктуры соответствующего числа чужеродных атомов [2]: для АА-12 атомов, тройным комплексам АВ-24 атома, С48-24 и С72-12 атома примеси, соответственно. Рассчитанная зависимость максимальной концентрации адсорбированных атомов фтора и водорода от угла поворота в турбостратном графене имеет несколько пиков. Пики вблизи $\theta = 9.5^\circ$ и $\theta = 50.5^\circ$ обусловлены максимальной долей областей с АВ стекингом. При $\theta = 13.2^\circ$ и $\theta = 46.8^\circ$ преобладают АА суперструктуры, а вблизи $\theta = 30^\circ$ - доля фуллереноподобных структур С48 и С72 максимальна. При этом наибольшая концентрация атомов адсорбата достигает 20% при углах $\theta = 9.43^\circ$.

Таким образом, можно предположить, что наиболее эффективно функционализация фтором и водородом будет протекать в турбостратном графене с углами поворота между слоями близкими к $\theta = 1^\circ$ и $\theta = 59^\circ$, а также в диапазоне $9^\circ < \theta < 14^\circ$, $28^\circ < \theta < 32^\circ$ и $46^\circ < \theta < 51^\circ$.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-72-00138)

- [1] J. E. Weis, S. D. Costa, O. Frank, Z. Bastl, M. Kalbac, *Chem. Eur. J.*, **2015**, *21*, 1081-1087.
[2] A. R. Muniz and D. Maroudas, *J. Phys. Chem.*, **2013**, *117*, 7315-7325.

Полимерные композиционные материалы для сенсорной электроники

В. А. Кузнецов^{1,2}, А. А. Федоров^{1,2}, Д. И. Гапич^{1,2}, А. С. Чухарева^{1,2},
А. С. Буинов³, Б. Ч. Холхоев³, В. Ф. Бурдуковский³

¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, г. Новосибирск, 630090*

²*Новосибирский государственный технический университет,
просп. Карла Маркса, 20, г. Новосибирск, 630073*

³*Байкальский институт природопользования СО РАН,
ул. Сахьяновой, 6, г. Улан-Удэ, 670047
vitalii.a.kuznetsov@gmail.com*

Современная элементная база сенсорной электроники развита на достаточно высоком уровне, в том числе в области измерений механических величин. Классические сенсоры деформации, тензорезисторы, предназначены для решения ряда задач, включая задачи измерения развитых и больших деформаций, но выполнять такие измерения максимально допустимых деформаций является возможным только один раз ввиду механических характеристик материалов, используемых в тензорезисторах. Стоит отметить, что большинство коммерчески доступных тензорезисторов ограничено диапазоном малых деформаций. В этой связи последнее время активно развивается направление по созданию тензорезистивных элементов на основе полимерных композиционных материалов с наноструктурированными углеродными наполнителями в качестве электропроводящей фазы – механические свойства полимеров позволяют расширить диапазон измеряемых деформаций и количество циклов измерений по сравнению с классическими решениями. В настоящей работе приводятся результаты исследования тензорезистивных характеристик композитов на основе теплостойкого полибензимидазола (ПБИ) и биосовместимого полимера хитозана (ХЗ) с графитовыми наночастицами в качестве электропроводящей фазы. Исследование композитов на основе ПБИ показало устойчивость композитов и их работоспособность до как минимум +220°C. Композиты на основе ХЗ также проявляют тензорезистивные характеристики.

Для образцов на основе ПБИ измерены и проанализированы температурные зависимости электросопротивления – от 4,2 К до 573 К. За счёт того, что полуметаллические частицы электропроводящей фазы разделены диэлектрическими прослойками, в области низких температур наблюдается прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка. В области комнатных и высоких температур электронный транспорт осуществляется преимущественно туннелированием носителей заряда между частицами электропроводящей фазы. Для образцов на основе ХЗ также были измерены температурные зависимости электросопротивления – в диапазоне от 4,2 К до 300 К. Показано, что электронный транспорт осуществляется аналогичным образом.

Данные по электронному транспорту внесли существенный вклад в понимание физической природы тензорезистивного эффекта в композитах – изменение электросопротивления образцов при их деформации связано с изменением туннельных контактов между частицами электропроводящей фазы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Новосибирской области в рамках научного проекта № 19-42-543018 (работы по синтезу и исследованию композитов на основе полибензимидазола) и при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-33-90189 Аспиранты (работы по синтезу композитов на основе хитозана).

В каких экспериментах можно наблюдать s_{\pm} состояние необычного сверхпроводника?

М. М. Коршунов^{1,2}, В. А. Шестаков¹, Ю. Н. Тогушова²

¹Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН,
ул. Академгородок, г. Красноярск, 660036

²Сибирский федеральный университет,
пр. Свободный, 79, г. Красноярск, 660041
mkor@iph.krasn.ru

Для объяснения механизма сверхпроводимости в пниктидах и халькогенидах железа необходимо учитывать многоорбитальный характер зонной структуры [1], что приводит к возможности реализации сверхпроводимости с необычным параметром порядка. Наиболее вероятным кандидатом является параметр порядка, имеющий противоположные знаки на разных листах поверхности Ферми – так называемое s_{\pm} состояние [2]. Оно возникает за счёт спин-флуктуационного механизма куперовского спаривания. Для однозначного доказательства реализации данного состояния в сверхпроводниках на основе железа необходимо понять, каким образом и в каких экспериментах оно будет проявляться.

Для ответа на поставленный вопрос, мы рассматриваем особенности s_{\pm} состояния, вызванные как многозонным, так и знакопеременным его характером. Затем обсуждаем, как эти особенности будут проявляться в нескольких экспериментах: спин резонансный пик в неупругом рассеянии нейтронов [3], изменение лондоновской глубины проникновения магнитного поля при переходе из s_{\pm} в s_{++} состояние при рассеянии на примесях [4], спиновый экситон в спектрах многократного Андреевского отражения [5,6].

Рассматривая различные эффекты, мы формулируем критерии обнаружения параметра порядка с s_{\pm} структурой, что в дальнейшем позволит идентифицировать это состояние и, соответственно, подтвердить наличие спин-флуктуационного механизма формирования сверхпроводимости [1].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-90109, 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] М. М. Коршунов. *Усп. физ. наук.* **2014**, 184, 882.
- [2] P. J. Hirschfeld, M. M. Korshunov, I. I. Mazin. *Rep. Progr. Phys.* **2011**, 74, 124508.
- [3] M. M. Korshunov. *Phys. Rev. B.* **2018**, 98, 104510.
- [4] М. М. Коршунов, Ю. Н. Тогушова, О. В. Долгов. *Усп. физ. наук.* **2016**, 186(12), 1315.
- [5] T. E. Kuzmicheva, S. A. Kuzmichev, N. D. Zhigadlo. *Phys. Rev. B.* **2019**, 100, 144504.
- [6] D. Daghero et al. *Phys. Rev. B.* **2020**, 102, 104513.

Эволюция сверхпроводящих параметров порядка в пниктидах Ba(Fe,Ni)₂As₂ по данным спектроскопии многократных андреевских отражений

Т. Е. Кузьмичева¹, С. А. Кузьмичев^{2,1}, К. С. Перваков¹, В. А. Власенко¹

¹Физический институт РАН, Ленинский проспект 53, Москва, 119991

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы 1,
Москва, 119991

kuzmichevate@lebedev.ru

В работе исследована структура сверхпроводящего параметра порядка в монокристаллах слоистых железосодержащих пниктидов BaFe_{2-x}Ni_xAs₂ недо-, пере- и оптимально допированных составов с $x = 0.08-0.16$ и диапазоном $T_c \approx 7-20$ К. С помощью техники «break-junction» [1] в образцах создавались контакты сверхпроводник – тонкий металл – сверхпроводник (SnS). Эффект многократных андреевских отражений в таких контактах вызывает избыточный ток во всем диапазоне смещений и серию особенностей $dI(V)/dV$ -спектра, положение которых напрямую и локально определяет величину сверхпроводящей щели при температурах $0 < T < T_c$ [2,3].

Исследования BaFe_{1-x}Ni_xAs₂ [4] показали существование анизотропной большой щели с пороговыми значениями Δ_L^{out} и Δ_L^{in} и изотропной малой щели Δ_S , примерно линейно связанных с T_c . Их характеристические отношения $2\Delta_L^{out}/k_B T_c \approx 6$, $2\Delta_L^{in}/k_B T_c \approx 4$ и $2\Delta_S/k_B T_c \approx 2$ практически не меняются во всем исследованном диапазоне T_c (рис. 1). Температурные зависимости щелей типичны для случая умеренной межзонной связи, а анизотропия большой щели не зависит от температуры. Разрешенная тонкая структура $dI(V)/dV$ -спектров может быть вызвана резонансным взаимодействием с характерной бозонной модой (предположительно, спиновым экситоном) с энергией $\epsilon_0 < 2\Delta_L$.

Работа поддержана проектом РФФ № 19-72-00196.

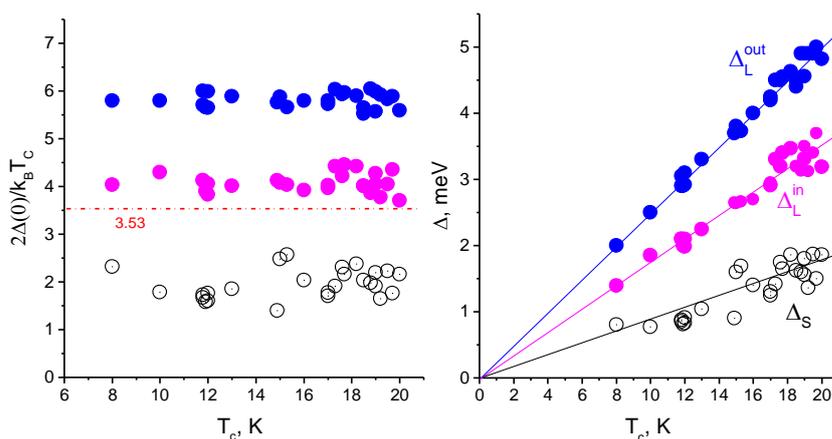


Рисунок 1 – Зависимость сверхпроводящих параметров порядка $\Delta_i(0)$ и их характеристических отношений от T_c для недо-, пере- и оптимально допированных Ba(Fe,Ni)₂As₂

[1] S.A. Kuzmichev, and T.E. Kuzmicheva, Low Temp. Phys. 42, 1008 (2016).

[2] M. Octavio, et al., Phys. Rev. B 27, 6739 (1983).

[3] R. Kümmel, et al, Phys. Rev. B 42, 3992 (1990).

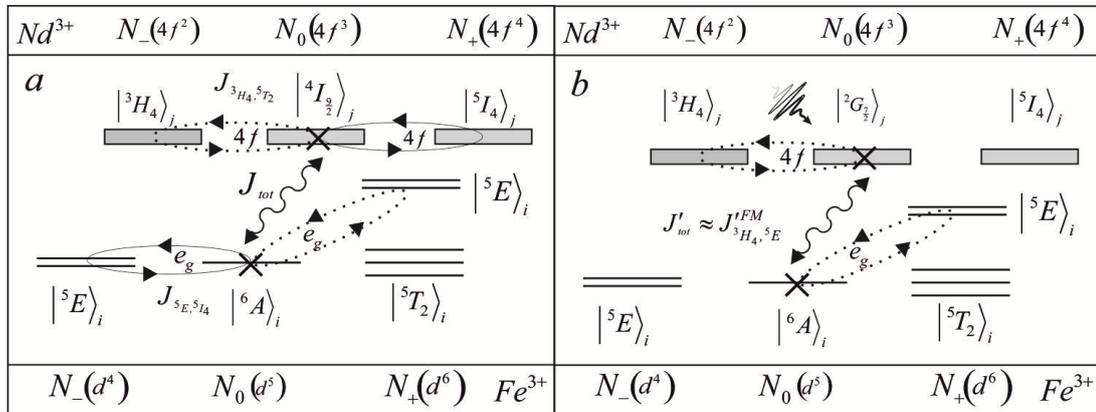
[4] T.E. Kuzmicheva, et al., Phys. Usp. 60, 419 (2017); Phys. Rev. B 97, 235106 (2018); JETP Lett. 112, 786 (2020).

Nd-Fe обменное взаимодействие в Nd ферроборате под резонансной оптической накачкой

В. А. Гавричков, А. В. Малаховский, С. Г. Овчинников

Институт физики им. Л.В. Куриенского СО РАН,
Академгородок, 50, стр.38, Красноярск, 660036
gav@iph.krasn.ru

Мы рассмотрели влияние оптической накачки на частоте f - f переходов на d - f суперобмен в АФМ ферроборате редкоземельных элементов $Nd_{0.5}Gd_{0.5}Fe_3(BO_3)_4$ между ионами Nd^{3+} в возбужденных состояниях ${}^4G_{5/2} + {}^2G_{7/2}$ и Fe^{3+} в основное состояние 6A_1 . В этом ферроборате суперобмен d - f напрямую связан с сильной магнитоэлектрической связью, наблюдаемой в основном состоянии материала. В магнитном поле, с установлением простого коллинеарного АФМ упорядочения между базисными гексагональными плоскостями, величина электрической поляризации достигает максимума.



Показано, что при оптической накачке на частоте f - f переходов ${}^4I_{9/2} \rightarrow ({}^4G_{5/2} + {}^2G_{7/2})$ в ионе Nd^{3+} характер d - f взаимодействия меняется на FM (см. Рисунок) [1]. Явление можно объяснить заселением возбужденных «спиновых чистых» состояний Nd^{3+} со спином 1/2, а также их смешиванием с оптическими возбужденными состояниями со спином 3/2 за счет спин-орбитального взаимодействия. В связи с высокими $T_C \sim 300K$, наблюдаемыми в редкоземельных оксидах с переходными элементами [2], рассмотрены специфические особенности d - f суперобмена, отсутствующие в d - d взаимодействии.

Работа поддержана грантом РФФИ 19-02-00034. В.А.Г. признателен также Российскому фонду фундаментальных исследований, Правительству Красноярского края и Красноярскому краевому фонду науки за выполнение исследовательского проекта «Исследования сверхобменных и электрон-фононных взаимодействий в коррелированных системах как основы для поиска перспективных функциональных материалов». № 20-42-240016

- [1] V.A.Gavrichkov, A.V.Malakhovskii, S.G.Ovchinnikov, submitted to Phys. Rev. B, **2021**;
 [2] J.Mandal, K.Yoshimura, B.J.Sarcar, A.K.Deb, and P.K.Chakrabarti, Journal of Electronic Materials, **2019**, 48, 12, 8047.

Наноструктура перовскитных ВТСП 2D материалов с нелокальными ионами

В. А. Гавричков

*Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН,
Академгородок, 50, стр.38, Красноярск, 660036
gav@iph.krasn.ru*

Работа указывает на любопытную интерпретацию страйповой структуры в перовскитных высокотемпературных сверхпроводниках. Действительно, мы показываем, что по крайней мере два разных страйпа U и D в $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ могут быть представлены как суперпозиция пары одинаковых страйпов, причем один из этой пары повернут по отношению к партнеру на угол $\theta_n = n(\pi/2)$. Основанием для этого вывода послужила возможность построения набора построения группы $G(\phi)$ из пары U и D страйпов, где умножение группы означает перекрытие повернутых страйпов U и(или) D страйпов, а групповая единица это идеальный CuO_4 -квадрат(CuO_6 -октаэдр) без какого-либо наклона [1]. Как следствие, вместо переходных стенок между различными страйпами возникают участки прямого перекрытия (новые D страйпы), размер которых сопоставим с размером исходных U страйпов ($\sim 10\text{\AA}$), а наноструктура материала содержит только U страйпы, повернутые относительно друг друга на угол θ_n и D области их перекрытия. Пространственное распределение U и D страйпов сводится ко всем возможным цветным “картам” в известной математической теореме о четырех красках [2]. Как периодические страйповые структуры, так и полностью случайные макроструктуры могут быть представлены с помощью плоских графов с хроматическим числом $r \leq 4$. Для наблюдаемых линейных (*linear stripe structures*) и шахматных (*chessboard stripe structures*) периодических структур группа $G(\phi)$ является группой симметрии. Для них действие любого элемента из group $G(\phi)$ приводит к простому сдвигу по группе, а исходная макроскопическая структура и соответствующая ей цветовая карта сохраняются. Как следствие, простое вращение направления наклона сразу всех CuO_6 октаэдров на угол кратный $\pi/4$ также приводит к воспроизведению исходной макроскопической структуры с той же последовательностью и размерами страйпов. Таким образом, туннелирование как плоскостных, так и апических ионов кислорода по различным позициям во всех возможных $U(\theta_n)$ and $D(\theta_n)$ страйпах воспроизводит “идеальную” $[\text{CuO}_2]^{2-}$ плоскость без наклонных октаэдров, где однако, ионы кислорода уже не локализованы.

Автор благодарен профессорам А. Бьянкони (г. Рим) и С.Г. Овчинникову (г. Красноярск) за внимание к данной деятельности.

[1] Vladimir A. Gavrichkov, Yury Shan'ko, Natalia G. Zamkova, and Antonio Bianconi, J. Phys. Chem. Lett. **2019**, 10, 1840–1844;

[2] J.J.O'Connor, E.F.Robertson. The four colour theorem. MacTutor History of Mathematics archive. School of Mathematics and Statistics, University of St Andrews, Scotland (1996).

Оптимизация параметров плазмостимулированного CVD-синтеза микрокристаллов алмазов на поверхности массивов УНТ

А. С. Матвеева, Д. В. Городецкий, К. И. Баскакова, А. Г. Куреня,
А. В. Гусельников, Л. Г. Булушева, А. В. Окотруб

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090
matveeva.sci@gmail.com*

В настоящее время большой научный и практический интерес представляют углеродные гибридные материалы. Особенно интересны гибриды углеродные нанотрубки (УНТ) / алмаз, применение которых возможно для весьма широкого диапазона приложений [1 – 5]. В настоящее время для синтеза УНТ и алмазов применяют метод химического осаждения из газовой фазы (Chemical vapor deposition – CVD). Однако формирование гибридных материалов алмаз/УНТ является сложной многопараметрической задачей, что связано с различием оптимальных условий CVD-синтезов УНТ и алмазов.

Формирование микрокристаллов алмазов проводилось плазмостимулированным CVD-методом, стимулированным микроволновым излучением, на поверхности массивов ориентированных УНТ. Гибридные структуры были получены при различной мощности СВЧ-плазмы, и при разном времени синтеза. В качестве плазмообразующего газа выступал водород, ионизируемый микроволновым излучением частотой 2,45 ГГц мощностью до 3 кВт. Время синтеза варьировалось от 1 до 3 ч. Рабочее давление в камере составляло 110 торр. В качестве углеродного предшественника использовался пентан. Образцы исследованы методами оптической и электронной микроскопией, спектроскопией комбинационного рассеяния света.

Экспериментально выявлены качественные взаимосвязи структуры алмазных кристаллитов с мощностью СВЧ-плазмы и временем синтеза в условиях плазмостимулированного CVD-процесса. Установлено, что повышение мощности СВЧ-плазмы и продолжительности синтеза приводит к снижению дефектности алмазных частиц, а также к увеличению среднего размера кристаллитов.

- [1] H. Zanin et al. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2013**, 5, 12238.
- [2] Y. M. Ho et al. *Nanotechnology*, **2008**, 19, 065710.
- [3] R. Sharma. *J. Pure Appl. & Ind. Phys*, **2012**, 2, 328.
- [4] M. Girolami et al. *Carbon*, **2017**, 111, 48.
- [5] P. Calvani et al. *Carbon*, **2016**, 105, 401.

Стабилизирующие и пассивирующие свойства сверхтонкого собственного оксида HgCdTe, сформированного в кислородной плазме тлеющего разряда

Е. Р. Закиров, В. Г. Кеслер, Г. Ю. Сидоров

*Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 13, Новосибирск, 630090
erzakirov@isp.nsc.ru*

Стабилизация и пассивация поверхности полупроводника являются одним из важнейших технологических этапов изготовления фотоприёмных устройств, роль которого особенно возрастает в случае узкозонных полупроводников, используемых в ИК-технике [1]. Для обеспечения высоких технических характеристик ИК-детекторов необходимо достижение высокого качества поверхности полупроводника и его гетерограниц (границ раздела с другими материалами: диэлектриком, металлом, полупроводником). В противном случае фотоэлектрические параметры приборов будут ограничены вкладом генерационно-рекомбинационных процессов, протекающих на поверхности (границе раздела) полупроводника.

Полупроводниковое соединение теллурид кадмия–ртути (HgCdTe, КРТ) обладает уникальными электрофизическими свойствами, обуславливающими его широкое применение и потенциал дальнейшего развития в ИК-технике. Однако наряду с ними имеются и недостатки, которые по-прежнему необходимо преодолеть для реализации этого потенциала. К ним можно отнести высокую чувствительность поверхности КРТ к внешним физическим, химическим и термическим воздействиям и сложность достижения высоких электрофизических качеств гетерограниц КРТ. Разработка методов стабилизации и пассивации КРТ нацелена на решение этих проблем и развитие технологий изготовления многоэлементных фотоприёмных устройств ИК-диапазона.

Предложенный нами подход заключается в формировании сверхтонкого (< 5 нм) собственного оксида КРТ при комнатной температуре в кислородной плазме тлеющего разряда и последующем атомно-слоевом осаждении (АСО) защитного либо подзатворного диэлектрика при температуре не более 120 °С. В ходе его разработки методом РФЭС были исследованы начальные стадии окисления HgCdTe в плазме тлеющего разряда, получена и проанализирована кинетика окисления. Также с помощью РФЭС показаны стабилизирующие свойства собственного оксида КРТ толщиной ~ 2 нм при нагреве КРТ в вакууме и при осаждении на его поверхность платины методом электронно-лучевого испарения. Методом анализа вольт-фарадных характеристик (ВФХ) структур металл–диэлектрик–полупроводник (МДП) впервые было показано, как исходное состояние поверхности HgCdTe, а также происхождение собственного оксида HgCdTe влияют на электрофизические параметры гетерограницы АСО Al₂O₃–HgCdTe.

Применение предложенного, разработанного и детально изученного подхода по стабилизации и пассивации КРТ позволило получить близкие к идеальным ВФХ МДП-структур, достичь значений плотности быстрых и медленных поверхностных состояний ~ 1·10¹⁰ см⁻²эВ⁻¹ и ~ 4–5·10¹¹ см⁻²эВ⁻¹ соответственно.

Авторы выражают благодарность коллективу Лаборатории молекулярно-лучевой эпитаксии соединений А₂В₆ ИФП СО РАН за предоставленные образцы теллурида кадмия–ртути.

[1] A. Rogalski. *Rep. Prog. Phys.*, **2005**, 68, 2267.

Исследование термоэлектрических свойств моно- и поликристаллов теллурида висмута с замещениями

М. В. Дрожжин^{1,2}, А. И. Романенко¹, Г. Е. Чебанова¹,
И. Н. Катаманин^{1,2}, М.-К. Хан³, S.-J. Kim³, Hongchao Wang⁴

¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090*

²*Новосибирский государственный технический университет,
просп. Карла Маркса, 20, Новосибирск, 630073*

³*Department of Chemistry and Nano Science, EwhaWomans University,
Seoul 120-750, Korea*

⁴*School of Physics, State Key Laboratory of Crystal Materials, Shandong University,
Jinan 250100, PR China*

drozhzhin.mi@yandex.ru

Выросший в последнее время интерес к термоэлектрическим материалам связан как с необходимостью масштабного освоения экологически безопасных источников энергии, так и с разработкой новых физических и технологических подходов к получению высокоэффективных термоэлектрических материалов. Однако общим недостатком таких материалов является их сравнительно невысокая эффективность, что препятствует масштабному промышленному применению термоэлектрических преобразователей энергии[1].

Данная работа посвящена исследованию температурных зависимостей удельного электросопротивления и термоЭДС моно- и поликристаллических слоистых образцов чистого Bi_2Te_3 и допированных $\text{Bi}_2\text{Te}_3+\text{CuI}$, $\text{Bi}_2\text{Te}_3+\text{CuI}+1/2\text{Pb}$, в диапазоне температур от комнатной до температуры жидкого гелия (4,2-300 К).

Ранее мы сообщали, что обнаружили отклонение, от теоретически ожидаемых, на графиках удельного сопротивления от температуры $\rho(T)$ в области температур 120-200 К. Такое поведение удельного сопротивления наблюдается как для моно-, так и для поликристаллических образцов, что указывает на структурный фазовый переход. В подтверждение к этому на кривых теплоемкости $C_p(T)$ пик в данном интервале температур, что соответствует изменениям в кристаллической решётке материала (фазовый переход II-рода).

В заключении мы рассчитали показатели термоэлектрической добротности ZT для всех образцов, используя данные, полученные в ходе экспериментов, и значения теплопроводностей для наших образцов, опубликованных ранее нашими корейскими соавторами [2]. Для поликристаллических образцов наблюдается уменьшение показателя ZT при допировании (максимальное значение у чистого Bi_2Te_3 $ZT \sim 0.5$). У монокристаллических наоборот, т.е. у чистого Bi_2Te_3 значение $ZT \sim 0.45$, а максимальное значение у образца $\text{Bi}_2\text{Te}_3+1\%(\text{CuI}+1/2\text{Pb})$ полученного вдоль оси роста кристалла и составляет $ZT \sim 1.1$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 21-53-53008 ГФЕН_а).

[1]. Любушкин Р.А. Материаловедение и технология материалов /Р.А. Любушкин. – Белгород: НИУ «БелГУ», 2013.-61 с.

[2]. М.-К. Хан, Y. Jin, D.-H. Lee, S.-J. Kim. “Thermoelectric Properties of Bi_2Te_3 : CuI and the Effect of Its Doping with Pb Atoms” // Materials 10, 1231- (2017).

Построение самосогласованной процедуры расчёта функции Грина с учётом сильного электрон-фононного взаимодействия

Р. А. Кальдин, С. В. Николаев

Сибирский федеральный университет,
пр. Свободный, 79, Красноярск, 660041
rogen9@gmail.com

Купратные сверхпроводники – это семейство высокотемпературных сверхпроводящих материалов, состоящих из слоев оксидов меди (CuO_2), чередующихся со слоями оксидов других металлов. Здесь мы рассматриваем реалистичную двумерную многозонную pd -модель купратов - исходных соединений высокотемпературных сверхпроводников. Эти материалы, как и другие оксиды переходных металлов, характеризуются сильными электронными корреляциями, которые в недопированных системах приводят к основному состоянию – изолятор Мотта-Хаббарда. Сильное электрон-фононное взаимодействие также задокументировано экспериментально.

Чтобы учесть перераспределение спектрального веса между квазичастицами в коррелированной системе, используется представление операторов Хаббарда. Также применяется метод проекционного оператора в уравнении движения для функции Грина. Этот метод позволяет вывести уравнение типа Дайсона для произвольной функции Грина с собственной энергией, аналогичной проекционной технике Мори.

Последовательно дифференцируя каждую функцию Грина по времени t и t' и используя проекционную технику, мы получаем уравнения Дайсона

$$\hat{G}_{k,\sigma}^{-1}(\omega) = \left(\hat{G}_{k,\sigma}^0(\omega) \right)^{-1} - \Sigma_{k,\sigma}(\omega), \quad \hat{D}_q^{-1}(\omega) = \left(\hat{D}_q^0(\omega) \right)^{-1} - \Pi_q(\omega)$$

Формула 1 – Уравнения Дайсона для электронной и фононной функций Грина

Имея явный вид оператора собственной энергии $\Sigma_{k,\sigma}(\omega)$ для частиц и поляризационного оператора $\Pi_q(\omega)$ для фононов, можно самосогласованно решить уравнения Дайсона в последовательной процедуре: подставляя функции Грина в операторы собственной энергии, получить новые функции Грина, более точные. Процедура циклически продолжается до тех пор, пока не будет достигнута необходимая точность сходимости.

Именно такая численная схема была применена в [1]. Используя также приближение среднего поля, авторы описали эволюцию зонной структуры, поверхности Ферми, плотности состояний на уровне Ферми и фононной спектральной функции.

Эти результаты являются основой для дальнейших вычислений за средним полем. Предполагается усовершенствовать численную схему таким образом, чтобы необходимая сходимость была достигнута, без привлечения приближения среднего поля.

Настоящее исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта «Исследования суперобменного и электрон-фононного взаимодействий в коррелированных системах как основа поиска перспективных функциональных материалов» № 20-42-240016.

[1] E. I. Shneyder, S. V. Nikolaev, M. V. Zotova. *Physical Review B*, **2020**. 101, №. 23, С. 235114.

Влияние дополнительного слоя селена на электронную структуру FeSe/SrTiO₃

Л. В. Бегунович^{1,2}, М. М. Коршунов^{1,2}

¹Сибирский федеральный университет,
пр. Свободный, 79, Красноярск, 660041

²Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, ФИЦ КИЦ СО РАН,
ул. Академгородок, 50/38, Красноярск, 660036
lyuda.illuzia@gmail.com

Особое внимание привлекают железосодержащие сверхпроводники с высокими значениями критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние T_c . Рекордсменом по значению T_c при атмосферном давлении является монослой FeSe на подложке SrTiO₃. В рамках современных методов расчёта не удаётся воспроизвести топологию поверхности Ферми, которую измеряют в ARPES (Angle resolved photoemission spectroscopy). Одна из возможных причин расхождения теоретических и экспериментальных данных – это сложная структура интерфейса. Было проведено несколько экспериментальных исследований, которые выявили присутствие двух слоёв TiO_x на поверхности SrTiO₃, а также дополнительный слой селена, расположенный между монослоем FeSe и подложкой [1].

В настоящей работе методами теории функционала плотности смоделирована атомная и электронная структура интерфейса FeSe/Se/(2TiO_x)SrTiO₃ с дополнительным слоем селена, в котором подложка SrTiO₃ оканчивается двойным TiO_x слоем (рисунок 1). Определены энергетически предпочтительные положения атомов Se, как в бездефектной структуре, так и в структуре с вакансиями по кислороду в верхнем Ti-O слое. Показано, что дополнительный слой Se не способствует исчезновению дырочных карманов в Γ точке. В присутствии вакансий кислорода, атом селена локализует на себе заряд, препятствуя его переносу с подложки на монослой FeSe [2].

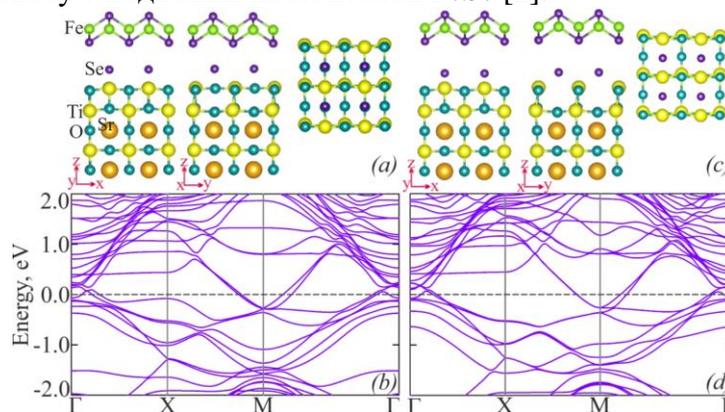


Рисунок 1 Атомная и зонная структура для FeSe/Se/(2TiO_x)SrTiO₃ без вакансий (a, b) и с вакансиями по кислороду в верхнем слое Ti-O (c, d)

Расчёты проведены на оборудовании ИВЦ НГУ. Исследование выполнено при финансовой поддержке 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] W. Zhao, M. Li, C.Z. Chang, J. Jiang, L. Wu, C. Liu, J.S. Moodera, Y. Zhu, M.H.W. Chan. *Science Advances*, **2018**, 4, eaao2682.

[2] L.V. Tikhonova, M.M. Korshunov. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, **2020**, 33, 171.

Первопринципные расчёты магнитных свойств одноосного кирального гелимагнетика CrNb_3S_6

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

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, 644077
evsindv@stud.omsu.ru

В данной работе проводились расчёты магнитных свойств одноосного кирального гелимагнетика CrNb_3S_6 [1] первопринципными методами. Использовался пакет VASP (Vienna Ab Initio Simulation Package) - это комплексный пакет для выполнения ab initio квантового механического моделирования с использованием псевдопотенциалов или метода проекционных волн и базисного набора плоских волн. Подход, реализованный в VASP, основан на приближении локальной плотности (конечной температуры) со свободной энергией как вариационной величиной и точной оценке мгновенного основного состояния электрона на каждом временном шаге. VASP использует эффективные схемы диагонализации матрицы и эффективное смешение плотности заряда Бройдена. Взаимодействие между ионами и электронами описывается методом проекционно-усиленной волны (PAW). PAW позволяет значительно уменьшить количество плоских волн на атом для переходных металлов и элементов первого ряда. Силы и полный тензор напряжений могут быть рассчитаны с помощью VASP и использованы для релаксации атомов в их мгновенное основное состояние.

Кристаллическая структура исследуемой системы CrNb_3S_6 представлена на рис.1. В расчётах гелимагнитной пленки использовалась 20-ти атомная суперъчейка с постоянной решетки $a = 10.84892$ а.е.; число k-точек сетки Монкхорста-Пака принималось равным 16; энергия обрезания – 500 эВ; вакуумный слой – 5 Å; вектор распространения спирали $q = 0,5a$ направлен вдоль оси y .

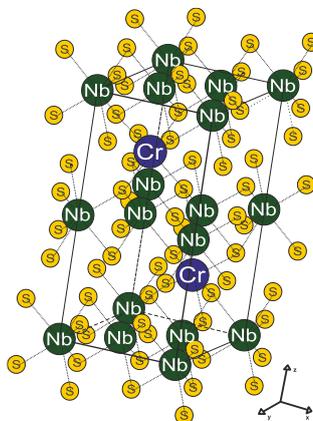


Рисунок 1 – Структура суперъчейки одноосного гелимагнетика CrNb_3S_6

В ходе расчётов были получены следующие значения проекций намагниченности магнитных моментов двух атомов хрома: $\mu_x(\text{Cr}_1) = 0,045$, $\mu_y(\text{Cr}_1) = 1,866 \mu_B$, $\mu_x(\text{Cr}_2) = -0,039 \mu_B$, $\mu_y(\text{Cr}_2) = 1.861 \mu_B$. Так же было получено значение полной энергии системы $E_{\text{tot}} = -141.30798 \mu_B$.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и грантом МД-2229.2020.2 Президента РФ. Для проведения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН», Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН, Суперкомпьютерного центра МГУ им. М.В. Ломоносова.

[1] Y. Togawa, Y. Kousaka, K. Inoue, J. Kishine. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **2016**, 85, 112001.

Методы формирования низкоразмерных структур из тонких магнитных плёнок для устройств спинтроники

А. В. Лукьяненко^{1,2}, А. С. Тарасов^{1,2}, М. В. Рауцкий¹, Т. Е. Смолярова^{2,3},
И. А. Бондарев^{2,3}, Л. В. Шанидзе³ и Н. В. Волков¹

¹Институт физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН,
ул. Академгородок, 50/38, Красноярск, 660036

²Сибирский Федеральный Университет, ИИФиРЭ,
ул. Киренского, 28, Красноярск, 660074

³Федеральный исследовательский центр Красноярский научный центр СО РАН
ул. Академгородок, 50, Красноярск, 660036
lav@iph.krasn.ru

Устройства на основе новых материалов и совместимые с КМОП и КНИ в настоящее время активно исследуются научными группами. Такие устройства могут быть изготовлены с применением современных производственных мощностей. В этой работе представлен ряд методов микро- и наноразмерных модификаций поверхности, которые мы используем для получения структур для исследования различных физических явлений.

Многие фундаментальные исследования требуют формирования экспериментальной геометрии [1]. Распространён подход формирования различных структур и устройств по нисходящей технологии, с использованием процессов литографии и химического травления. Процесс жидкого химического травления широко распространён во многих областях науки и техники и также применяется для создания 2D материалов.

Одними из новых и перспективных 2D материалов являются MXenes. MXenes - это 2D материалы семейства карбидов, карбидов и нитридов переходных металлов [2]. Для получения MXenes из МАХ-фаз используется мокрое химическое травление [3]. Этот новый класс 2D материалов обладает захватывающими физическими и химическими свойствами. MXenes имеют широкий потенциал применения и могут быть легко получены в больших количествах в водных растворах. Использование подхода с применением мокрого химического травления подразумевает разделение слоистых твердых тел. Хлопья MXenes в основном получают из МАХ-фаз, в которых слои элементов М-А довольно прочно связаны друг с другом комбинацией ковалентных и металлических связей [4]. Поэтому основные проблемы - это найти подходящий раствор для травления и выбрать комбинацию интеркалянта и растворителя.

В работе рассматриваются экспериментальные методы и технологические подходы, которые могут быть применены для проектирования и создания устройств и 2-D материалов для микро-, наноэлектроники и спинтроники. Возможно, сочетание рассмотренных методов с традиционными электронными технологиями позволит расширить функции существующих устройств.

Работа выполнена при финансовой поддержке Правительства Российской Федерации в рамках гранта на создание лабораторий мирового уровня (Соглашение № 075-15-2019-1886).

[1] Tarasov A. S. et al. *Thin Solid Films*, **2017**, 642, 20-24.

[2] Kim P. D. et al. *The European Physical Journal B*, **2018**, 91, № 5, 90.

[3] Verger L. et al. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, **2019**, 23, № 3, 149-163.

[4] Barsoum M. W. – *John Wiley & Sons*, **2013**

Низкоэнергетическая модель спин-поляризованной сверхпроводящей нанопроволоки в режиме сильных электронных корреляций

М. С. Шустин^{1,2}

¹Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН,
Академгородок, 50/38, Красноярск, 660036

²Сибирский федеральный университет,
просп. Свободный, 82А, Красноярск, 660041
mshustin@yandex.ru

Недавно было проведено исследование [1] транспортных свойств гибридной структуры Al-EuS-InAs, представляющей собой полупроводниковую нанопроволоку InAs, на поверхность которой эпитаксиальным образом напылялись тонкие слои Al и EuS, ответственные за индуцирование в нанопроволоке, соответственно, наведенной сверхпроводимости и магнитных корреляций. Была продемонстрирована устойчивость квантованного пика дифференциальной проводимости при изменении параметров структуры. Возникновение такого пика связывалось с реализацией в системе топологической фазы с майорановскими модами [2], однако на эту тему ведутся активные дискуссии [3]. С другой стороны, исследования ансамбля нанопроволок InAs в режиме низкой концентрации носителей указывали на реализацию в системе жидкости Латтинжера и сильных электронных корреляций [4]. Таким образом, в настоящее время стал актуальным вопрос об исследовании свойств сверхпроводящих нанопроволок в режиме совместной реализации наведенных магнитных корреляций и сильных электрон-электронных взаимодействий.

В докладе показывается, что модель сверхпроводящей нанопроволоки с сильным спин-орбитальным взаимодействием Рашбы в режиме высокой спиновой поляризации и сильных электронных корреляций может быть эффективно рассмотрена в рамках модели одномерного ансамбля бесспиновых фермионов с многоцентровыми взаимодействиями и наведенной сверхпроводимостью. Майорановские моды в такой модели формируются при доминировании одночастичных процессов рождения и уничтожения фермионов, однако степень их локализации уменьшается с увеличением интенсивности кулоновских взаимодействий. Отмеченная эффективная модель, с одной стороны, качественно описывает низкотемпературные свойства гибридной системы Al-EuS-InAs, а с другой стороны позволяет получить информацию о свойствах топологических возбуждений в аналитической или максимально наглядной форме.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-02-00348), Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта: «Спиновые флуктуации и магнитный порядок в проблеме реализации майорановских мод в низкоразмерных системах», (№ 20-42-243001). Автор выражает благодарность за поддержку фонду развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

[1] S. Vaitiekėnas, Y. Liu, P. Krogstrup, C. M. Marcus, *Nature Physics*, 2020, 17, 43.

[2] A. Y. Kitaev, *Phys. Usp.*, **2001**, 44, 131.

[3] P. Yu, J. Chen, M. Gomanko, et al. *Nature*, **2021**, 17, 482.

[4] Y. Sato, S. Matsuo, C.-H. Hsu, et al. *Phys. Rev. B*, **2019**, 99, 155304.

Исследование пространственной структуры бионаноконъюгатов на основе ДНК-аптамеров синхротронными методами

Р. В. Морячков^{1,2}, В. Н. Заблуда¹, И. А. Щугорева^{1,2}, П. В. Артющенко^{1,2},
А. С. Кичкайло^{1,2}, В. А. Спиридонова⁴, А. Н. Берлина⁵, А. Э. Соколов¹

¹Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН,
ул. Академгородок, 50, стр. 38, Красноярск, 660036

²Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр СО РАН»,
ул. Академгородок, 50, Красноярск, 660036

³Красноярский государственный медицинский университет им. проф. В.Ф. Войно-
Ясенецкого, ул. Партизана Железняка, 1, Красноярск, 660022

⁴НИИ физико-химической биологии им. А.Н. Белозёрского МГУ,
Ленинские горы, 1, стр. 40, Москва 119991

⁵Институт биохимии им. А.Н. Баха, ФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии»
РАН, Ленинский проспект, д. 33, стр. 2, Москва, 119071
mrv@iph.krasn.ru

С появлением современных методов исследования, создания наноразмерных объектов и манипулирования ими появилась возможность разрабатывать управляемые конструкции, которые могут быть применены в целях медицины и биотехнологии. Данные конструкции представляют собой конъюгаты наночастиц или различных функциональных материалов с биологическими молекулами, которые используются для доставки лекарств или в качестве средств диагностики. Подобные разработки имеют большие перспективы по широте и разнообразию практических приложений.

В роли биомолекул-доставщиков лекарств могут выступать аптамеры – короткие последовательности ДНК или РНК, трёхмерная структура которых обеспечивает их специфическое связывание с молекулярной мишенью, к которой они селективно отбираются. Для более глубокого понимания, как происходит молекулярное узнавание аптамером мишени, за счёт каких химических связей обеспечивается высокое сродство к мишени, для поиска путей оптимизации молекулы аптамера, модификации её для образования конъюгатов, необходимо знать их пространственную структуру.

Далеко не все методы структурного анализа применимы к аптамерам: они почти не поддаются кристаллизации и поэтому недоступны для рентгеновской дифракции, имеют в структуре несколько тысяч атомов, что усложняет исследования методами ЯМР. Это гибкие молекулы, для которых наиболее применимыми методами должны быть те, которые возможно использовать напрямую в растворе.

Основным методом исследования молекул аптамеров выбран метод малоуглового рентгеновского рассеяния [1], который позволяет изучать структуры биомолекул в дисперсном растворе, отслеживать изменения конформации молекул при изменении условий внешней среды, изучать молекулярные комплексы, совмещать полученные данные с другими комплементарными методами.

В данной работе представлены результаты исследования биологических макромолекул ДНК-аптамеров с использованием синхротронных и спектральных методов, техники проведения измерений, основные результаты и выводы, позволяющие судить о перспективности данного направления при исследовании структуры и функциональных свойств аптамеров - синтетических олигонуклеотидов, используемых для целей персонализированной медицины.

[1] S. Da Vela, D. I. Svergun *Cur. Res. in Struct. Biol.*, **2020**, 2, 164-170.

Научное издание

**XIII Сибирский семинар по высокотемпературной
сверхпроводимости и физике наноструктур ОКНО-2021**

Сборник тезисов докладов

Ответственные за выпуск
к.ф.-м.н. Е.Н. Ткачев, к.т.н. В.А. Кузнецов

Техническое редактирование и верстка
Е.Н. Ткачев

Дизайн обложки
Анна Мухачева

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения РАН
Просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090

Отпечатано в типографии Новосибирского
Государственного технического университета
630073, г.Новосибирск, пр. К. Маркса, 20,
Тел./факс (383) 346-08-57
Формат 60 x 84/8. Объем 6,5 п.л. Тираж 100 экз.
Заказ 575. Подписано в печать 21.05.2021 г.