

**ИНТЕРНЕТ-СЕССИЯ  
секции “Магнетизм”  
Научного совета РАН по физике  
конденсированных сред**

9 декабря 2021 г.

Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН

Оглавление и аннотации докладов.

## Оглавление

### **Магنونика**

- 1. Управляемая электрическим полем перестройка спин-волновых характеристик в параллельно ориентированных магнноно-кристаллических структурах с пьезо-электрическим слоем**

А.А. Грачев<sup>1</sup>, М. Mruczkiewicz<sup>2</sup>, С.А. Никитов<sup>3,4</sup>, А.В. Садовников<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия

<sup>2</sup> Institute of Electrical Engineering, Slovak Academy of Sciences, Bratislava, Slovakia

<sup>3</sup> Московский физико-технический институт (государственный университет), Долгопрудный, МО

<sup>4</sup> Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия

----- стр. 9-11 -----

- 2. Концепция 3D магнонных кристаллов**

Е.Н. Бегинин<sup>1</sup>, А.В. Садовников<sup>1</sup>, С.А. Никитов<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Национальный исследовательский университет им. Н.Г. Чернышевского (СГУ), Саратов, Россия

<sup>2</sup> Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия

----- стр. 12-14 -----

### **Спинтроника, наночастицы**

- 3. Спин флор переход в искусственных коллинеарных ферромагнетиках**

Н.О. Антропов, Е.А. Кравцов, М.В. Макарова, В.В. Пролядо, Н.Г. Бебенин, М.А. Миляев, В.В. Устинов

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

----- стр. 15-18 -----

- 4. Гибкие спиновые клапаны: межслойное взаимодействие, магнитная анизотропия и деформационная чувствительность**

Л.И. Наумова, Р.С. Заборницын, М.А. Миляев, И.К. Максимова, А.А. Захаров, Т.А. Чернышова, В.В. Пролядо, В.В. Устинов

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

----- стр. 19-21 -----

**5. Особенности проявления ферромагнетизма и спинодальный распад в ионно-синтезированных сплавах палладия с железом**

Р.И. Хайбуллин<sup>1</sup>, В.Ф. Валеев<sup>1</sup>, А.И. Гумаров<sup>1,2</sup>, И.И. Гумарова<sup>1,2</sup>, Н.М. Лядов<sup>1</sup>,  
В. И. Нуждин<sup>1</sup>, Л.Р. Тагиров<sup>1,2</sup>, Р.В. Юсупов<sup>2</sup>, И. В. Янилкин<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия

<sup>2</sup> Институт физики, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

----- стр. 22-23 -----

**6. Аномальные магнитные свойства микро- и наноразмерных порошков фторидов редких земель**

Е.М. Алашкин<sup>1,2</sup>, А.Ю. Андреев<sup>1</sup>, А.М. Гараева<sup>1</sup>, А.Г. Киямов<sup>1</sup>, Е.И. Кондратьева<sup>1,2</sup>,  
И.В. Романова<sup>1</sup>, А.С. Сахацкий<sup>3</sup>, А.С. Семакин<sup>1</sup>, М.А. Черосов<sup>1</sup>, М.С. Тагиров<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт физики КФУ, Казань, Россия

<sup>2</sup> Академия наук Республики Татарстан, Казань, Россия

<sup>3</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

----- стр. 24-25 -----

**7. Применение магнитных наночастиц для бионженерии и наномедицины**

А.С. Минин<sup>1</sup>, М.А. Уймин<sup>1</sup>, А.С. Конев<sup>1</sup>, И.В. Зубарев<sup>2</sup>, А.М. Демин<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург

<sup>2</sup> Московский физико-технический институт, г. Москва

<sup>3</sup> Институт органического синтеза имени И.Я. Постовского УрО РАН, г. Екатеринбург

----- стр. 26-28 -----

**8. Магнитная сепарация фотокаталитических наночастиц TiO<sub>2</sub> от водных суспензий**

Ю.А. Бахтеева, И.В. Медведева, С.В. Жаков, М.А. Уймин, М.С. Филинкова,  
И.В. Бызов, А.М. Мурзакаев<sup>1</sup>

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

<sup>1</sup> Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург

----- стр. 29-31 -----

**9. Методика анализа экспериментальных данных спектральной магнитооптической эллипсометрии при проведении in situ исследований магнитных наноструктур**

О.А. Максимова<sup>1,2</sup>, С.А. Лященко<sup>1</sup>, И.А. Тарасов<sup>1</sup>, И.А. Яковлев<sup>1</sup>, Д.В. Шевцов<sup>1</sup>,  
С.Н. Варнаков<sup>1</sup>, Овчинников С.Г.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт физики им. Л.В.Киренского Сибирского отделения РАН – обособленное подразделение Федерального исследовательского центра “Красноярский научный центр Сибирского отделения РАН”, 660036 Красноярск, Россия

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

----- стр. 32-34 -----

**10. Прямое наблюдение топологического эффекта Холла в наноструктурированных пленках Co/Pt**

М.В. Сапожников<sup>1</sup>, Н.С. Гусев<sup>1</sup>, С.А. Гусев<sup>1</sup>, А.А. Фраерман<sup>1</sup>, Ю.В. Петров<sup>2</sup>,  
А.Г. Темиряев<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Институт Физики Микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия*

<sup>2</sup>*Санкт-Петербургский государственный университет, Россия*

<sup>3</sup>*Фрязинский филиал Института радиотехники и электроники РАН, Россия*

----- стр. 35-37 -----

**11. Доменные стенки в пленках с анизотропным взаимодействием Дзялошинского-Мория**

М.В. Сапожников<sup>1</sup>, Р.В. Горев<sup>1</sup>, Н.С. Гусев<sup>1</sup>, О.Г. Удалов<sup>1,2</sup>, А.В. Садовников<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт Физики Микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия*

<sup>2</sup>*Саратовский государственный университет, Россия*

----- стр. 38-40 -----

**Спиновая динамика, спектроскопия, магнитный резонанс**

**12. Управление спектром магнитостатических волн, оптически возбуждаемых в ферромагнитных анизотропных пленках**

Н.Е. Хохлов, Я.А. Филатов, П.И. Геревенков, А.М. Калашникова

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

----- стр. 41-44 -----

**13. Настраиваемые ферромагнетики для терагерцовой электроники**

Л.Н. Алябьева<sup>1</sup>, Е.А. Горбачев<sup>2</sup>, Л.А. Трусов<sup>1,2</sup>, П.Е. Казин<sup>2</sup>, Б.П. Горшунов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, МО*

<sup>2</sup>*Московский Государственный Университет, Москва*

----- стр. 45-47 -----

**14. Антиферромагнитный резонанс в индуцированной полем упорядоченной фазе квантового анизотропного антиферромагнетика NiCl<sub>2</sub>-4SC(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>**

А.И. Смирнов<sup>1</sup>, Т.А. Солдатов<sup>1</sup>, В.Н. Глазков<sup>1</sup>, К.Ю. Поваров<sup>2</sup>, А. Падуан-Фильхо<sup>3</sup>,  
А.И. Желудев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*ETH Zurich, Switzerland*

<sup>3</sup>*University of São Paulo, Brazil*

----- стр. 48-49 -----

15. **Анализ микроволновых резонансных свойств композитных сред с нано- и микроразмерными ферромагнитными частицами различной формы**  
Д.В. Перов, А.Б. Ринкевич  
*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург*  
----- стр. 50-52 -----
16. **Магнитный порядок и спиновая динамика  $5f$  электронов в моонитриде урана**  
В.В. Оглобличев, С.В. Верховский, А.В. Мирмельштейн<sup>1</sup>, Ю.В. Пискунов,  
А.Ф. Губкин, А.Ю. Гермов, А.В. Андреев<sup>2</sup>, А.М. Потапов<sup>3</sup>  
*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург*  
<sup>1</sup> *Российский федеральный ядерный центр - Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. академика Е.И. Забабахина, г. Снежинск*  
<sup>2</sup> *Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения РАН*  
<sup>3</sup> *FZU Institute of Physics, Czech Academy of Sciences, Prague, Czech Republic*  
----- стр. 53-55 -----
17. **Упорядочение в магнитном поле и спиновая динамика в  $\text{Cu}_2\text{GaVO}_5$  и  $\text{Cu}_2\text{AlVO}_5$  людовигитах**  
Р.М. Еремина<sup>1</sup>, Т.П. Гаврилова<sup>1</sup>, Е.М. Мошкина<sup>2</sup>, С.Н. Софронова<sup>2</sup>, Д.С. Иносов<sup>3</sup>,  
В.В. Гуржий<sup>4</sup>  
<sup>1</sup> *Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия*  
<sup>2</sup> *Институт физики им. Л.В.Киренского, Федеральный исследовательский центр КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия*  
<sup>3</sup> *Институт физики твердого тела и материалов, Дрезден, Германия*  
<sup>4</sup> *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*  
----- стр. 56-57 -----
18. **Неоднородное магнитное состояние пленок  $\text{YFeO}_3$  по данным ЯМР спектроскопии**  
А.П. Носов, В.В. Оглобличев, В.И. Изюров, Ю.В. Пискунов, А.Г. Смольников,  
А.Ф. Садыков, С. А. Чупраков, С.С. Дубинин, С.В. Наумов  
*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург*  
----- стр. 58-60 -----
19. **Терагерцовая спектроскопия магнитоэлектрика  $\text{HoAl}_3(\text{VO}_3)_4$**   
А. М. Кузьменко<sup>1</sup>, В. Ю. Иванов<sup>1</sup>, А. Ю. Тихановский<sup>1</sup>, А. Г. Пименов<sup>2</sup>, А. М. Шуваев<sup>2</sup>,  
И. А. Гудим<sup>3</sup>, А. А. Мухин<sup>1</sup>  
<sup>1</sup> *Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия*  
<sup>2</sup> *Institute of Solid State Physics, Vienna University of Technology, Vienna, Austria*  
<sup>3</sup> *Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия*  
----- стр. 61-63 -----

20. **Применение магнитного псевдорезонанса для изучения анизотропии магнито-сопротивления в тонких ферромагнитных плёнках**  
В. А. Ацаркин, В. В. Демидов, Г. А. Овсянников, Т. А. Шайхулов  
*ИРЭ им. В. А. Котельникова РАН*

----- стр. 64-65 -----

## **Магнитные структуры и фазовые переходы, магнетокалорика**

21. **Индукированные магнитным полем фазовые переходы в высокоанизотропных ферримагнетиках  $RFe_5Al_7$**   
Н.В. Мушников, Е.В. Розенфельд, Д.И. Горбунов<sup>1</sup>, Ш. Ямамото<sup>1</sup>, Й. Возница<sup>1</sup>,  
К. Стром<sup>2</sup>, А.В. Андреев<sup>3</sup>

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

<sup>1</sup> *Лаборатория сильных магнитных полей HLD-EMFL, Дрезден, Германия*

<sup>2</sup> *Немецкий электронный синхротрон DESY, Гамбург, Германия*

<sup>3</sup> *Институт физики Чешской академии наук, Прага, Чехия*

----- стр. 66-69 -----

22. **Магнострикция и тепловое расширение в нестехиометрических соединениях  $TbCo_2Mn_x$**

Е.Г. Герасимов, А.А. Инишев, П.Б. Терентьев, В.А. Казанцев, Н.В. Мушников

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

----- стр. 70-72 -----

23. **Магнитные состояния, фазовые превращения и остаточное магнитосопротивление в интеркалированных соединениях  $Fe_xTiX_2$**

Н.В. Баранов, Н.В. Селезнева<sup>1</sup>, Е.М. Шерокалова<sup>1</sup>, А.С. Волегов, А.А. Шерстобитов

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

<sup>1</sup> *Институт естественных наук и математики УрФУ, г. Екатеринбург*

----- стр. 73-75 -----

24. **Влияние упорядочения ионов Rg и Ba в двойных манганитах  $PrBaMn_2O_6$  на ИК поглощение и эффект магнитопропускания**

Е. В. Мостовщикова, Е. В. Стерхов<sup>1</sup>, С. В. Наумов, Н. С. Ермолов, С. А. Упоров<sup>1</sup>,  
С. Г. Титова<sup>1</sup>

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

<sup>1</sup> *Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург*

----- стр. 76-78 -----

25. **Магнитотепловые свойства тяжелых редкоземельных металлов, сплавов на основе Fe-Rh, наночастиц ферромагнитных оксидов в области фазовых переходов**  
В.И. Зверев

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

----- стр. 79-84 -----

**26. Магнитные фазовые диаграммы и индуцированный ориентационными переходами магнитодиэлектрический эффект в монокристаллах чистого и Mn-замещенного  $Pb_2Fe_2Ge_2O_9$**

А. Панкрац, М. Колков, А. Балаев, А. Фрейдман, А. Васильев, Д. Балаев

*Институт физики им. Л.В.Киренского, Федеральный исследовательский центр КНЦ СО РАН, Красноярск*

----- стр. 85-87 -----

**27. Исследование фазовых превращений в сплавах Гейслера Ni-Mn-In методом просвечивающей электронной микроскопии**

Д.Д. Кузнецов<sup>1</sup>, Е.И. Кузнецова<sup>2</sup>, А.В. Маширов<sup>1</sup>, А.С. Лошаченко<sup>3</sup>, Д.В. Данилов<sup>3</sup>, Г.А. Шандрюк<sup>4</sup>, В.Г. Шавров<sup>1</sup>, В.В. Коледов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

<sup>3</sup>*МРЦ по направлению «Нанотехнологии», Научный парк, Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия*

<sup>4</sup>*Институт нефтехимического синтеза имени А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия*

----- стр. 88-90 -----

## **Теория**

**28. Новый теоретический метод изучения спиновой динамики в магнетиках со спином  $\frac{1}{2}$**

А.В. Сыромятников

*ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»*

----- стр. 91-93 -----

**29. Нестандартные квазиаддитивные интегралы движения и барическая зависимость фононных заселенностей**

Ф.С. Джепаров

*НИЦ «Курчатовский Институт» - ИТЭФ, Москва, Россия*

*Московский физико-технический институт (государственный университет), Долгопрудный, МО*

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

----- стр. 94-95 -----

**30. Распространение звука вблизи фазового перехода в магнитоупорядоченную фазу в средах с тетрагональной кристаллической структурой**

В.В. Меньшенин

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

----- стр. 96-98 -----

**31. Фазовая стабильность, магнитные и электронные свойства магнитных МАХ фаз**

В.С. Жандун<sup>1</sup>, Н.Г. Замкова<sup>1,2</sup>, О.Н. Драганюк<sup>1</sup>, А. С. Шинкоренко<sup>1</sup>, У. Видвальд<sup>3</sup>,  
С.Г. Овчинников<sup>1,2</sup>, М. Фарле<sup>3</sup>

<sup>1</sup> *Институт физики им. Л.В. Киренского “Федеральный исследовательский центр  
“КНЦ СО РАН”, Красноярск, Россия*

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

<sup>3</sup> *Физический факультет Университета Дуйсбург-Эссена, Дуйсбург, Германия*

----- стр. 99-101 -----

**32. Чётные и нечётные поля на ионах  $Fe^{2+}$ , связь электронов с деформацией и  
магнитоэлектрическая связь в  $FeCr_2O_4$**

К.В. Васин, М.В. Еремин

*Институт физики, Казанский федеральный университет, Казань, Россия*

----- стр. 102-104 -----

## Аннотации докладов

### №1

#### **Управляемая электрическим полем перестройка спин-волновых характеристик в параллельно ориентированных магнито-кристаллических структурах с пьезоэлектрическим слоем**

А.А. Грачев<sup>1</sup>, М. Mruczkiewicz<sup>2</sup>, С.А. Никитов<sup>3,4</sup>, А.В. Садовников<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия*

<sup>2</sup> *Institute of Electrical Engineering, Slovak Academy of Sciences, Bratislava, Slovakia*

<sup>3</sup> *Московский физико-технический институт (государственный университет), Долгопрудный, МО*

<sup>4</sup> *Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия*

В настоящее время традиционным [1] подходом для генерации, передачи и обработки информационных сигналов является использование систем, построенных на основе полупроводниковых транзисторов в качестве базовых элементов. Решением проблемы преодоления ограничений полупроводниковых технологий занимается магнитоэлектроника [2,3] – новое направление в физике конденсированного состояния вещества, использующее эффекты процессов переноса магнитного момента или спина электрона вместо переноса заряда, открывающее новые возможности применения спиновых волн (СВ) для построения элементной базы приборов обработки, передачи и хранения информации в микроволновом и терагерцевом диапазонах [4,5]. Как известно, монокристаллы и монокристаллические плёнки железоиттриевого граната (ЖИГ) отличаются рекордно низкой величиной константы затухания и на протяжении многих лет являются одним из основных объектов для экспериментального исследования спин-волновых явлений, базовым материалом для спин-волновых устройств магнитоэлектроники. На основе массивов микроструктур из ЖИГ оказывается возможным создание магнитных сетей для создания устройств обработки сигналов. При этом информация передается с помощью волноводов СВ, а логические операции реализованы на основе принципов спин-волновой интерференции [7].

Возможность управлять трансфером СВ как электрическим, так и магнитным полем позволит развивать более эффективные магнитные устройства. В связи с развитием технологий изготовления планарных интегральных волноводных синтетических мультиферроидных структур типа феррит-сегнетоэлектрик [4; 5] и феррит-пьезоэлектрик [6; 7], демонстрирующих перестройку при изменении величины приложенного внешнего постоянного электрического поля, оказывается возможным интеграция новых научных направлений в физике конденсированного состояния: "спинтроники" [8] и "магнитоэлектроники" [9]. Наибольший интерес для магнитной спинтроники [79; 83—93] представляют синтетические мультиферроидные структуры с двумерными деформациями в виде магнитострикционных и пьезоэлектрических слоев, механически связанных друг с другом.

В данной работе будут выявлены закономерности трансформации спектра спин-волновых возбуждений в планарных одиночных и связанных магнитных кристаллах под действием упругих деформаций. С помощью экспериментальных и численных методов будут выявлены механизмы управления электрическим полем пространственных и передаточных характеристик дипольных спиновых волн в одиночном магнитном кристалле с пьезоэлектрическим слоем и двух параллельно ориентированных магнитных кристаллах с пьезоэлектрическим слоем, размещенным на одном из них.

На рис. 1 показана одна из рассматриваемых структур, представляющая собой полосу ЖИГ-микроволновода, толщиной  $t = 7.7$  мкм и шириной  $w = 720$  мкм, выращенную методом жидкофазной эпитаксии на подложке ГГГ (толщина 500 мкм). Намагниченность насыщения слоя ЖИГ  $M_0 = 139$  Гс. Длина магнитного микроволновода составляет 9 мм. С помощью прецизионного ионно-лучевого травления на поверхности ЖИГ-микроволновода сформирована система канавок с периодом  $L = 200$  мкм, таким образом ЖИГ полоска представляет магнетонный кристалл. Глубина канавки составляла  $s = 1$  мкм. На верхней части магнетонного кристалла расположен пьезоэлектрический слой ЦТС, толщиной 200 мкм. На нижней части ЦТС-слоя напылён титановый электрод, толщиной 100 нм и с помощью метода лазерного скрайбирования сформирована система электродов типа «встречные штыри», показанная на рис 1.1. На верхней части ЦТС слоя напылён электрод из хрома, толщиной 1 мкм, не оказывающий существенного влияния на распространение СВ в магнетонном кристалле. Структура была помещена в однородное статическое магнитное поле  $H_0 = 730$  Э, направленного вдоль оси  $y$  для эффективного возбуждения поверхностных магнитоэлектрических волн (ПМСВ).

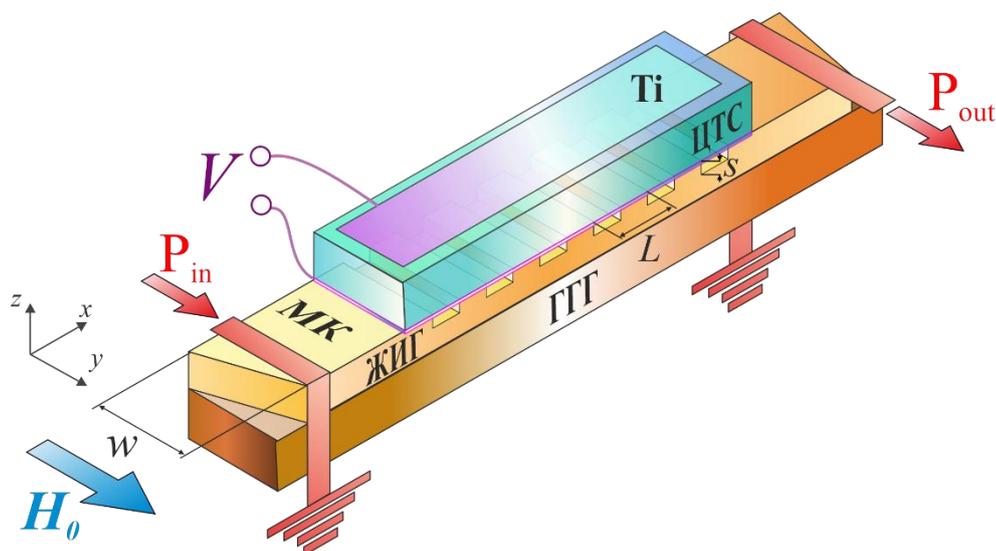


Рис. 1 Схема рассматриваемого магнетонного кристалла

Для описания физических процессов, определяющих физические характеристики при управлении спин-волновыми сигналами путем создания упругих деформаций, была разработана численная модель на основе метода конечных элементов. На рисунке 2(а) представлено распределение модуля механических напряжений в случае приложения положительного значения напряжения к электроду. Видно, что деформация пьезоэлектрического слоя возникает в области электрода, которая вследствие обратного пьезоэффекта передается ЖИГ плёнке, который в свою очередь так же деформируется. При этом максимальные значения деформации возникают вдоль ширины и толщины пьезоэлектрического слоя. Из-за обратного эффекта обратной магнитострикции в магнетонном кристалле изменяется внутреннее магнитное поле. Далее была произведена оценка влияния деформации пьезоэлектрического слоя на внутреннее магнитное поле магнетонного кристалла. На рис. 2(б) показаны распределения модуля внутреннего магнитного поля  $|H_{int}(x)|$  вдоль длины магнетонного кристалла при величине внешнего электрического поля  $E = 0$  кВ/см (черная штрих-пунктирная линия),  $E = 10$  кВ/см (сплошные цветные кривые) и  $E = -10$  кВ/см (пунктирные кривые) в разных сечений магнетонного кристалла (указаны буквами 'а', 'б', 'в' на рис. 2(б)). Следует отметить, что приложение электрического поля к слою ЦТС приводит к деформациям в ЖИГ слое и вследствие обратного эффекта обратной магнитострикции, приводящую к трансформации распределения внутреннего магнитного поля в магнетонном кристалле. При этом приложение положительного электрического поля приводит к

уменьшению величины модуля внутреннего магнитного поля  $|H_{\text{int}}(x)|$ , а приложение отрицательного электрического поля приводит к увеличению величины  $|H_{\text{int}}(x)|$ . В системе также и наблюдается более сильное изменение величины  $|H_{\text{int}}(x)|$  происходит в области столбика, где непосредственно наблюдается контакт слоя ЦТС с плёнкой ЖИГ, создавая в МК периодический потенциал в распределении внутреннего магнитного поля  $|H_{\text{int}}(x)|$ .

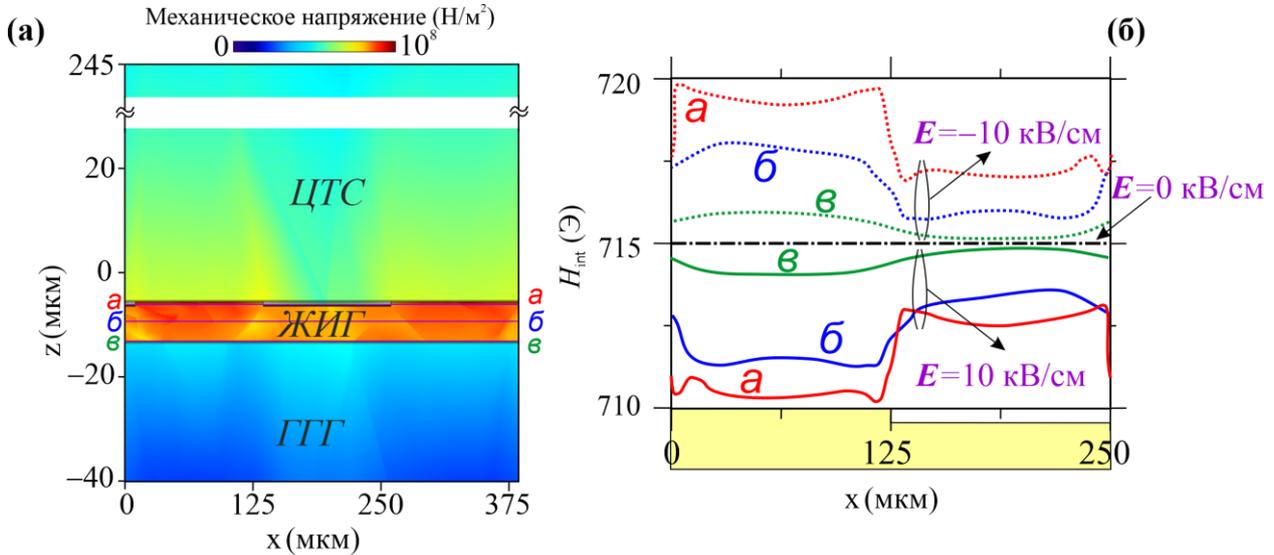


Рис. 2 а) Распределение компоненты тензора механических напряжений  $S_{yy}$  в случае приложения к электроду  $V = 500$  В. (б) Профили внутреннего магнитного поля  $|H_{\text{int}}(x)|$  при  $E = 10$  кВ/см (сплошные кривые) и  $E = -10$  кВ/см (штриховые кривые) при  $H_0 = 730$  Э.

В работе будет экспериментально показана возможность осуществления перестройки частотой полосы в спектре спиновых волн вследствие распределённых упругих деформаций, возникающих на интерфейсе магнетонный кристалл - пьезослой.

Работа выполнена при поддержке РФФ (20-79-10191)

#### Литература:

1. Neisser M., Wurm S. ITRS lithography roadmap: 2015 challenges // Advanced Optical Technologies. 2015. Vol. 4, no. 4.
2. Никитов С.А., Сафин А.Р., Калябин Д.В., Садовников А.В., Бегинин Е.Н., Логунов М.В., Морозова М.А., Одинцов С.А., Осокин С.А., Шараевская А.Ю., Шараевский Ю.П., Кирилук А.И. Диэлектрическая магнетоника – от гигагерцев к терагерцам // Успехи физических наук. 2020. Т. 190. № 10. С. 1009-1040.
3. The 2021 Magnonics Roadmap / A. Barman [et al.] // Journal of Physics: Condensed Matter. 2021. Vol. 33, no. 41. P. 413001.
4. Experimental Realization of a Passive Gigahertz Frequency-Division Demultiplexer for Magnonic Logic Networks / F. Heussner [et al.] // physica status solidi (RRL) Rapid Research Letters. 2020. Vol. 14, no. 4. P. 1900695.
5. A spin-wave logic gate based on a width-modulated dynamic magnonic crystal / A. A. Nikitin [et al.] // Applied Physics Letters. Vol. 106, no. 10. P. 102405.
6. Three port logic gate using forward volume spin wave interference in a thin yttrium iron garnet / T. Goto [et al.] // Scientific reports. 2019. Vol. 9, no. 1. P. 1-11.
7. Voltage-Controlled Spin-Wave Coupling in Adjacent Ferromagnetic-Ferroelectric Heterostructures / A. V. Sadovnikov [et al.] // Physical Review Applied. 2017. Vol. 7, no. 1.
8. Magnon Straintronics: Reconfigurable Spin-Wave Routing in Strain-Controlled Bilateral Magnetic Stripes / A. V. Sadovnikov [et al.] // Physical Review Letters. 2018. Vol. 120, no. 25.
9. Straintronics: a new trend in micro- and nanoelectronics and materials science / A. A. Bukharaev [et al.] // Physics-Uspexhi. 2018. Vol. 61, no. 12. P. 1175-1212.

### Концепция 3D магнонных кристаллов

Е.Н. Бегинин<sup>1</sup>, А.В. Садовников<sup>1</sup>, С.А. Никитов<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Национальный исследовательский университет им. Н.Г. Чернышевского (СГУ), Саратов, Россия*

<sup>2</sup> *Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия*

В докладе рассматривается новый класс магнитных структур в которых возможно распространение спиновых волн в трех измерениях и обсуждается концепция трехмерных магнонных кристаллов. В качестве основы для создания таких 3D-магнонных кристаллов (3D-МК) могут быть использованы пленки различных магнитных материалов выращенные на поверхности предварительно структурированных диэлектрических подложках. Структурирование диэлектрических подложек выполнялось с использованием литографии в комбинации с методами ионного травления. Магнитные слои формировались различными методами в зависимости от состава магнитных материалов. На рис. 1(a) схематично представлен 3D-МК меандрового типа безграничный в направлении оси  $z$  и намагниченный в плоскости ( $xz$ ) внешним однородным магнитным полем. На рисунке 1(b)-(e) представлены SEM-изображения и сечения для некоторых исследуемых 3D-МК.

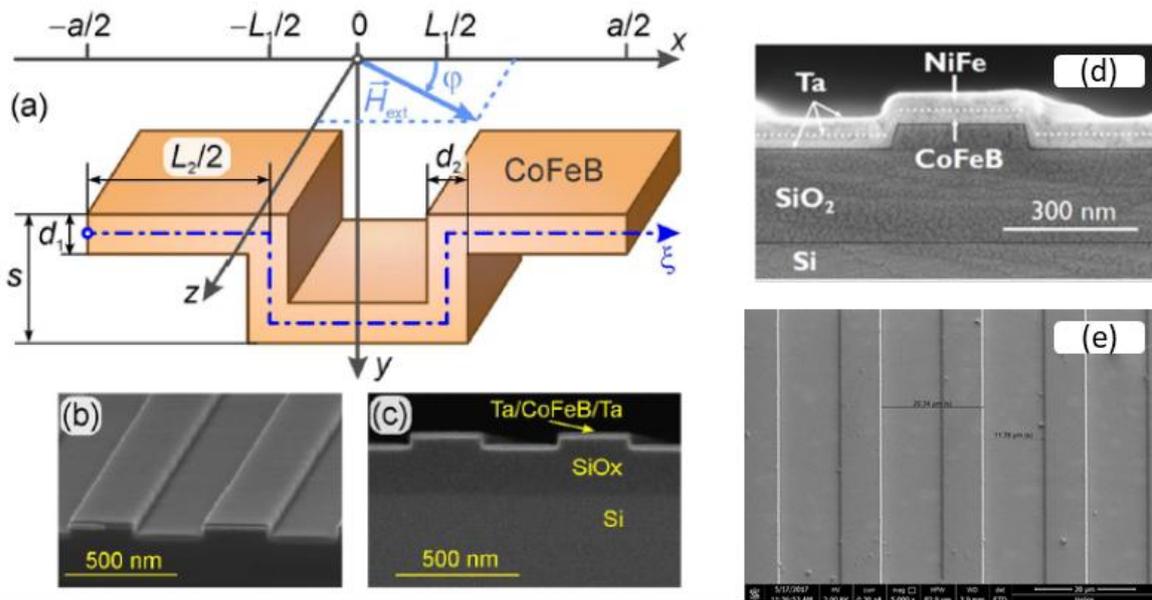


Рис. 1 а) Общая схема 3D-магнонного кристалла и ориентация внешнего магнитного поля, б) SEM изображение меандровой структуры CoFeB-SiO и её поперечное сечение ( в ), (d) поперечное сечение двухслойной структуры CoFeB-Ta-NiFe, (e) - SEM изображение меандровой структуры YIG-GGG.

Проведены теоретические и экспериментальные исследования спин-волновых возбуждений в 3D-МК с различными пространственными периодами и геометрией слоев в широком диапазоне изменения величины внешнего магнитного поля и угла намагничивания. Методами микромагнитного моделирования проведен анализ спектров колебаний намагниченности при однородной накачке динамическим магнитным полем (ФМР), пространственного распределения компонент динамической намагниченности для различных колебательных мод, пространственные распределения внутренних статических магнитных полей, исследованы особенности формирования зонной структура спиновых волн в 3D-МК. Методами ферромагнитного резонанса (ФМР) и бриллюэновского светорассеивания (BLS) проведены экспериментальные исследования резонансных частот и дисперсионных характеристик спин-волновых возбуждений в 3D-МК.

На рисунке 2 представлены результаты расчета частотного спектра колебаний намагниченности в 3D-МК на основе меандровой структуры YIG-GGG (намагниченность насыщения YIG  $M_s=139$  кА/м, период меандра  $a=40$  мкм, толщина YIG  $d=1$  мкм,  $\mu_0 H_{ext}=0.2$  Т) при различной величине относительной глубины меандра  $\delta=s/d$  [1].

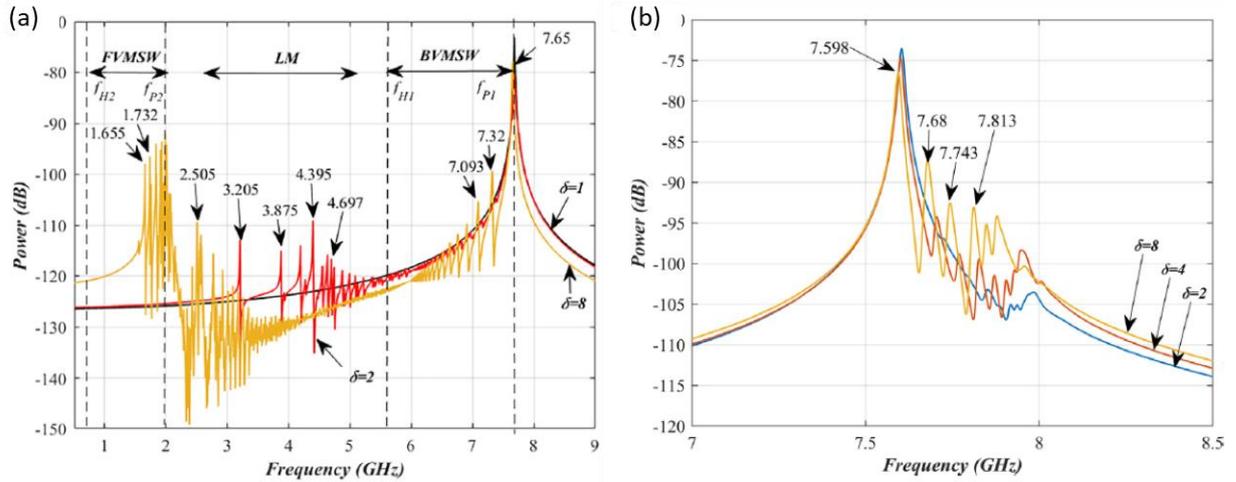


Рис. 2 Спектральные плотности мощности колебаний  $m_y$ -компоненты намагниченности, характерные частоты мод колебаний в зависимости от относительной глубины меандра  $\delta$ . а) Поперечное намагничивание ( $\varphi=0^\circ$ ), б) продольное намагничивание ( $\varphi=90^\circ$ ).

В случае поперечного намагничивания рис. 2 а) можно выделить характерные частоты  $f_{H1} = \gamma \mu_0 H_{ext}$ ,  $f_{P1} = \sqrt{f_{H1}(f_{H1} + \gamma \mu_0 M_s)}$ ,  $f_{H2} = \gamma(H_0 - \gamma \mu_0 M_s)$ ,  $f_{P2} = \sqrt{f_{H2}(f_{H2} + f_M)}$  и три частотные области в которых спектр ФМР формируется стоячими обратными и прямыми объемными спиновыми волнами (BVMSW и FVMSW, соответственно) и локализованными модами колебаний (LM). В случае продольного намагничивания рис. 2 б) спектр ФМР формируется за счет рассеивания поверхностных магнитостатических волн на стыках вертикальных и горизонтальных сегментов меандра с образованием квази-стоячих волн. При любом направлении намагничивания меандра градиенты неоднородных статических магнитных полей могут приводить к эффективной генерации более коротких дипольно-обменных волн, пространственное распространение которых носит нерезонансный характер.

Проведены теоретические и экспериментальные исследования ФМР в меандровых структурах полученных путем осаждения пермаллоя (Py) толщиной  $d=40$  нм диэлектрические подложки с различными пространственными периодом  $a$  и глубиной меандра  $s$  [2].

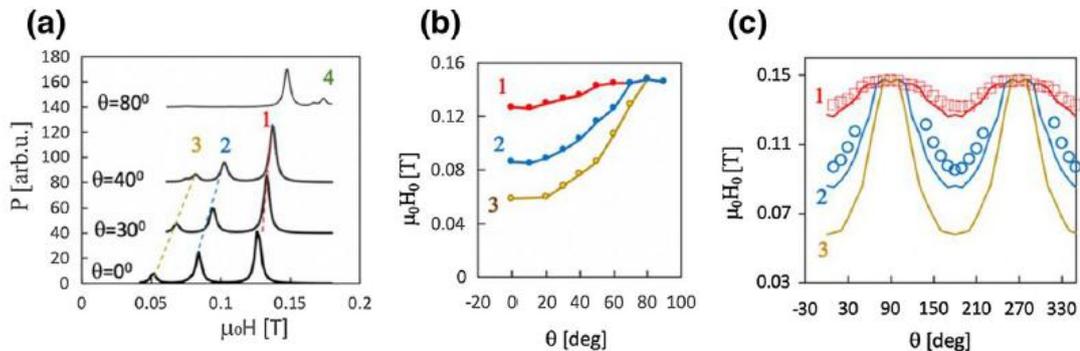


Рис. 3 (а) Результаты микромагнитного моделирования ФМР (на частоте 10 ГГц) в зависимости от величины и ориентации магнитного поля ( $\theta=90^\circ-\varphi$ ) в плоскости меандровой структуры Py ( $a=740$  нм,  $s=60$  нм), (б) Положения пиков в зависимости от угла ориентации, (с) сравнение с экспериментом. Экспериментальные данные показаны символами, результаты численного моделирования - сплошными линиями. Цифры 1, 2 и 3 указывают соответствующие пики.

Получено хорошее соответствие результатов ФМР и микромагнитного моделирования и показано, что изучаемые структуры обладают одноосной анизотропией с легкой осью, направленной вдоль ребер канавок и эффективным полем анизотропии 5–10 мТл. Также обнаруживаются дополнительные низкочастотные резонансы. Наличие и поведение дополнительных пиков ФМР объясняется спин-волновыми резонансами, определяемыми периодичностью структур.

В работе [3] методом широкополосного FMR-VNA и микромагнитного моделирования исследованы спектры спин-волновых возбуждений в 3D-МК на основе CoFeB ( $a=600$  нм,  $d=23$  нм,  $s=73$  нм). Было показано, что данная структура имеет преимущества перед массивом одномерных магнитных полосок, демонстрируя богатые спектры спин-волновых мод наряду с синфазными и противофазными режимами колебаний намагниченности внутри вертикальных частей меандра.

В работах [4][5] методом BLS и микромагнитным моделированием проведено исследование особенностей формирования зонных структур спиновых волн в 3D-МК на основе CoFeB (рис. 4). Показано, что запрещенные зоны в однослойных 3D-МК формируются при выполнении условий на волновые числа  $k = 2\pi m/a$ ,  $m = \pm 1, \pm 2 \dots$  характерных для структур с симметрией типа «скользящая плоскость».

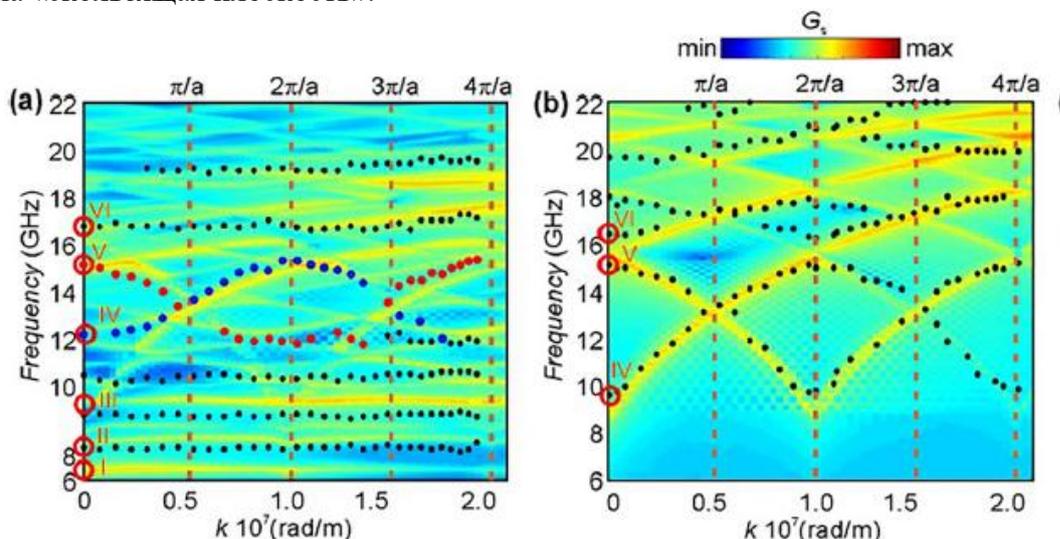


Рис.4 Дисперсионные характеристики спиновых волн в 3D-МК на основе CoFeB ( $\varphi=90^\circ$ ,  $\mu_0 H_{\text{ext}}=50$  мТ, точки –эксперимент, цветовая карта-микромагнитное моделирование). (а) Двухслойная структура CoFeB(23 нм)/Ta(5 нм)/Py(23 нм) (б) Однослойная структура CoFeB (23 нм).

Работа выполнена при поддержке РФФ (20-79-10191)

#### Литература:

1. Beginin E.N. et al. Collective and localized modes in 3D magnonic crystals // J. Magn. Magn. Mater. Elsevier B.V., 2019. Vol. 492, № June. P. 165647.
2. Noginova N. et al. Ferromagnetic Resonance in Permalloy Metasurfaces // Appl. Magn. Reson. Springer Vienna, 2021. Vol. 52, № 7. P. 749–758.
3. Sadovnikov A.V. et al. Reconfigurable 3D magnonic crystal: Tunable and localized spin-wave excitations in CoFeB meander-shaped film // J. Magn. Magn. Mater. Elsevier B.V., 2022. Vol. 544, № October 2021. P. 168670.
4. Gubbiotti G. et al. Magnonic Band Structure in Vertical Meander-Shaped Co40 Fe40 B20 Thin Films // Phys. Rev. Appl. 2021. Vol. 15, № 1.
5. Gubbiotti G. et al. Magnonic band structure in CoFeB/Ta/NiFe meander-shaped magnetic bilayers // Appl. Phys. Lett. AIP Publishing LLC, 2021. Vol. 118, № 16.

**Спин флоп переход в искусственных коллинеарных ферримагнетиках**

Н.О. Антропов, Е.А. Кравцов, М.В. Макарова, В.В. Проглядо, Н.Г. Бебенин, М.А. Миляев, В.В. Устинов

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

На основе сверхрешеток Fe/Gd были получены искусственные антиферромагнетики, в которых, путем введения прослойки Pd, удалось на несколько порядков уменьшить поля спин-флоп перехода. Комбинированным применением рефлектометрии поляризованных нейтронов и низкотемпературной магнитометрии было проведено систематическое исследование магнитной структуры сверхрешеток Fe/Pd/Gd в зависимости от толщины прослойки Pd, температуры и магнитного поля. Анализ рассеяния нейтронов с переворотом спина подтвердил формирование неколлинеарной магнитной фазы при температурах ниже 50 К в магнитных полях порядка 500 Э. Показано, что, варьируя толщину прослойки Pd, можно контролируемым образом изменять параметры межслойного обменного взаимодействия.

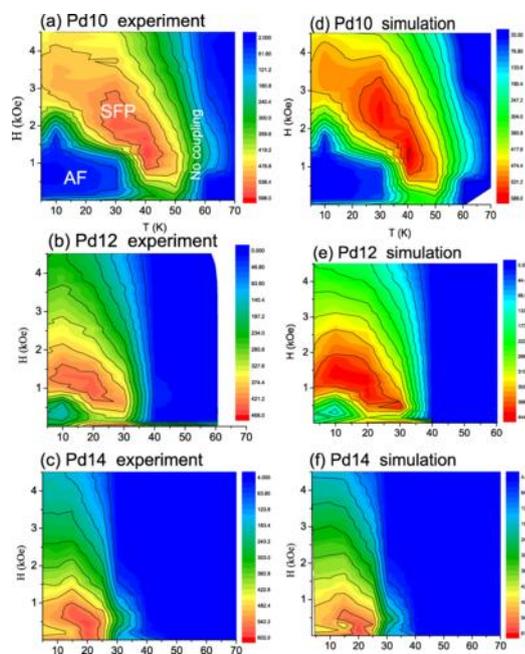


Рисунок - 1 (а-с) Экспериментальные карты (H, T) рассеяния нейтронов с переворотом спина в сверхрешеточном максимуме для образцов с разными толщинами прослойки Pd и (d-f) соответствующие им результаты математического моделирования.

**Публикации:**

[Tunable spin-flop transition in artificial ferrimagnets](#) / N. O. Antropov, E. A. Kravtsov, M. V. Makarova, V. V. Proglyado, T. Keller, I. A. Subbotin, E. M. Pashaev, G. V. Prutskov, A. L. Vasiliev, Yu. M. Chesnokov, N. G. Bebenin, M. A. Milyaev, V. V. Ustinov, B. Keimer, and Yu. N. Khaydukov // Phys. Rev. B – 2021 – **104** – 054414.

[Transition in Magnetic Non-collinear Spin-flop State in Fe/Pd/Gd/Pd Superlattice](#) / N. O. Antropov, Yu. N. Khaydukov, E. A. Kravtsov, M. V. Makarova, V. V. Proglyado, V. V. Ustinov // Jetp Lett. – 2019 – **109** – 406.

*Актуальность* исследования: Антиферромагнитная спинтроника - быстро развивающаяся область микро- и наноэлектроники. Искусственные коллинеарные антиферромагнетики и ферромагнетики в случае, если удастся существенно понизить критические поля магнитных переходов по сравнению с объемными материалами, могут быть использованы в качестве материалов для новейших устройств спинтроники, обеспечивая эффективную защиту от внешних магнитных возмущений, а также подавление нежелательных сигналов, проходящих между небольшими приборами в ограниченном объеме.

*Цель* исследования: получить искусственные коллинеарные ферромагнетики на основе сверхрешеток Fe/Gd, в которых, за счет введения прослойки Pd, можно уменьшить параметры межслойного обменного взаимодействия; провести комплексный анализ магнитных и структурных свойств сверхрешеток Fe/Pd/Gd с различной толщиной прослойки Pd; определить параметры межслойного обменного взаимодействия и поля спин-флип перехода в зависимости от толщины прослойки.

*Задачи* исследования: 1) Синтез и структурная характеристика сверхрешеток Fe/Pd/Gd, определение структуры межслойных границ. 2) Комбинированным применением низкотемпературной магнитометрии и рефлектометрии поляризованных нейтронов исследовать магнитные свойства и магнитную микроструктуру сверхрешеток. 3) Из анализа данных по рассеянию поляризованных нейтронов с переворотом спина определить параметры межслойного обменного взаимодействия в зависимости от температуры и толщины прослойки Pd.

*Объект* исследования: сверхрешетки  $[\text{Fe}(35\text{\AA})/\text{Pd}(t)/\text{Gd}(50\text{\AA})/\text{Pd}(t)] \times 12$ ,  $t = 8-28 \text{\AA}$ .

*Методы* исследования: Рентгеновская рефлектометрия высокого разрешения, просвечивающая электронная микроскопия и энергодисперсионная спектроскопия, низкотемпературная магнитометрия, рефлектометрия поляризованных нейтронов.

*Авторский вклад* сотрудников ИФМ: идея исследования, постановка задачи, проведение рентгеноструктурных, магнитных и нейтронографических измерений, математического моделирования, анализ результатов исследования, написание статьи.

## **1. Проведена структурная характеристика сверхрешеток**

Структурные свойства сверхрешеток были определены с помощью рентгеновской рефлектометрии, электронной микроскопии и энергодисперсионного микроанализа. Для сверхрешеток характерно формирование периодической слоистой структуры. Выявлено наличие сплава вблизи межслойных границ слоев Pd и Gd.

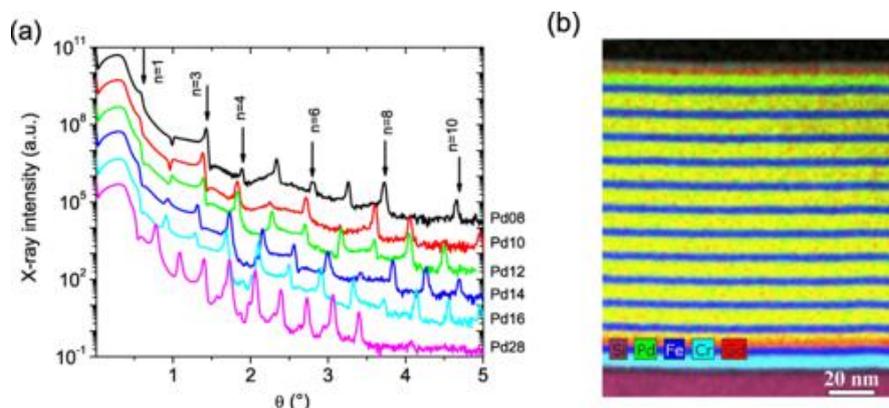


Рисунок - 2 (а) Рентгеновские рефлектограммы для образцов с разными толщинами прослойки. (б) Данные энергодисперсионной электронной микроскопии для образца с толщиной прослойки Pd  $t=12 \text{ \AA}$ .

## 2. Определены поля спин-флоп перехода в зависимости от внешнего магнитного поля, толщины прослойки Pd и температуры.

На рисунке 3а приведены петли гистерезиса для образцов с толщинами прослойки  $t=10 \text{ \AA}$  и  $t=28 \text{ \AA}$ , измеренные при температуре  $T=5 \text{ K}$ . В первом случае магнитное поведение характерно для коллинеарной ферромагнитной системы, в которой спин-флоп переход реализуется в магнитном поле  $1.6 \text{ кЭ}$ . Во втором случае – в системе реализуется ферромагнитное упорядочение. На рисунке 3б приведены графики температурной зависимости намагниченности для тех же образцов, важной особенностью является систематическое уменьшение температуры Кюри по мере увеличения толщины прослойки Pd.

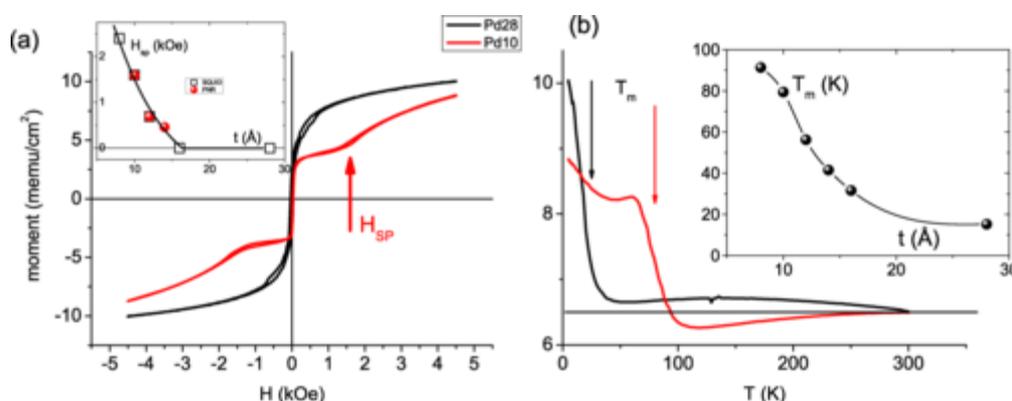


Рисунок - 3 (а) Петли гистерезиса, измеренные при  $T=5 \text{ K}$ , и (б) измеренная в магнитном поле  $H=4.5 \text{ кЭ}$  температурная зависимость намагниченности для сверхрешеток с толщинами прослойки  $t=10 \text{ \AA}$  и  $t=28 \text{ \AA}$ .

## 3. Определены параметры межслойного взаимодействия в рамках расширенной модели Стоннера-Вольфарта.

$$E(\alpha_{Gd}, \alpha_{Fe}) = -H[m_{Gd}\cos(\alpha_{Gd}) + m_{Fe}\cos(\alpha_{Fe})] + J_1\cos(\alpha_{Gd} - \alpha_{Fe}) + J_2\cos^2(\alpha_{Gd} - \alpha_{Fe})$$

Результат обработки показан на рисунке 1. Определены зависимости параметров обменного взаимодействия ( $J_1$  и  $J_2$ ) от температуры и толщины немагнитной прослойки палладия в сверхрешетках.

## **Выводы:**

Комбинированным применением рефлектометрии поляризованных нейтронов и низкотемпературной магнитометрии произведено систематическое исследование магнитных конфигураций сверхрешеток Fe/Pd/Gd с толщиной прослойки Pd  $t = 8-28 \text{ \AA}$ . Установлено, что введение прослойки Pd толщиной 10-14  $\text{\AA}$  между слоями Fe и Gd в сверхрешетках Fe/Gd позволяет на 1-2 порядка уменьшить поле спин-флоп перехода при сохранении антиферромагнитного упорядочения в малых полях (при температуре ниже  $T = 50 \text{ K}$  формирование неколлинеарного магнитного упорядочения достигается в магнитных полях  $H \sim 500 \text{ Э}$ ). Из анализа результатов рассеяния нейтронов с переворотом спина выявлено возрастание параметра биквадратичного межслойного обменного взаимодействия при увеличении толщины прослойки, что может быть связано с ростом структурных несовершенств в сверхрешетках, в частности, с образованием сплава PdGd вблизи межслойных границ.

## Гибкие спиновые клапаны: межслойное взаимодействие, магнитная анизотропия и деформационная чувствительность

Л.И. Наумова, Р.С. Заворницын, М.А. Миляев, И.К. Максимова, А.А. Захаров, Т.А. Чернышова, В.В. Проглядо, В.В. Устинов

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

На гибких полимерных подложках изготовлены обладающие эффектом гигантского магнитосопротивления многослойные наноструктуры типа «спиновый клапан» и объекты микронных размеров на их основе. Найдена композиция многослойного буферного слоя, который позволяет эффективно снизить влияние шероховатости полимерной подложки на магнитосопротивление и характер межслойного взаимодействия в спиновом клапане. Показано, что спиновые клапаны с низкострикционным сплавом в свободном и сплавом с ненулевой магнитострикцией в закрепленном ферромагнитном слое обладают большим магнитосопротивлением, слабым гистерезисом перемагничивания свободного слоя и высокой чувствительностью магнитосопротивления к деформации изгиба (рис. 1). Выявлен характер зависимости деформационной чувствительности характеристик спинового клапана от интенсивности взаимодействия между магнитными слоями и способа расположения осей магнитной анизотропии по отношению к вектору деформации. Полученные зависимости использованы при конструировании сенсора изгиба (рис. 2).

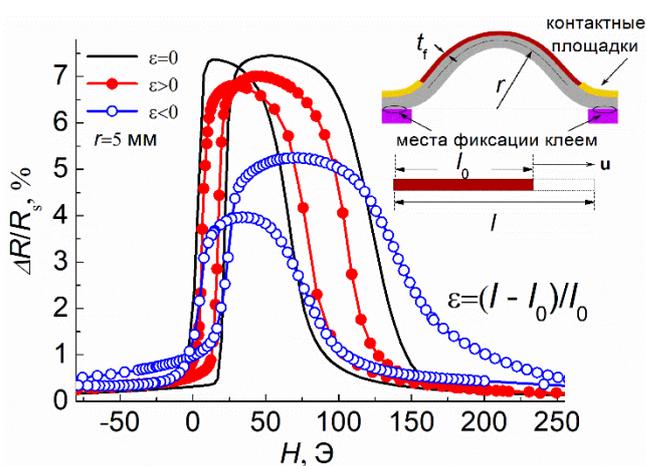


Рисунок – 1. Полевые зависимости магнитосопротивления микрополоски спинового клапана до деформации и в состоянии изгиба. На вставке показана форма держателя с микрополоской наноструктуры толщины  $t_f$  на подложке толщины 60 мкм.  $r$  – радиус кривизны подложки.  $u$  – вектор деформации.

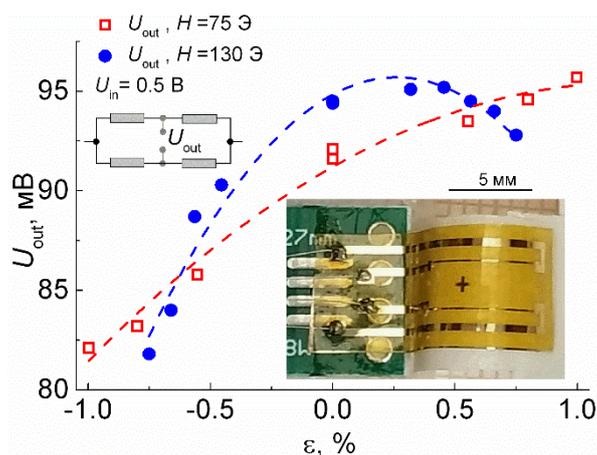


Рисунок – 2. Зависимости выходного напряжения сенсора изгиба от относительной деформации, полученные при разных величинах приложенного магнитного поля. На вставках – электрическая схема и фотография сенсора.

### Публикации:

1. Гибкие спиновые клапаны: межслойное взаимодействие и деформационная чувствительность / Наумова Л.И., Чернышова Т.А., Заворницын Р.С., Миляев М.А., Максимова И.К., Проглядо В.В., Захаров А.А., Устинов В.В. // Физика металлов и металловедение. — 2021. — V. 122. — P. 1149—1157.
2. Сенсор изменения формы на основе гибкого спинового клапана с использованием схемы моста Уитстона / Захаров А.А., Л.И. Наумова, и др. // 23 всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике, Санкт-Петербург, 22-26 ноября 2021 года // СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2021, 88 стр.

**Актуальность** исследования: Разработка гибких устройств являются одной из современных тенденций микроэлектроники. Использование полимерных подложек для изготовления наноструктур типа «спиновый клапан» и получение материалов, сочетающих гигантский магниторезистивный эффект и систематическую зависимость магнитосопротивления от изменения формы - актуальная задача с точки зрения практических приложений. С научной точки зрения для получения таких материалов необходимо понимание закономерностей формирования их магнитоупругих и магнитотранспортных свойств.

**Цель** экспериментального исследования: изучение корреляции между композицией спинового клапана и изменением его магниторезистивных характеристик при деформации изгиба, выявление зависимости деформационной чувствительности от величины взаимодействия между магнитными слоями и способа расположения осей магнитной анизотропии по отношению к вектору деформации.

**Задачи** исследования:

1) определить состав и композицию буферного слоя, эффективно снижающего влияние шероховатости полимерной подложки на магнитотранспортные свойства наноструктуры; 2) изготовить методом магнетронного напыления многослойные наноструктуры типа «спиновый клапан» на гибких подложках из полиимидной пленки; 3) изготовить методом оптической литографии микрополоски и микрополосок соединенные в соответствии с электрической схемой моста Уитстона с контактными дорожками; 4) провести измерения полевых зависимостей магнитосопротивления при изгибе микрополосок с разной по величине и знаку относительной деформацией; 5) исследовать зависимость выходного напряжения сенсора изгиба от радиуса кривизны изгиба и от относительной деформации.

**Объект** исследования: микрополоски и пленки, изготовленные на гибких полиимидных подложках спиновых клапанов композиции: буферный слой/ФМ1/Cu/ФМ2/Fe<sub>50</sub>Mn<sub>50</sub>/Ta, где ФМ – ферромагнитные слои сплавов Co<sub>70</sub>Fe<sub>10</sub>Ni<sub>20</sub> и Co<sub>70</sub>Fe<sub>20</sub>Ni<sub>10</sub> с ненулевой и близкой к нулю магнитострикцией. Буферный слой представляет собой периодическую наноструктуру [Ta/(Ni<sub>80</sub>Fe<sub>20</sub>)<sub>60</sub>Cr<sub>40</sub>]<sub>n</sub>, (n = 2, 5 и 7).

**Методы** исследования: оптическая профилометрия, атомная силовая микроскопия, измерение полевых зависимостей сопротивления.

**Авторский вклад** сотрудников ИФМ: идея исследования, постановка задачи, изготовление образцов, проведение измерений, анализ результатов исследования, написание текста статьи.

### 1. Найдены способы уменьшения влияния шероховатости полиимидной (PI) подложки на магниторезистивные свойства

изготовленных на ней спиновых клапанов.

1) Уменьшение размеров образца (рисунок 3).  
 2) Использование в качестве буферного слоя многослойной наноструктуры [Ta(5нм)/NiFeCr(5нм)]<sub>n</sub>. (рисунок 3).

**3. Обнаружено, что при изгибе образца изменение магнитосопротивления зависит от направления вектора деформации по отношению к осям анизотропии спинового клапана.** Магнитосопротивление уменьшается, если вектор деформации (**u**) параллелен оси однонаправленной анизотропии (ООА), и не меняется при **u** ⊥ ООА. (рисунок 4).

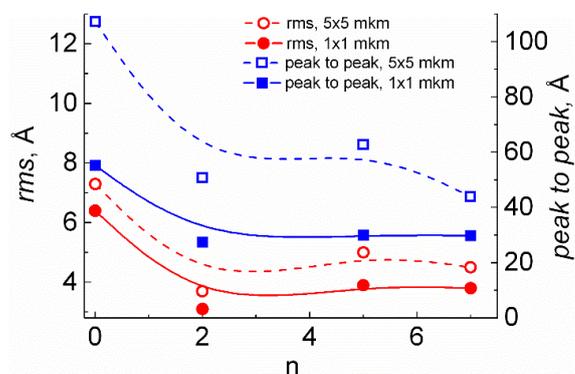


Рисунок – 3. Зависимость шероховатости поверхности напыленной на PI подложку пленки [Ta(5нм)/NiFeCr(5нм)]<sub>n</sub> от количества повторений n для разных размеров анализируемой поверхности.

4. Показано, что при изгибе спиновое клапана в магнитном поле, параллельном вектору деформации, два фактора определяют изменение величины магнитосопротивления: изменение проекции поля на плоскость пленки и магнитоупругая анизотропия. При изгибе проекция поля на плоскость пленки различна в разных участках пленки, что препятствует формированию антипараллельного расположения магнитных моментов ФМ слоев во всем образце. При сжатии ( $\epsilon < 0$ ) или растяжении ( $\epsilon > 0$ ) пленки спиновое клапана магнитоупругая анизотропия способствует разупорядочению или выстраиванию локальных моментов ФМ слоев по отношению к ООА и ОЛН. Совместное воздействие этих факторов объясняет форму зависимости максимального магнитосопротивления от деформации (рисунок 5).

5. Изготовлен сенсор изгиба на основе спиновое клапана, напыленного на гибкую полиимидную подложку. Две пары микрополосок соединены в соответствии с электрической схемой моста Уитстона (рисунок 2). В зависимости от напряженности внешнего магнитного поля, сенсор работает как половинный или полный мост Уитстона.

#### Выводы

1. Использование 5 – 7 повторений композиции [Ta(5нм)/NiFeCr(5нм)] в буферном слое позволяет эффективно снизить влияние шероховатости полимерной подложки на магнитосопротивление и характер межслойного взаимодействия в спиновом клапане.

2. Спиновый клапан со сплавом с ненулевой магнитоотрицательностью в закрепленном слое обладает большим магнитосопротивлением, слабым гистерезисом перемагничивания свободного слоя и высокой чувствительностью магнитосопротивления к деформации.

3. При деформации изгиба изменение магнитосопротивления зависит от направления вектора деформации по отношению к осям анизотропии спиновое клапана.

4. При изгибе спиновое клапана в магнитном поле, параллельном вектору деформации, два фактора определяют изменение величины магнитосопротивления: изменение проекции магнитного поля на плоскость пленки и появление магнитоупругой анизотропии.

5. Изготовлен сенсор изгиба на основе спиновое клапана на гибкой полимерной подложке.

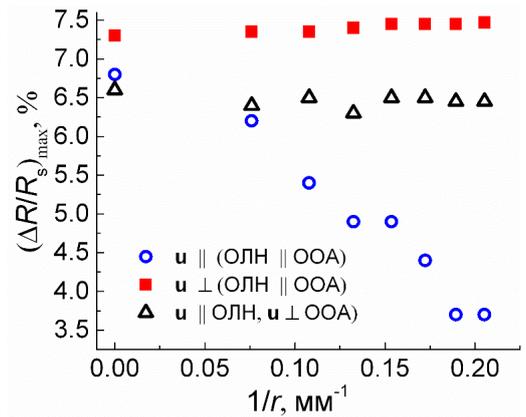


Рисунок – 4. Зависимости максимальной величины магнитосопротивления от обратного радиуса изгиба для микрополоски спиновое клапана композиции [Ta(5нм)/NiFeCr(5нм)]<sub>7</sub>/Co<sub>70</sub>Fe<sub>10</sub>Ni<sub>20</sub>(5.5нм)/Cu(2.6нм)/Co<sub>70</sub>Fe<sub>10</sub>Ni<sub>20</sub>(4нм)/FeMn(15нм)/Ta(6нм).

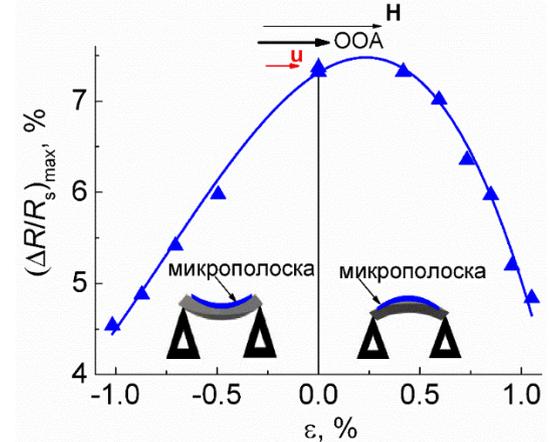


Рисунок – 5. Зависимость максимальной величины магнитосопротивления от относительного удлинения для микрополоски шириной 40 мкм спиновое клапана [Ta(5нм)/NiFeCr(5нм)]<sub>5</sub>/Co<sub>70</sub>Fe<sub>10</sub>Ni<sub>20</sub>(5.5нм)/Cu(2.6нм)/Co<sub>70</sub>Fe<sub>10</sub>Ni<sub>20</sub>(4нм)/FeMn(15нм)/Ta(6нм).

**Особенности проявления ферромагнетизма и спинодальный распад в ионно-синтезированных сплавах палладия с железом**

Р.И. Хайбуллин<sup>1</sup>, В.Ф. Валеев<sup>1</sup>, А.И. Гумаров<sup>1,2</sup>, И.И. Гумарова<sup>1,2</sup>, Н.М. Лядов<sup>1</sup>, В. И. Нуждин<sup>1</sup>, Л.Р. Тагиров<sup>1,2</sup>, Р.В. Юсупов<sup>2</sup>, И. В. Янилкин<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия

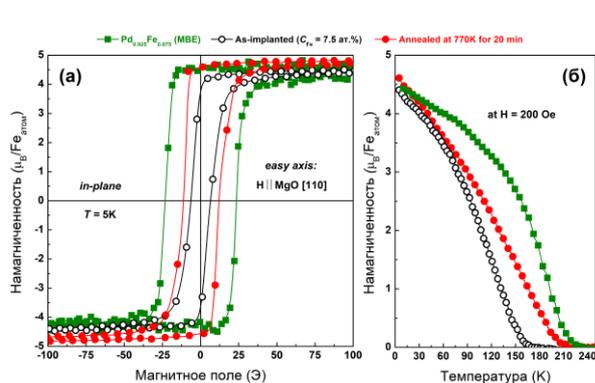
<sup>2</sup> Институт физики, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

Благодаря уникальным свойствам, магнитообразованные сплавы палладия с железом  $Pd_{(1-x)}Fe_x$ , где  $x < 0.1$ , вызывают большой научный и практический интерес, обусловленный высоким потенциалом их использования в сверхпроводящей спинтронике [1]. Обычно, тонкие плёнки сплава  $Pd_{(1-x)}Fe_x$  получают методами магнетронного распыления или молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) на подложках с подходящим структурным мотивом [2, 3]. Однако, в современной кремневой микроэлектронике при создании микрочипов широко используется метод ионного легирования или, другими словами, метод принудительной имплантации ускоренных до высокой энергии ионов легирующей примеси в кремневые пластинки. В данной работе, мы исследуем потенциал применения ионной имплантации для формирования ферромагнитных сплавов палладия. Основной целью работы являлось выявление особенностей проявления ферромагнетизма, наведенного в эпитаксиальных плёнках чистого палладия путём имплантации в их кристаллическую структуру магнитных ионов железа.

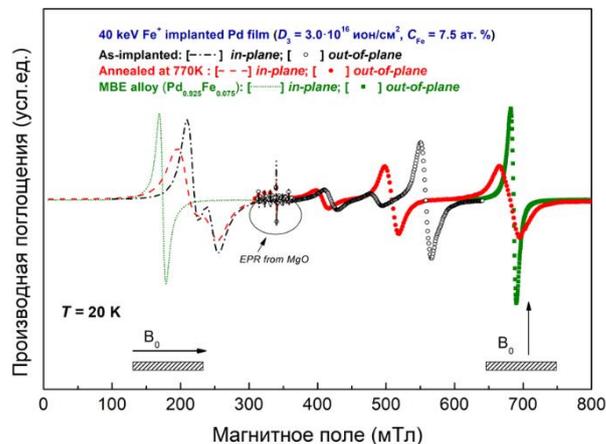
Образцы для исследования были получены путём имплантации 40 кэВ ионов железа с дозами  $(0.5, 1.0 \text{ и } 3.0) \times 10^{16}$  ион/см<sup>2</sup> в эпитаксиальные плёнки палладия, выращенных методом МЛЭ на (001)-ориентированных подложках оксида магния. Как основной результат, впервые методом ионной имплантации был реализован синтез бинарного сплава  $Pd_{(1-x)}Fe_x$ , где значение средней концентрации примеси железа  $x$  в зависимости от дозы имплантации лежит в диапазоне 0.01-0.10. Анализ проведенных структурных и магнитных исследований, представленных в работе [4], показывает, что имплантированная примесь железа находится в форме раствора замещения в кристаллической структуре палладия с образованием химической связи с атомами Pd. Имплантированные пленки Pd находятся в кристаллическом состоянии, что указывает на динамический отжиг радиационных дефектов непосредственно в процессе ионного облучения. Факт изоморфного замещения атомов палладия имплантированными атомами железа и формирование бинарного сплава подтверждается данными рентгеноструктурного анализа. Имплантация примеси железа, как и ожидалось, индуцирует переход палладия в ферромагнитное состояние при низких температурах (ниже 230 К) [4]. При этом температура Кюри и намагниченность насыщения ионно-синтезированного бинарного сплава зависит не только от дозы имплантации (количественного содержания) примеси железа, но и последующего термического отжига в вакууме за счет перераспределения примеси железа в имплантированной пленке Pd (поддержано расчетами их первых принципов [5]). В отличие от магнитных свойств подобных плёнок сплава Fe-Pd, полученных методом молекулярно-лучевой эпитаксии с таким же содержанием железа (см. [2,3]), ионно-синтезированные бинарные сплавы палладия с железом (при равном значении намагниченности насыщения и температуры Кюри) проявляют две характерные особенности. Первой особенностью является существенно меньшее значение величины коэрцитивного поля, что важно для практических приложений ионно-синтезированных сплавов в сверхпроводящей спинтронике (рис.1). Вторая особенность – это формирование многофазной слоистой магнитной структуры (спинодальный распад) в имплантированных эпитаксиальных плёнках палладия. Формирование многослойной структуры подтверждается наблюдением множества пиков ферромагнитного резонанса (рис. 2) и связано с начальным пространственным градиентом концентрации в глубинном профиле распределения железа в

имплантируемой пленке палладия. Наблюдаемый при этом спиновальный распад на слои с определенными равновесными значениями концентрации железа - интригующее наблюдение для пары Pd и Fe, обычно считающейся полностью взаимно растворимой в бинарных смесях при концентрациях железа ниже 10 атомных процентов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 20-02-00981.



**Рис. 1.** Петли магнитного гистерезиса (а) и термомагнитные кривые (б) для эпитаксиальной пленки палладия толщиной 60 нм, имплантированной ионами Fe<sup>+</sup> с энергией 40 кэВ и дозой  $3 \times 10^{16}$  ион/см<sup>2</sup> как до (—○—), так и после (—●—) термического отжига в вакууме при 500°C в течение 20 мин. Для сравнения представлены магнитные измерения (—■—) тонкопленочного бинарного сплава Pd<sub>0.925</sub>Fe<sub>0.075</sub>, полученной методом МЛЭ.



**Рис. 2.** Спектры ФМР, регистрируемые при различных направлениях сканирующего магнитного поля ( $B_0$ ) по отношению к плоскости трёх различных образцов: 1) плёнки палладия, имплантированной железом с дозой  $3.0 \times 10^{16}$  ион/см<sup>2</sup>; 2) той же плёнки после отжига в вакууме и 3) однородной плёнки сплава Pd<sub>0.925</sub>Fe<sub>0.075</sub>, полученной методом МЛЭ. Геометрия измерения схематически показана в нижней части рисунка под спектрами.

## Литература:

1. Bol'ginov V.V., Stolyarov V.S., Sobanin D.S., Karpovich A.L., Ryazanov V.V. *Magnetic switches based on Nb-PdFe-Nb Josephson junctions with a magnetically soft ferromagnetic interlayer* // JETP Lett. – 2021. – Vol. 95, Iss. 7. – P. 366-371.
2. Esmaeili A., Yanilkin I.V., Gumarov A.I., Vakhitov I.R., Gabbasov B.F., Kiiamov A.G., Rogov A.M., Osin Y.N., Denisov A.E., Yusupov R.V., Tagirov L.R. *Epitaxial growth of Pd<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub> films on MgO single-crystal substrate* // Thin Solid Films. – 2019. – Vol. 669. –P. 338-344.
3. Esmaeili A., Yanilkin I.V., Gumarov A.I., Vakhitov I.R., Gabbasov B.F., Yusupov R.V., Tatarsky D.A., Tagirov L.R. *Epitaxial thin-film Pd<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub> alloy: a tunable ferromagnet for superconducting spintronics* // Sci. China Mater. –2020. – Vol. 64, Iss. 5. – P. 1246-1255.
4. Gumarov A.I., Yanilkin I.V., Yusupov R.V., Kiiamov A.G., Tagirov L.R., Khaibullin R.I. *Iron-implanted epitaxial palladium thin films: Structure, ferromagnetism and signatures of spinodal decomposition* // Materials Letters. – 2021. – Vol. 305. – Article number 130783.
5. Piyanzina I., Gumarov A., Khaibullin R., Tagirov L. *Ab initio Investigation of Impurity Ferromagnetism in the Pd<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub> Alloys: Concentration and Position Dependences* // Crystals. – 2021. – Vol. 11, Iss.10. – Article number 01257.

**Аномальные магнитные свойства микро- и наноразмерных порошков фторидов редких земель**

Е.М. Алакшин<sup>1,2</sup>, А.Ю. Андреев<sup>1</sup>, А.М. Гараева<sup>1</sup>, А.Г. Киямов<sup>1</sup>, Е.И. Кондратьева<sup>1,2</sup>, И.В. Романова<sup>1</sup>, А.С. Сахацкий<sup>3</sup>, А.С. Семакин<sup>1</sup>, М.А. Черосов<sup>1</sup>, М.С. Тагиров<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт физики КФУ, Казань, Россия

<sup>2</sup> Академия наук Республики Татарстан, Казань, Россия

<sup>3</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Концентрированные двойные фториды лития и трифториды – редкоземельных элементов являются дипольными магнетиками. Они используются как в фундаментальной физике в качестве модельных объектов [1], так и имеют прикладной интерес. В частности, гигантскую магнитоотрицательную проявляет  $\text{LiDyF}_4$  [2]: легкоплоскостной антиферромагнетик с температурой Нееля 0,610(15) К, плоскость лёгкого намагничивания (001) [3]. Вторым объектом исследования из данного ряда это  $\text{LiTbF}_4$ , изинговский ферромагнетик с температурой Кюри 2,8741(16) К, ось лёгкого намагничивания [001] [4]. Кристаллическая симметрия всех тетрафторидов лития – редких земель относится к группе  $I4_1/a$ , элементарная ячейка содержит два магнитоэквивалентных редкоземельных иона  $\text{Re}^{3+}$  в узлах с симметрией  $S_4$  [1]. Соединение  $\text{DyF}_3$  обладает уникальными свойствами, благодаря которым возможно его применение в качестве МРТ контрастного агента [4] и электрокатализатора [5]. Монокристалл  $\text{DyF}_3$  представляет собой дипольный ферромагнетик с осью лёгкого намагничивания вдоль оси 010 кристаллической решетки; пространственная группа симметрии  $R\bar{3}m$  (орторомбическая); температура Кюри 2.55 К вдоль оси 010 для монокристалла [6]. Цель исследования – изучение магнитных свойств кристаллов этих фторидов в диапазоне температур 2-300 К в высоких полях (0-9 Т).

Микро- и наноразмерные порошки двойных фторидов получены спеканием фторидов лития и соответствующего редкоземельного элемента при температуре 600°C в атмосфере Ar. Наноразмерный порошок  $\text{LiTbF}_4$  синтезирован гидротермальным методом при температуре 230°C в автоклаве [7]. Измерение намагниченности образцов проведено вибрационным магнитометром VSM установки PPMS. Для наноразмерного образца  $\text{LiTbF}_4$  обнаружено уменьшение температуры Кюри на ~0,1 К относительно микро- и макрообразцов и монокристалла [8]. Для порошка  $\text{LiDyF}_4$  обнаружен магнитный гистерезис в парамагнитной фазе в диапазоне температур 2-7 К; наличие гистерезиса подтверждается и измерениями для монокристалла  $\text{LiDyF}_4$ . Появление гистерезиса объясняется медленной магнитной релаксацией, природа которой пока не установлена.

Также были получены нанопорошки трифторида диспрозия  $\text{DyF}_3$  со средним размером 30 нм x 16 нм, 50 нм x 30 нм, 70 нм x 40 нм, 220 нм x 150 нм методом соосаждения из коллоидных растворов посредством хлоридной реакции с гидротермальной обработкой [9], микро- и наноразмерные порошки размером до 45 мкм путем дробления монокристалла. Подтверждение кристалличности осуществлялось посредством рентгеноструктурного анализа на дифрактометре Bruker D8 Advance Cu K $\alpha$ ,  $\lambda=1.54$  Å. По фотографиям, полученным с помощью просвечивающей электронной микроскопии на микроскопе Hitachi HT Exalens, определялась форма и средний размер частиц в полученных порошках.

Были измерены полевые (0 - 7 Тл) зависимости намагниченности полученных образцов с помощью СКВИД-магнетометра MPMS XL-7 (Quantum Design), СПбГУ. Величина насыщения магнитного момента отличается для частиц разных размеров. Обнаружены петли магнитного гистерезиса, имеющие обратный ход кривой намагниченности, в ферро- и парамагнитной фазе.

Проведено моделирование энергетического спектра и намагниченности в модели обменных зарядов [3] в полном базисе электронной конфигурации  $Dy^{3+} 4f^9$  в  $DyF_3$ . Введен параметр магнитного упорядочения порошка, который позволяет качественно и количественно описать поведение магнитного момента для порошков различного размера. Степень магнитной упорядоченности порошка уменьшается с уменьшением характерного размера частиц.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-22-00257).

### Литература:

1. Aminov L.K., Malkin B.Z., Teplov M.A. Magnetic properties of nonmetallic lanthanide compounds // Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths. Elsevier, 1996. Vol. 22. P. 295-506.
2. Romanova I.V., Tagirov M.S. Magnetic and magnetoelastic properties of non-conducting rare-earth single crystals  $LiLnF_4$  ( $Ln = Tm, Tb, Ho, Dy$ ) (Review), // Magn. Reson. Solids. 2019. Vol. 21 P. 19412.
3. Mennenga G., de Jongh L.J., Huiskamp W.J., Laursen I. A comparative study of the magnetic ordering specific heats of four  $S = 1/2$  dipolar magnets:  $LiRF_4$  ( $R = Er, Dy, Ho, Tb$ ) // J. Magn. Mater., 1984. Vol. 44. I. 1 P. 48–58.
4. González-Mancebo D. et al.  $HoF_3$  and  $DyF_3$  Nanoparticles as Contrast Agents for High-Field Magnetic Resonance Imaging // Particle & Particle Systems Characterization. – 2017. – Т. 34. – №. 10. – С. 1700116.
5. Li Y. et al.  $DyF_3$ : an efficient electrocatalyst for  $N_2$  fixation to  $NH_3$  under ambient conditions // Chemistry—An Asian Journal. – 2020. – Т. 15. – №. 4. – С. 487-489.
6. Savinkov A. V. et al. Magnetic properties of  $Dy^{3+}$  ions and crystal field characterization in  $YF_3$ :  $Dy^{3+}$  and  $DyF_3$  single crystals // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2008. – Т. 20. – №. 48. – С. 485220.
7. Zhang Q., Yan B. Hydrothermal synthesis and characterization of  $LiREF_4$  ( $RE = Y, Tb-Lu$ ) nanocrystals and their core-shell nanostructures // Inorg. Chem. 2010. Vol. 49. P. 6834-6839.
8. Als-Nielsen J., Holmes L.M., Krebs Larsen F., Guggenheim H.J. Spontaneous magnetization in the dipolar Ising ferromagnet  $LiTbF_4$  // Phys. Rev. B. 1978. Vol. 12. No 1. P. 191-197.
9. Yi G. S., Chow G. M. Colloidal  $LaF_3$ : Yb, Er,  $LaF_3$ : Yb, Ho and  $LaF_3$ : Yb, Tm nanocrystals with multicolor upconversion fluorescence // Journal of Materials Chemistry. – 2005. – Т. 15. – №. 41. – С. 4460-4464.

## Применение магнитных наночастиц для биоинженерии и наномедицины

А.С. Минин<sup>1</sup>, М.А. Уймин<sup>1</sup>, А.С. Конев<sup>1</sup>, И.В. Зубарев<sup>2</sup>, А.М. Демин<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт, г. Москва

<sup>3</sup>Институт органического синтеза имени И.Я. Постовского УрО РАН, г. Екатеринбург

На базе магнитных наночастиц со структурой металлическое ядро (сплав FeCo) - углеродная оболочка, модифицированных аминокислотными группами, были сконструированы магнитоуправляемые белковые мембраны. При помощи магнитного поля эти мембраны можно поддерживать на плаву в питательной среде. Была показана возможность применять эти мембраны (рисунок 1) для создания псевдотрехмерных гетерогенных (состоящих из разных клеточных линий) культур клеток, что позволяет изучать различные особенности межклеточного взаимодействия [1].

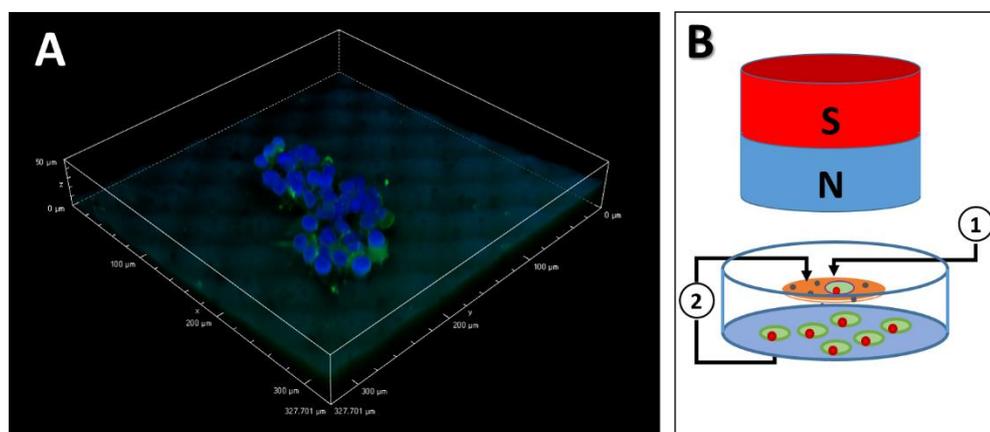


Рисунок 1. А - Клетки культуры MiaPaca-2, растущие на белковой магнитоуправляемой мембране, насыщенной наночастицами FeCo@C. В – схема эксперимента: 1 – мембрана с магнитными НЧ, 2 – клетки разных культур, растущие на мембране и на дне чашки, выделяющие различные биологически-активные молекулы в среду

Кроме этого, изучалось так же прямое взаимодействие магнитных наночастиц с живыми клетками. Исследовались наночастицы Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> синтезированные золь-гель методом в ИОС УрО РАН и газофазным методом в ИФМ УрО РАН. Было продемонстрировано накопление магнитных наночастиц в клетках, что может позволить селективно выделять их из среды [2, 3].

### Публикации:

1. [Development of a cell co-cultivation system based on protein magnetic membranes, using a MSLA 3D printer](#) [Текст] / A.Minin, I.Blatov, S.Rodionov, I.Zubarev // Bioprinting. — 2021. — V. 23. — P. 150 S
2. [L-Lysine-modified Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanoparticles for magnetic cell labeling](#) [Текст] / Aidar M.Murzakaev, Dmitry K.Kuznetsov, Mikhail A.Uimin, Artem S.Minin, Vladimir Ya.Shur, Alexander V.Belyavsky, Victor P.Krasnov // Colloids and surfaces B: Biointerfaces. — 2020. — V. 190. — P. 110879—110887. Q1
3. [Modification of chemically and physically obtained Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> magnetic nanoparticles with l-Lys for cell labeling](#) [Текст] / Demin A.M., Kandarakov O.F., Minin A.S., Kuznetsov D.K., Uimin M.A., Shur V.Y., Belyavsky A.V., Krasnov V.P. // Russian Chemical Bulletin. — 2021. — V. 70. — P. 1199—1208 Q4

*Актуальность:* конструирование искусственных клеточных систем для последующих биомедицинских исследований является актуальным направлением современной биоинженерии, и магнитные частицы позволяют решать различные задачи в этой области

*Цель исследования:* сконструировать биоинженерные магнитоуправляемые системы для создания псевдотрехмерных клеточных структур, а также селективного выделения живых клеток из биологических сред.

*Задачи исследования:*

1. Синтезировать наночастицы, обладающие большой намагниченностью насыщения и модифицировать их функциональными группами, позволяющими дальнейшее биомедицинское применение таких частиц.
2. Разработать магнитоуправляемые системы для сокультивирования, т.е. поддержания в живом состоянии в одном питательном растворе на достаточно близком расстоянии различных типов клеток
3. Использовать магнитные наночастицы для лейбеллинга (мечения) клеток и последующей их магнитной сепарации

*Объект исследования:* магнитные наночастицы FeCo@C и Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>

*Методы исследования:* различные химические и физико-химические методы синтеза магнитных наночастиц и их модификации, магнитные, оптические и структурные методы их анализа, различные биологические методы исследования (эксперименты на культурах клеток, лабораторных животных)

*Авторский вклад* сотрудников ИФМ:

**1. Была разработана технология синтеза и модификации магнитных наночастиц сплава FeCo, покрытых углеродной оболочкой.**

Наночастицы со структурой ядро-оболочка были синтезированы при помощи газофазного метода. Наночастицы на основе сплава FeCo обладают большой намагниченностью насыщения, что позволяет использовать их для магнитного контроля различных биологических объектов. Углеродная оболочка таких наночастиц обеспечивает им химическую стабильность, а также позволяет создавать на поверхности функциональные групп. В данном случае на поверхности частиц были пришиты амино группы -NH<sub>2</sub>, к которым на следующем этапе были присоединены белки БСА (бычий сывороточный альбумин). Поверхность объектов, содержащая такие белки, служит хорошей основой для выращивания на них клеток.

**2. Была разработана технология создания магнитоуправляемых белковых мембран, насыщенных магнитными наночастицами FeCo@C и была продемонстрирована возможность выращивания на них живых клеток**

Для культивирования ряда клеток необходима подложка. Отдельные частицы FeCo@C или даже их агрегаты слишком малы для этого; более того, необходим определенный рельеф подложки. Был найден способ создания такой подложки в виде полупроницаемой мембраны из магнитных частиц FeCo@C, покрытых белком. Для этого предварительно были разработаны и изготовлены при помощи 3d печати пластиковые матрицы для отливки силиконовых форм, в которых затем осуществлялась полимеризация

смеси магнитных наночастиц FeCo@C, модифицированных аминогруппами (-NH<sub>2</sub>) и белка (BCA) при помощи карбодиимида EDC. Применение 3d принтера для печати матриц позволило контролировать не только размер и форму мембран, но и их микрорельеф, так как точность и пространственное разрешение MSLA 3d печати составляет порядка 100 мкм.

Было показано, что клетки успешно растут на магнитоуправляемой мембране и их физиологические показатели находятся в пределах нормы. При помощи разработанной и изготовленной нами магнитной системы эту мембрану можно удерживать на определенной высоте над дном культурального сосуда. Одновременно на дне сосуда на стандартной подложке размещается вторая культура клеток. Таким образом, две разных культуры сосуществуют в одной среде, будучи разделены небольшим расстоянием порядка нескольких миллиметров. Это позволяет использовать данную систему для изучения различных путей межклеточной коммуникации.

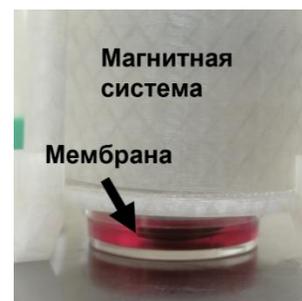


Рисунок - 2. Магнитоуправляемая мембрана, на которой растут клетки культуры Vero, удерживаемая в питательной среде при помощи магнитной системы

### 3. Были синтезированы и модифицированы аминокислотой L-лизином наночастицы Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> и показана их применимость для мечения и магнитной сепарации клеток

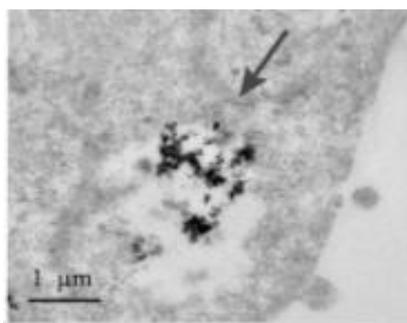


Рисунок - 3. ТЕМ клеток культуры K562, стрелками обозначены магнитные наночастицы

Двумя разными методами - газофазным и золь-гель методом были синтезированы магнитные наночастицы Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>. Далее они были конъюгированы с лизином, обеспечивающим положительный заряд в физиологических условиях. Было показано, что такие наночастицы эффективно накапливаются в живых клетках в количестве, достаточном для последующей магнитной сепарации этих клеток. Подобная технология позволяет использовать магнитные наночастицы как в биотехнологических задачах, так и в медицинских, например для выделения из кровотока циркулирующих онкологических клеток и их последующего исследования на чувствительность с терапии. Вклад сотрудников ИФМ:

1) синтез наночастиц газофазным методом, 2) измерение удельной поверхности сухого порошка и гидродинамических размеров, т.е. размеров агрегатов частиц в суспензиях, 3) измерение магнитных свойств частиц как до, так и после модификации, 4) анализ влияния гистерезисных свойств на устойчивость суспензий, что оказалось важным для проникновения внутрь клеток.

#### Выводы:

Были разработаны методы синтеза и модификации различных магнитных наночастиц и показана их применимость для решения различных биотехнологических и медицинских задач. На основе газофазных наночастиц FeCo@C были изготовлены белковые магнитоуправляемые мембраны и показана возможность культивирования на них клеток с целью последующего изучения межклеточных коммуникаций. Модифицированные L-лизином газофазные наночастицы магнетита, дольше сохраняются в клетках, чем частицы, полученные золь-гель методом, что открывает возможности для магнитной сепарации этих клеток для последующего исследования.

## Магнитная сепарация фотокаталитических наночастиц $\text{TiO}_2$ от водных суспензий

Ю.А. Бахтеева, И.В. Медведева, С.В. Жаков, М.А. Уймин, М.С. Филинкова, И.В. Бызов, А.М. Мурзакаев<sup>1</sup>

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

<sup>1</sup> Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург

Широкое внедрение инновационных технологий водоочистки с использованием нанопорошковых фотокатализаторов  $\text{TiO}_2$  сдерживается неразвитостью методов их последующего удаления из воды. Добавление к суспензии  $\text{TiO}_2$  магнитных наночастиц на основе железа, их последующая магнитная сепарация является современным малоотходным и энергосберегающим методом очистки воды от взвешенных частиц. Проведены сравнительные исследования магнитной седиментации и магнитной фильтрации водных суспензий, содержащих немагнитные  $\text{TiO}_2$  (25нм) и магнитные Fe-C-COOH (15нм) частицы. За счет электростатических взаимодействий в воде образуются крупные гетероагрегаты с гидродинамическим диаметром  $\sim 3$  мкм, которые задерживаются в неоднородных магнитных полях. Магнитная фильтрация (град  $\text{В} \sim 10^3$  Т/м) является более эффективным и более производительным способом сепарации наночастиц от водного раствора по сравнению с магнитной седиментацией (град  $\text{В} \sim 10^{-1}$  Т/м). За время 30 минут концентрацию частиц  $\text{TiO}_2$  снижается в 300-400 раз (Рис.1).

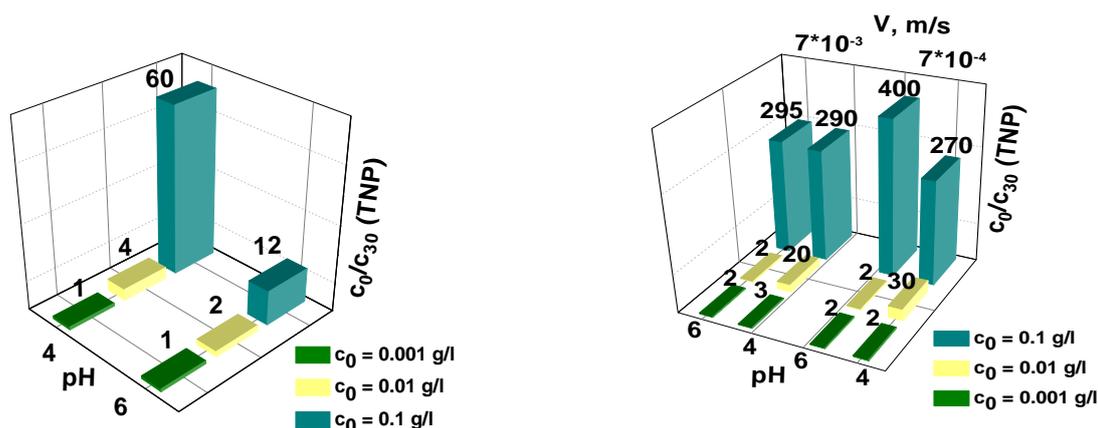


Рисунок 1. Уменьшение остаточной концентрации наночастиц  $\text{TiO}_2$  в водной суспензии после магнитной седиментации (а) и фильтрации (б) с использованием наночастиц Fe-C-COOH.

### Публикации:

1. Magnetic separation of water suspensions containing  $\text{TiO}_2$  photocatalytic nanoparticles / Yu.A. Bakhteeva, I.V. Medvedeva, S.V. Zhakov, I.V. Byzov, M.S. Filinkova, M.A. Uimin, A.M. Murzakaev // Separation and Purification Technolog. — 2021. — V. 269. — P. 118716—118723. (IF=5.7)
2. Magnetic sedimentation of nonmagnetic  $\text{TiO}_2$  nanoparticles in water by heteroaggregation with Fe-based nanoparticles / I.A. Bakhteeva, I.V. Medvedeva, M.S. Filinkova, I.V. Byzov, S.V. Zhakov, M.A. Uimin, A.E. Yermakov // Separation and Purification Technolog. — 2019. — V. 218. — P. 156—163. (IF=5.7)

*Актуальность* исследования: разработка надежных методов сепарации наноагентов водоочистки из воды после их использования.

*Цель* экспериментального исследования: изучить условия удаления наночастиц  $TiO_2$  из воды методами магнитной фильтрации и магнитной седиментации с использованием магнитных композитных наночастиц Fe-C-COON.

*Задачи* исследования: 1). Синтезировать магнитные наночастицы Fe-C-COON, способные образовывать агрегаты с целевыми наночастицами  $TiO_2$ ; 2). Определить оптимальные условия образования гетероагрегатов  $TiO_2/Fe-C-COON$  в водной среде: концентрация частиц, состав и заряд поверхностного слоя; 3). Установить условия эффективной магнитной сепарации наночастиц  $TiO_2$  от воды.

*Объекты* исследования: наночастицы  $TiO_2$  (25 nm), Fe-C-COON (15nm).

*Методы* исследования: газофазный и химический методы синтеза наночастиц; метод динамического рассеяния света; ИК-спектроскопия; просвечивающая микроскопия; метод ядерной магнитной резонансной релаксометрии; метод UV-спектрофотометрии, использованный совместно с математическим методом PLS (проекция на латентные структуры).

*Авторский вклад* сотрудников ИФМ: идея исследования, постановка задачи, проведение экспериментов, анализ результатов исследования, написание текста статьи.

## **1. Синтезированы композитные наночастицы Fe-C-COON и исследованы свойства гетерогенных суспензий $TiO_2/Fe-C-COON$ в зависимости от концентрации твердой фазы, соотношения магнитной и немагнитной компонент и кислотности водной среды (Табл.1)**

Таблица 2. Значения гидродинамического размера и зета потенциала агрегатов в гетерогенной суспензии  $(TiO_2)_{0.7}(Fe-C-COON)_{0.3}$ .

pH	$c_0 = 0.1$ г/л		$c_0 = 0.01$ г/л		$c_0 = 0.001$ г/л	
	$d_h, nm$	ZP, mV	$d_h, nm$	ZP, mV	$d_h, nm$	ZP, mV
4	$3000 \pm 1000$	$-5 \pm 5$	$700 \pm 50$	$-8 \pm 5$	$450 \pm 50$	$-8 \pm 5$
6	$3000 \pm 1000$	$0 \pm 5$	$400 \pm 50$	$-10 \pm 5$	$400 \pm 50$	$-12 \pm 5$

## **2. Изучена динамика магнитной седиментации и магнитной фильтрации гетерогенных суспензий $TiO_2/Fe-C-COON$ в зависимости от концентрации твердой фазы, соотношения магнитной и немагнитной компонент и от скорости потока.**

В процессе магнитной седиментации при pH = 4 и  $c_0 (TiO_2/Fe-C-COON) = 0.1$  г/л через 30 минут концентрация оксида титана уменьшается почти в 60 раз.

В процессе магнитной фильтрации снижение концентрации в первые и в последующие минуты сильно зависит от начальной концентрации твердой фазы. Наиболее быстрое начальное снижение концентрации частиц происходит при  $c_0(TiO_2/Fe-C-COON) = 0.1$  г/л, причем, эффективность удаления одинаково высокая при pH=4 и pH=6. В первые 30 минут концентрация  $TiO_2$  снижается в 300-400 раз до значения  $c \sim 3 \cdot 10^{-4}$  г/л, что близко к экологическому нормативу.

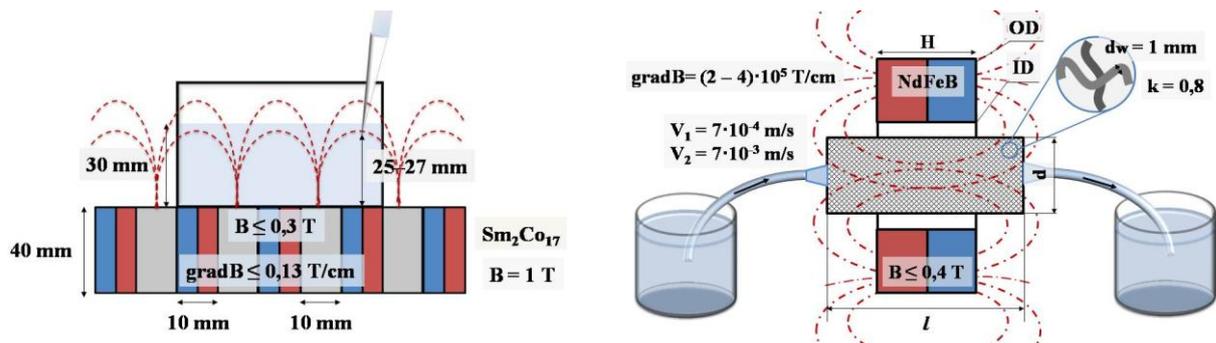


Рис. 2. Схемы магнитной седиментации (а) и фильтрации (б).

## Выводы:

Эффективность магнитной сепарации в значительной степени зависит от размеров гетероагрегатов, сформированных из целевых наночастиц  $\text{TiO}_2$  и магнитных семян  $\text{Fe-C-COOH}$ . Размеры агрегатов определяются зарядовым состоянием исходных частиц и их концентрацией в растворе. Показано, что для эффективного захвата целевых частиц  $\text{TiO}_2$  при магнитной фильтрации оптимальная доля добавленных магнитных семян  $\text{Fe-C-COOH}$  составляет 0,15 г/л для обработки суспензии с концентрацией диоксида титана 0,5 г/л, причем эта добавка также хорошо задерживается магнитным фильтром.

Магнитная фильтрация является более эффективным и более производительным способом сепарации твердых частиц от водного раствора по сравнению с магнитной седиментацией. Установлено, что в потоке воды со скоростью  $7 \cdot 10^{-3}$  м/с через фильтр длиной 50 см, магнитная фильтрация приводит к падению концентрации  $\text{TiO}_2$  в воде с 0,5 г/л до  $3 \cdot 10^{-4}$  г/л за 10 мин.

Полученные результаты могут служить базой для создания блока магнитной сепарации в фотокаталитических реакторах для очистки воды.

**Методика анализа экспериментальных данных спектральной магнитооптической эллипсометрии при проведении *in situ* исследований магнитных наноструктур**

Максимова О.А.<sup>1,2</sup>, Лященко С.А.<sup>1</sup>, Тарасов И.А.<sup>1</sup>, Яковлев И.А.<sup>1</sup>, Шевцов Д.В.<sup>1</sup>, Варнаков С.Н.<sup>1</sup>, Овчинников С.Г.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики им. Л.В.Киренского Сибирского отделения РАН – обособленное подразделение Федерального исследовательского центра “Красноярский научный центр Сибирского отделения РАН”, 660036 Красноярск, Россия

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

Синтез новых наноструктур с чередованием магнитных и немагнитных слоев актуален в связи с бурным развитием спинтроники. Это обуславливает перспективность разработки высокоточных и удобных в использовании методов контроля свойств получаемых структур. Неразрушающие *in situ* (т.е. проводимые в камере роста) методы анализа позволяют улучшить воспроизводимость результатов, уменьшить характерные размеры синтезируемых ферромагнитных структур за счет исключения влияния атмосферных газов на пленку. В связи с этим актуально развитие быстродействующих магнитооптических методов анализа ферромагнитных структур в прикладных и исследовательских целях, в том числе, развитие нового метода магнитооптической эллипсометрии [1], основанного на измерении магнитооптического экваториального эффекта Керра с помощью спектральной эллипсометрии *in situ*.

В лаборатории физики магнитных явлений ИФ СО РАН в последние годы совместно с ИФП СО РАН разработан и создан сверхвысоковакуумный комплекс для получения и *in situ* исследования наноструктур методом спектральной магнитооптической эллипсометрии, который позволяет проводить напыление магнитных слоев в присутствии внешнего постоянного магнитного поля и измерение эллипсометрических параметров и их изменений в магнитном поле. Предполагалось, что по данным магнитооптической эллипсометрии на отражение при соответствующей обработке данных можно будет получить информацию о тензоре диэлектрической проницаемости (далее ТДП) и величине магнитного кругового дихроизма (далее МКД), а также о связи электронной структуры с магнитными свойствами исследуемого материала.

Проведенный литературный обзор существующих в мире алгоритмов обработки магнитоэллипсометрических данных показал, что невозможно остановиться на одном из описанных в литературе вариантов, так как ни один из них не может быть использован при обработке данных с привлечением различных моделей отражающих систем, включая многослойную, и одновременно быть простым и надежным для характеристики данных спектральных измерений, получаемых *in situ* от сверхвысоковакуумного магнитоэллипсометрического комплекса с экваториальной конфигурацией магнитооптического эффекта Керра в видимом оптическом диапазоне. Необходимость получения информации о компонентах ТДП и их зависимости от магнитного поля послужила стимулом к появлению данной работы.

Соответственно был проведен ряд исследований, направленных на развитие методики обработки данных магнитооптической эллипсометрии, включая решение обратной задачи магнитоэллипсометрии. В ходе выполнения исследований:

- Рассмотрен ряд моделей отражающих систем, учитывающих структуру, толщину, оптические и магнитные свойства слоев, для каждой из них получены соотношения, связывающие наблюдаемые эллипсометрические и магнитоэллипсометрические углы с компонентами ТДП магнитного слоя [1-8].

- Разработаны и реализованы алгоритмы расчета компонент ТДП по данным магнитоэллипсометрических измерений в виде программного кода в среде MATLAB с использованием различных моделей отражающих магнитных наноструктур [1-8].

- Успешно проведена апробация алгоритмов расчета компонент ТДП на образце Fe/SiO<sub>2</sub>/Si с толщиной слоя Fe 160,5 нм [3,4].

- В работе впервые проведен комплекс теоретических и экспериментальных *in situ* магнитоэллипсометрических спектральных исследований магнитных наноструктур Fe/SiO<sub>2</sub>/Si с разной толщиной слоя Fe на подложке SiO<sub>2</sub>/Si. В результате определены комплексные диагональные и недиагональные компоненты ТДП магнитного слоя Fe разной толщины. Определено, что оптические и магнитооптические свойства железа в образцах Fe/SiO<sub>2</sub>/Si зависят от толщины слоя ферромагнетика. Полученные спектральные зависимости компонент ТДП сопоставлены с рассчитанными зависимостями для железа в рамках теории функционала плотности и с литературными данными других авторов [3, 4, 9, 10].

- Рассмотрена целесообразность учета интерфейсов и их роль в формировании ТДП тонких слоев ферромагнитного металла. Показано, что вклад межзонных матричных элементов для ферромагнитных пленок, имеющих недиагональные компоненты ТДП, определяет соотношение между диагональной и недиагональной компонентами ТДП при толщинах ферромагнитного слоя порядка 10 нм [11].

- По данным магнитоэллипсометрических измерений с использованием разработанных алгоритмов анализа данных впервые получены значения компонент ТДП, оптической проводимости и магнитного кругового дихроизма эпитаксиальных тонких пленок Mn<sub>2</sub>GaC, являющихся магнитными МАХ-материалами, при температурах 296 К и 140 К в спектральном диапазоне 1,4-3,5 эВ [12].

Ценность работы заключается в разработке нового подхода к обработке экспериментальных данных *in situ* спектральной магнитооптической эллипсометрии на отражение, позволяющего проводить фундаментальные исследования магнитооптических свойств, получать информацию о спектральных зависимостях ТДП и МКД. Соответственно, можно анализировать спектральные зависимости для структур, содержащих ферромагнитный слой, получаемые как непосредственно в процессе их роста в сверхвысоковакуумной камере, так и по завершении роста. Следует подчеркнуть, что разработанный подход применим к образцам, на которых затруднительно проведение магнитооптических экспериментов на пропускание, например за счет непрозрачности подложки.

Особый интерес представляет показанная возможность проведения неразрушающего анализа для исследования магнитооптических свойств новых МАХ-материалов (новых материалов с атомарно-слоевой анизотропной структурой, где М - переходный элемент; А - элемент из группы 13 или 14; Х - углерод или азот), являющихся одним из актуальных решений проблемы сокращения энергетических и сырьевых затрат при производстве новых устройств электроники, высокочувствительных датчиков, коррозионностойких покрытий.

Разработанные модели можно применить как для исследовательских целей, так и в прикладных задачах по контролю качества продукции микроэлектронной промышленности, где используются многослойные эпитаксиальные и поликристаллические ферромагнитные структуры. Ключевыми преимуществами являются достаточность, надежность, простота, а также возможность использования разработанных моделей для анализа, не только *ex situ*, но и *in situ* измерений, что сокращает время и повышает эффективность анализа экспериментальных данных.

Работа выполнена при поддержке правительства РФ для государственной поддержки научных исследований, проводимых под руководством ведущих ученых (проект № 075-15-2019-1886) и Российского научного фонда (проект №21-12-00226).

## Литература:

1. Максимова, О.А. Оптические и магнитооптические свойства магнитных наноструктур по данным *in situ* спектральной магнитооптической эллипсометрии [Рукопись] : специальность 01.04.07 "Физика конденсированного состояния" : диссертация на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук / О. А. Максимова ; науч. рук. С. Г. Овчинников; Ин-т физики им. Л.В. Киренского. - Красноярск, 2020. - 130 с.
2. O. A. Maximova, N. N. Kosyrev, S. N. Varnakov, S. A. Lyashchenko, S. G. Ovchinnikov. Single-layer model of reflective nanostructures for magneto- ellipsometry data analysis // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 2016 - Vol. 155. - N. 1 - P. 012030.
3. Olga Maximova, Nikolay Kosyrev, Ivan Yakovlev, Dmitriy Shevtsov, Sergey Lyaschenko, Sergey Varnakov, Sergey Ovchinnikov. Magneto-ellipsometry as a powerful technique for investigating magneto-optical structures properties // Journal of Magnetism and Magnetic Materials, - 2017. – Vol. 440. – P.153.
4. O.A. Maximova, N.N. Kosyrev, S.N. Varnakov, S.A. Lyaschenko, I.A. Yakovlev, I.A. Tarasov, D.V. Shevtsov, O.M. Maximova, S.G. Ovchinnikov. In situ magneto-optical ellipsometry data analysis for films growth control // Journal of Magnetism and Magnetic Materials, -2017. – Vol.440. – P.196.
5. Maximova, Olga A.; Ovchinnikov, Sergey G.; Kosyrev, Nikolay N.; Lyaschenko, Sergey A. Two-layer Model of Reflective Ferromagnetic Films in Terms of Magneto-optical Ellipsometry Studies // Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics, 2017 – Vol. 10 – N. 2 – P. 223–232.
6. Maximova O.A., Lyaschenko S.A., Varnakov S.N. and Ovchinnikov S.G. Multilayered ferromagnetic nanostructures study: processing data from magneto-ellipsometry measurements // Defect and Diffusion Forum, 2018 - Vol. 386, pp. 131-136.
7. O. Maximova, S. Ovchinnikov and S. Lyaschenko. Analytical calculation of dielectric permittivity tensor from magneto-optical ellipsometry measurements // J. Phys. A: Math. Theor. 2021 – Vol. 54, P. 295201.
8. Максимова О.А., Лященко С.А., Варнаков С.Н., Овчинников С.Г. Магнитооптический параметр Q для структур с одноосной оптической анизотропией // ЖЭТФ, 2021, – Т. 160, №5 – С. 678.
9. O. A. Maximova, S. A. Lyaschenko, M. A. Vysotin, I. A. Tarasov, I. A. Yakovlev, D. V. Shevtsov, A. S. Fedorov, S. N. Varnakov, and S. G. Ovchinnikov. Experimental and Theoretical In Situ Spectral Magneto-Ellipsometry Study of Layered Ferromagnetic Structures // JETP Letters, 2019 – Vol. 110, pp. 166-172.
10. O. Maximova, S. Lyaschenko, I. Tarasov, I. Yakovlev, Y. Mikhlin, S. Varnakov, S. Ovchinnikov The Magneto-Optical Voigt Parameter from Magneto-Optical Ellipsometry Data for Multilayer Samples with Single Ferromagnetic Layer // ФТТ, 2021, – Т. 63, вып. 9, – С. 1311.
11. С. Г. Овчинников, О. А. Максимова, С. А. Лященко, И. А. Яковлев, С. Н. Варнаков Роль интерфейсов в формировании тензора диэлектрической проницаемости тонких слоев ферромагнитного металла // Письма в ЖЭТФ, 2021 – Т. 114, вып. 3, – С. 192 – 195.
12. S. Lyaschenko, O. Maximova, D. Shevtsov [et al.] Optical and magneto-optical properties of epitaxial Mn<sub>2</sub>GaC MAX phase thin film // J. Magn. Magn. Mater. - 2021. - Vol. 528. - P. 167803.

## Прямое наблюдение топологического эффекта Холла в наноструктурированных пленках Co/Pt

М.В. Сапожников<sup>1</sup>, Н.С. Гусев<sup>1</sup>, С.А. Гусев<sup>1</sup>, А.А. Фраерман<sup>1</sup>, Ю.В. Петров<sup>2</sup>, А.Г. Темиряев<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт Физики Микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Россия

<sup>3</sup>Фрязинский филиал Института радиотехники и электроники РАН, Россия

В работе исследуется топологический эффект Холла (ТЭХ) возникающий в плотных искусственных решетках магнитных скирмионов. Решетки скирмионов формируются в процессе перемагничивания наноструктурированных многослойных пленок Co/Pt с перпендикулярной магнитной анизотропией. Для непосредственного наблюдения ТЭХ разработан метод одновременного измерения в образцах эффекта Холла и магнитооптического эффекта Керра (МОЭК). Метод основан на идее разной величины топологических эффектов на нулевой и оптической частотах, которая обоснована сделанными аналитическими оценками величины топологических магнитооптических эффектов.

Хотя к сегодняшнему времени о наблюдении топологического эффекта Холла сообщается в достаточно большом количестве экспериментальных работ, до сих пор стоит вопрос о том, как непосредственно в эксперименте разделить аномальный и топологический эффекты Холла. Обычно авторы *a-priori* предполагают некую форму аномального эффекта, который потом вычитают из общего сигнала. В нашей работе мы оценили величину топологического вклада в магнитооптические эффекты и нашли, что он мал. Это позволило нам обоснованно использовать метод одновременного измерения МОЭК и эффекта Холла для непосредственного извлечения значений ТЭХ в ходе эксперимента. Кроме того, были разработаны и изготовлены наноструктурированные пленки Co/Pt специального дизайна, в которых в процессе перемагничивания образовывались решетки скирмионов с заданной плотностью топологического заряда.

Оценка величины топологического вклада в МОЭК была сделана в том же классическом приближении, в котором было проведен расчет топологических эффектов в постоянном токе [1]. Дополнительное условие, которое позволяет провести аналитические расчеты в нашем случае заключается в том, что частота возбуждающего электроны электрического поля ( $\omega$ ) должна быть много больше частоты резонанса магнитного момента электронов в обменном поле ферромагнитного материала ( $\omega_R$ ), что вполне соответствует оптическим частотам. Можно показать, что в этом случае величина эффективного магнитного поля, возникающего

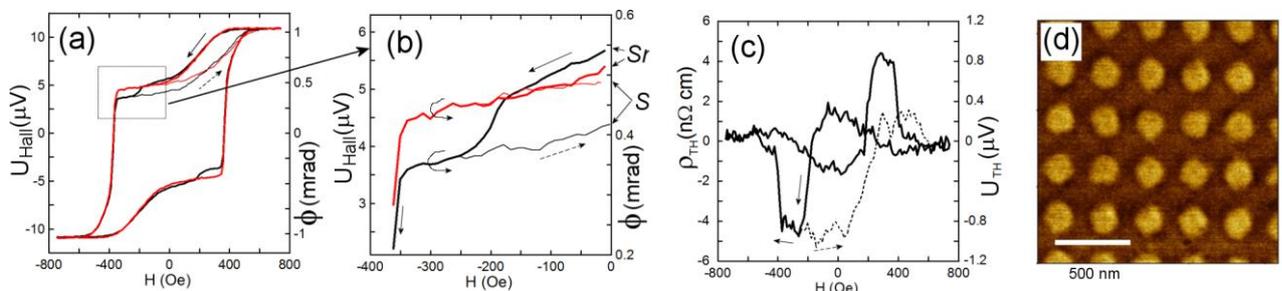


Рис. 1. Экспериментальные данные для образца 1 (период решетки 300 nm, диаметр облученного пятна 200 nm) (a) петли гистерезиса МОКЭ (красная линия) и эффекта Холла (черная линия), построенные в одном масштабе. Минорные петли проведены более тонкими линиями. (b) Подробный вид ступеньки на кривой Холла. (в) Кривая гистерезиса топологического эффекта Холла. Пунктирная линия - минорная петля гистерезиса. (d) MFM изображение системы.

в системе с некопланарным распределением намагниченности, обладающим топологическим зарядом, будет  $B = \Phi_0 \psi (\omega_R / \omega)^2$ , где  $\Phi_0$  - квант магнитного потока, а  $\psi$  - локальная плотность топологического заряда в распределении намагниченности. Таким образом, в выражении для эффективного магнитного поля на оптической частоте появляется дополнительный множитель  $(\omega_R / \omega)^2 \sim 10^{-2} \div 10^{-4}$ , который отсутствует в выражении для эффективного поля ТЭХ на постоянном токе.

Для измерения топологического эффекта холла были изготовлены наноструктурированные образцы многослойных пленок (Co 0.5 нм / Pt 1 нм)<sub>5</sub>, которые имеют перпендикулярную ось легкого намагничивания. Методом локального облучения пленок ионами гелия (диаметр пятна засветки 200 ÷ 300 нм, флюенс  $2 \div 4 \times 10^{15} \text{ см}^{-2}$ ) величина этой анизотропии была локально уменьшена. Подобные структуры демонстрируют формирование плотных решеток цилиндрических магнитных доменов (ЦМД) в процессе перемагничивания (рис. 1d). Предварительные микромагнитные расчеты, выполненные с использованием открытого программного пакета OOMMF, показали, что топология ЦМД, возникающих в ходе перемагничивания, зависит от распределения флюенса ионов He<sup>+</sup> по площади пятна засветки. В том случае, если флюенс ионов He<sup>+</sup> распределен равномерно, формирующиеся ЦМД имеют в большинстве тривиальную топологию (рис. 2d). При неоднородном концентрически распределенном флюенсе, и соответственно при концентрически модулированной величине анизотропии, формирующиеся ЦМД имеют топологию магнитного скирмиона. Методами Лоренцевой просвечивающей микроскопии (ЛПМ) было непосредственно показано, что ЦМД, образующиеся в системе, являются магнитными скирмионами (рис. 2a).

Решетки магнитных скирмионов формировались в перекрестии холловского моста ( $150 \times 150 \text{ }\mu\text{m}^2$ ). Луч He-Ne лазера фокусировался на перекрестие, что позволило проводить измерение полярного МОЭК и эффекта Холла одновременно. Петли гистерезиса для МОЭК и Холловского напряжения для одного из образцов приведены на рис. 1. в одинаковом масштабе. Видно, что величина Холловского напряжения демонстрирует резкую ступеньку в том месте, где никаких особенностей МОЭК не наблюдается. Поскольку на оптической частоте топологический вклад в МОЭК отсутствует, разница между напряжением Холла и отмасштабированной по величине сигнала в насыщении величиной МОЭК будет непосредственно являться величиной ТЭХ (рис. 1с)

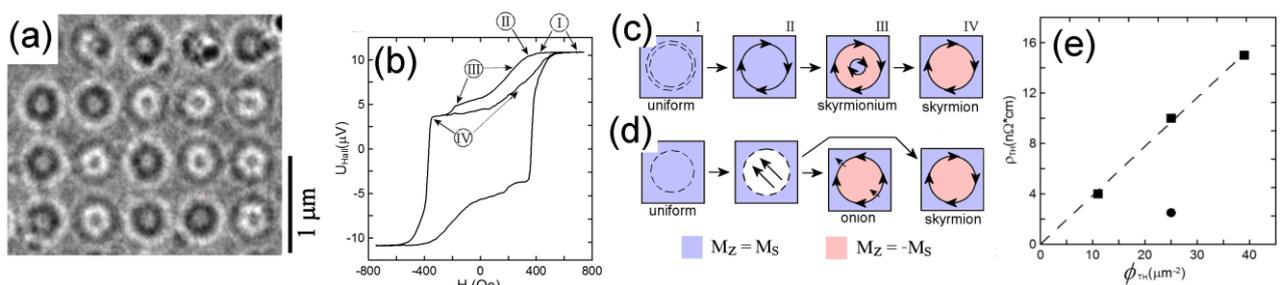


Рис. 2 (а) ЛПМ изображение решетки блоховских скирмионов в размагниченном состоянии. (б) Петля гистерезиса эффекта Холла образца 1. Цифрами обозначены части петли, соответствующие разным магнитным состояниям системы. (с), (d) Схематически представленные результаты микромагнитного моделирования последовательности магнитных состояний в образцах при перемагничивании. Стрелки обозначают направление намагничивания в плоскости. (с) Случай концентрического распределения величины анизотропии в облученном пятне (образцы 1, 2 и 3). Все формирующиеся ЦМД имеют топологию скирмиона. (d) Случай однородно уменьшенного значения анизотропии в пятне (образец 4). (е) Зависимость ТЭХ от плотности облученных пятен в системе. Квадраты - образцы с концентрическим распределением плотности потока излучения в пятне, в которых образуются плотные решетки скирмионов.

Наблюдаемый ТЭХ связан с формированием решетки скирмионов. Как показывает микромагнитное моделирование, образование скирмиона происходит в результате коллапса центрального кора первоначально образующегося кольцевого домена, за которым в последнее время закрепилось название "скирмиониум". В свою очередь формирование скирмиониума обусловлено концентрическим распределением флюенса по пятну. Облучение проводилось таким образом, чтобы наружная кольцевая область пятна получила большую дозу облучения, с тем чтобы в этом кольце анизотропия была уменьшена до значений соответствующих плоскости легкого намагничивания. Схематически последовательность возникающих в системе магнитных состояний и соответствующих им участков петли намагничивания приведены на рис. 2. Поскольку в момент коллапса кор скирмиониума имеет малый магнитный объем, изменения МОЭК практически не происходит. В то же время одномоментно возникающий в системе топологический заряд приводит к возникновению ТЭХ и ступеньке на холловской кривой. Замечательным является тот факт, что наблюдаемая величина ступеньки в эффекте Холла для разных образцов прямо пропорциональна плотности образующихся в них скирмионных решеток (рис. 2е).

Дополнительно было проведено исследование образца с равномерным распределением флюенса  $\text{He}^+$  по пятну засветки. Предварительное микромагнитное моделирование показало, что в этом случае перемагничивание системы идет более стохастически и большая часть образующихся ЦМД топологически тривиальны (рис. 2d). Экспериментальная измеренная величина ТЭХ составила  $0,1 \text{ н}\Omega/\mu\text{m}^2$  на облученное пятно. Это говорит о том, что большинство ЦМД в таком образце являются топологически тривиальными. Кроме того, можно утверждать, что возникающие в системе тривиальные ЦМД не приводят к возникновению эффекта, то есть он действительно имеет топологическую природу.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 18-72-10026).

#### **Литература:**

1. Aharonov Y., and Stern A., Origin of the Geometric Forces Accompanying Berry's Geometric Potentials // Phys. Rev. Lett. – 1992. – Vol. 69. –P. 3593.

#### **Публикации по теме работы:**

1. M.V. Sapozhnikov, Y.V. Petrov, N.S. Gusev, A.G. Temiryazev, O.L. Ermolaeva, V.L. Mironov, O.G. Udalov, Artificial Dense Lattices of Magnetic Skyrmions // Materials – 2020. – Vol.13, – P. 99

2. M.V. Sapozhnikov, N.S. Gusev, S.A. Gusev, D.A. Tatarskiy, Yu.V. Petrov, A.G. Temiryazev, A. A. Fraerman, Direct observation of topological Hall effect in Co/Pt nanostructured films // Phys. Rev. B – 2021. – Vol. 103, P. 054429

3. Гусев Н.С., Дудин Ю.А., Садовников А.В., Сапожников М.В., Модификация поверхностного взаимодействия Дзялошинского-Мория в пленках Co/тяжелый металл при облучении ионами гелия // ФТТ – 2021. – Т.63, – С.1263

**Доменные стенки в пленках с анизотропным взаимодействием Дзялошинского-Мория**М.В. Сапожников<sup>1</sup>, Р.В. Горев<sup>1</sup>, Н.С. Гусев<sup>1</sup>, О.Г. Удалов<sup>1,2</sup>, А.В. Садовников<sup>2</sup><sup>1</sup>Институт Физики Микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия<sup>2</sup>Саратовский государственный университет, Россия

Теоретически предсказан и экспериментально обнаружен новый тип доменных стенок и доменных структур в тонких магнитных пленках с перпендикулярной анизотропией. Наблюдаемые ориентированные полосовые домены и домены зигзагообразной формы являются следствием анизотропии поверхностного взаимодействия Дзялошинского-Мория (пВДМ). Продемонстрирована возможность управления доменной структурой в пленках Co/Pt путем манипулирования ВДМ при приложении одноосных механических деформаций.

Доменные стенки (ДС) в тонких ферромагнитных пленках рассматриваются как перспективные кандидаты в качестве носителей информационных битов в устройствах беговой магнитной памяти, в спинтронных устройствах передачи и обработки данных. Статические и динамические свойства ДС зависят от взаимодействия между обменной связью, магнитокристаллической анизотропией и магнитостатическим взаимодействием. Ранее было показано, что в размагниченных пленках с перпендикулярной магнитной анизотропией и с пВДМ реализуются лабиринтные доменные структуры с произвольной ориентацией доменных стенок. При этом ориентация намагниченности  $\phi$  в самой ДС зависит от величины пВДМ. Стенка может иметь как Блоховскую ( $\phi=\pi/2$ ), так Неелевскую ( $\phi=0$ ) или промежуточную наклонную структуру в зависимости от величины пВДМ [1].

В данной работе была аналитически решена задача о доменной стенке в ферромагнитной пленке с анизотропным пВДМ. Показано, что структура доменной стенки зависит от средней величиной коэффициентов пВДМ. При этом ориентация намагниченности  $\phi$  в доменной стенке определяется простым выражением  $\cos(\phi)=(D_x+D_y)/\alpha$  ( $\alpha$  - некий параметр характеризующий магнитостатическую энергию системы). При этом сама доменная стенка имеет минимум энергии при определенной ориентации относительно главных осей тензора пВДМ, которая характеризуется углом  $\beta$ . Между ориентацией намагниченности в стенке ( $\phi$ ) и ориентацией самой стенки ( $\beta$ ) оказываются связаны простым соотношением  $\beta=\phi/2$ , диаграмма равновесных ориентаций приведена на Рис. 2d. В силу вырожденности энергии доменной стенки относительно  $\pm\beta$  образующаяся доменная структура должна быть зигзагообразной, что было подтверждено методами микромагнитного моделирования (Рис. 1).

Для экспериментальной проверки полученных теоретических предсказаний были изготовлены образцы многослойных магнитных структур (Co 0.7нм/Pt 1нм)<sub>4</sub>, имеющие анизотропию типа легкая ось. Ранее нами было показано, что в подобных структурах константа пВДМ анизотропным образом меняется при приложении одноосных деформаций растяжения или сжатия [2], что достигается изгибом подложки, на которую нанесена многослойная магнитная пленка (Рис. 1).

Образующиеся доменные структуры при разных величинах деформации исследовались методами магнитосилового микроскопии (МСМ) с последующим Фурье-анализом полученных изображений. Перед каждым магнитосиловым измерением пленка размагничивалась в переменном магнитном поле. На Рис. 1 приведены результаты, полученные для одного из образцов для случая недеформированной пленки и пленки, одноосно сжатой на 0.04% и на 0.08%. В недеформированном образце наблюдается лабиринтная изотропная доменная структура с характерным периодом 200нм, которой соответствует кольцевая симметрия пространственного Фурье-спектра. При сжатии пленки доменная структура меняется. Сперва

она становится полосовой, при этом на Фурье-изображении появляется 2 максимума. Дальнейшее сжатие приводит к формированию зигзагообразной доменной структуры. Это проявляется в пространственном Фурье-спектре как формирование четырех максимумов. Анализ Фурье спектров позволяет извлечь среднюю величину угла  $\beta$ , характеризующий ориентацию доменных стенок относительно главных осей тензора пВДМ и его дисперсию. При сжатии на 0.00%  $\beta \approx 40^\circ$ . При деформациях одноосного растяжения доменная структура сохраняет свой изотропный лабиринтный вид.

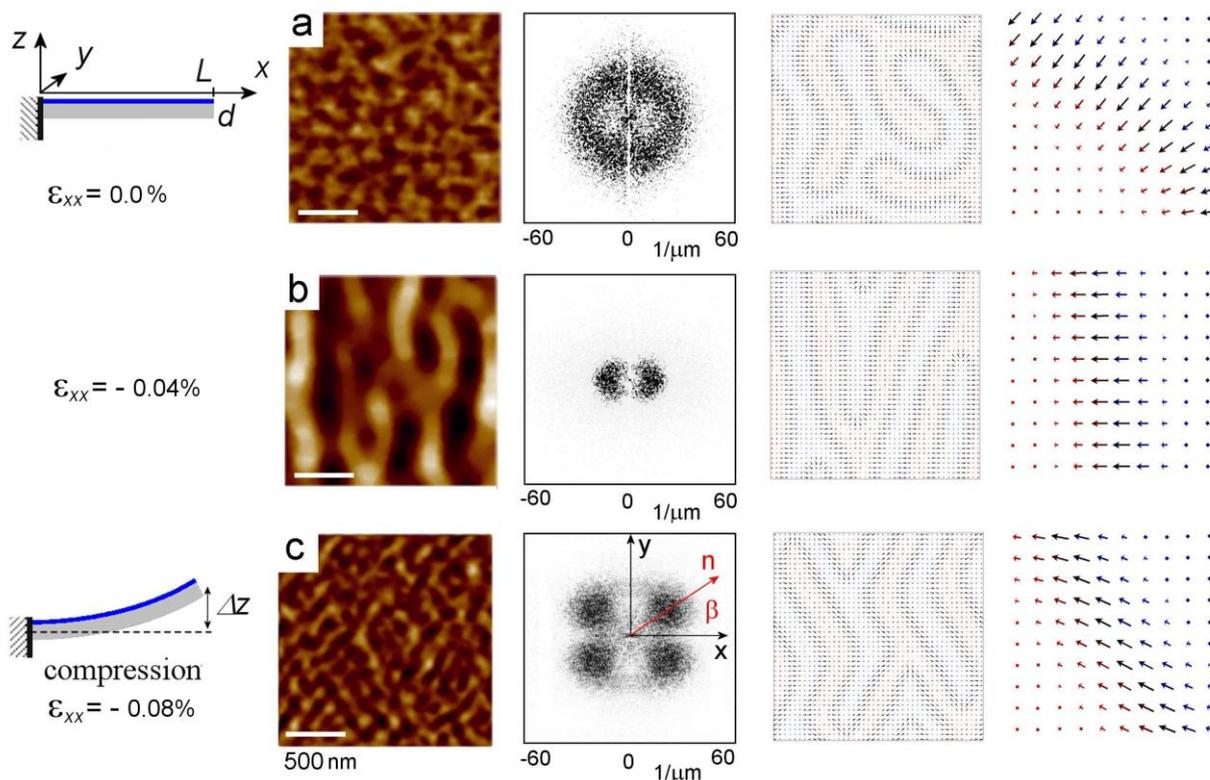


Рис. 1. Первый столбец: Геометрия измерений. Значения  $L$  и  $d$  - длина и толщина образца (включая подложку). Серая часть образца - это подложка, а синяя часть - многослойная магнитная пленка. Один конец образца закреплен, а другой может изгибаться, вызывая механическую деформацию магнитной пленки. Смещение  $\Delta z$  определяет величину деформации. Красная стрелка показывает область измерений с наибольшей деформацией. Указаны соответствующие значения деформаций  $\varepsilon_{xx}$ . Изображения в каждой строке приведены для значений деформаций указанных в первом столбце. Второй столбец: МСМ-изображения доменных структур полученные при соответствующих деформациях. Третий столбец: пространственные Фурье спектры доменных структур из второго столбца. Белый цвет соответствует гармонике Фурье с нулевой амплитудой. Черный цвет соответствует гармоникам Фурье с большой амплитудой. Деформация приложена по оси абсцисс. Четвертый столбец: доменные структуры полученные методами микромагнитного моделирования. Пятый столбец: увеличенное изображение доменных стенок для структур из четвертого столбца.

Непосредственные измерения констант пВДМ выполненные методом исследования рассеяния Мандельштама - Бриллюэна подтвердили, что сжатие исследуемых образца приводит к анизотропии пВДМ (Рис 2а). Наблюдаемые изменения величины констант пВДМ велики ( $\sim 100\%$ ), причем величина  $D_y$  даже меняет знак. При растяжении пВДМ меняется по величине, но остается изотропным. Полученные данные для констант пВДМ позволяют рассчитать значения  $\beta$  для различных величин деформации используя аналитически рассчитанное выражение для равновесного  $\beta$ . Рассчитанные значения  $\beta$  демонстрируют хорошее совпадение со значениями, полученными на основе анализа Фурье-спектров МСМ изображений доменных структур. (Рис. 2bc). Кроме того, экспериментально полученные данные для величины  $\beta$  совместно представлены на теоретически рассчитанной диаграмме зависимости  $\beta$  от  $D_x$ ,  $D_y$  (Рис. 2d). На рисунке видно, как происходит "движение" доменной

структуры по теоретически рассчитанной диаграмме равновесной ориентации доменной стенки при деформации образца и изменении соответствующих констант пВДМ.

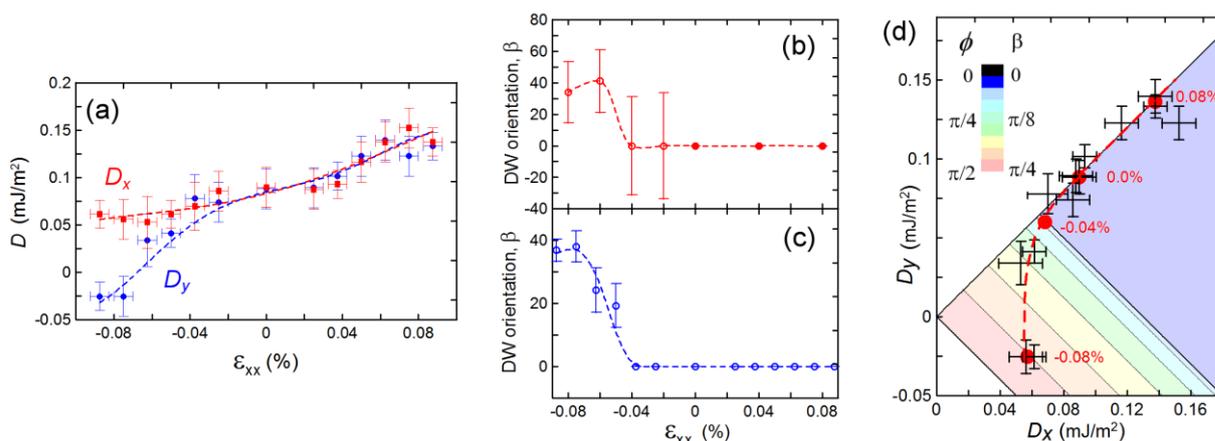


Рис. 2 (а) Константы пВДМ ( $D_x, y$ ), измеренные вдоль направлений  $x$  (красный цвет) и  $y$  (синий), как функции приложенной деформации ( $\epsilon_{xx}$ ). (b) Средний угол ориентации стенки  $\beta$  и его дисперсия в зависимости от деформации полученные по результатам МСМ измерений. Сплошные красные кружки обозначают лабиринтные доменные структуры без преимущественной ориентации (см. Рис. 1). Незакрашенные окружности соответствуют случаям, когда существует предпочтительная ориентация доменной стенки. Вертикальные отрезки показывают дисперсию угла  $\beta$ . (с) Значения  $\beta$ , рассчитанные по данным рассеяния Мандельштама - Бриллюэна. (d) Диаграмма равновесной ориентации доменных стенок в зависимости от  $D_x, y$  (показан квадрант  $|D_y| < D_x$ ). Цветами показана теоретически рассчитанная зависимость для  $\beta$  и  $\phi$ . Линия  $D_y = D_x$  соответствует изотропной лабиринтной доменной структуре. Красные кружки соответствуют МСМ изображениям, показанным на Рис.1. Черные перекрестья соответствуют значениям констант пВДМ, приведенным на (а).

Сделанные в работе оценки и приведенные симметричные соображения показывают, что наблюдаемая перестройка доменной структуры не может быть обусловлена возможным изменением магнитной анизотропии системы.

Работа выполнена в рамках госконтракта №. 0030-2021-0021 и в теоретической части поддержана грантом РФФ №.18-72-10026.

### Литература:

1. T.N.G. Meier, M. Kronseder, C.H. Back, Domain-width model for perpendicularly magnetized systems with Dzyaloshinskii-Moriya interaction // Phys. Rev. B – 2017 – Vol.96 – P.144408.
2. N. S. Gusev, A. V. Sadovnikov, S. A. Nikitov, M. V. Sapozhnikov, and O. G. Udalov, Manipulation of the Dzyaloshinskii–Moriya Interaction in Co/Pt Multilayers with Strain // Phys. Rev. Lett. – 2020. – Vol.124 – P.157202

### Публикации по теме работы:

1. O.G. Udalov, M.V. Sapozhnikov, Orientation and internal structure of domain walls in ferromagnetic films with anisotropic Dzyaloshinskii-Moriya interaction // Journal of Magnetism and Magnetic Materials – 2021. – Vol. 519 – P.167464
2. M.V. Sapozhnikov, R.V. Gorev, E.V. Skorokhodov, N.S. Gusev, A. V. Sadovnikov, O.G. Udalov, Zigzag domains caused by strain-induced anisotropy of Dzyaloshinskii-Moriya interaction // Phys. Rev. B – принята к печати.

## Управление спектром магнитоэлектронных волн, оптически возбуждаемых в ферромагнитных анизотропных пленках

Н.Е. Хохлов, Я.А. Филатов, П.И. Геревенков, А.М. Калашникова

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

В последнее десятилетие фемтосекундные лазерные импульсы стали мощным инструментом для управления сверхбыстрой динамикой намагниченности и обладают рядом значительных преимуществ по сравнению с традиционными экспериментальными методами [1]. Развитие современного магнетизма привело в соприкосновение фемтомагнетизм [1] и магнонику [2]: недавно было продемонстрировано оптическое возбуждение спиновых волн (СВ) [3]. С другой стороны, активное оптическое управление распространением СВ является актуальной задачей магноники [4]. Но характерные времена такого управления пока далеки от сверхбыстрого режима. Таким образом, использование фемтосекундных лазерных импульсов в реконфигурируемой магнонике является современной проблемой фундаментального магнетизма с потенциальным влиянием на разработку будущих устройств обработки данных.

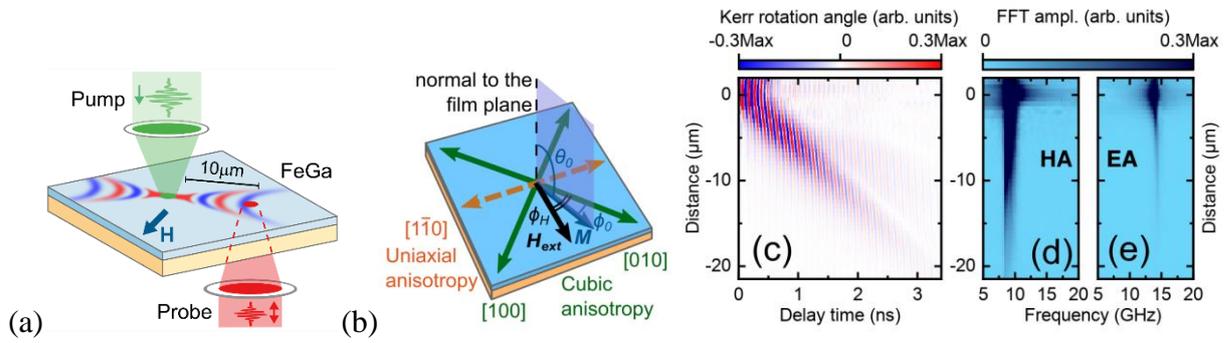


Рис. 1 а) схема эксперимента по оптической накачке-зондированию для детектирования спиновых волн, б) схема ориентации осей магнитной анизотропии в исследуемых образцах, в) Экспериментально полученная пространственно-временная карта Керровского вращения, демонстрирующая распространение волновых пакетов ПМСВ в пленке железа толщиной 10 нм, d,e) пространственно-спектральные карты, полученные при применении БПФ к временным зависимостям рис. в) при различных расстояниях при ориентации внешнего магнитного поля вдоль оси трудного (d) и ближе к оси легкого (e) намагничивания.

В представленном докладе собраны результаты наших последних работ по оптическому возбуждению поверхностных магнитоэлектронных волн (ПМСВ) и управления их спектром в тонких ферромагнитных металлических пленках железа и галфенола ( $\text{Fe}_{0.81}\text{Ga}_{0.19}$ ). Для возбуждения и детектирования ПМСВ мы использовали технику двухцветной оптической накачки-зондирования с пространственным сканированием (Рис. 1а). В качестве образцов в экспериментах использовались пленки железа или галфенола с толщинами 4-20 нм на подложках GaAs с ориентацией кристаллографических осей (001). Пленки обладают выраженной магнитной анизотропией (оси анизотропии схематично изображены на рис. 1б). Нами экспериментально продемонстрировано, что эта особенность дает возможность возбуждать распространяющиеся волновые пакеты ПМСВ (рис. 1с) за счет сверхбыстрого термического изменения магнитокристаллической анизотропии [5]. Также в экспериментах наблюдалось сужение спектра возбуждаемого волнового пакета ПМСВ по мере его распространения от области возбуждения [6,7]. При этом, благодаря наличию магнитной анизотропии становится возможным контролировать, подавляется низкочастотная или высокочастотная часть спектра при распространении, изменяя ориентацию внешнего магнитного поля относительно осей анизотропии (рис. 1 d,e). Теоретическое описание эффекта дано в терминах пространственного градиента намагниченности и параметров анизотропии пленки, индуцированных лазерным импульсом [6].

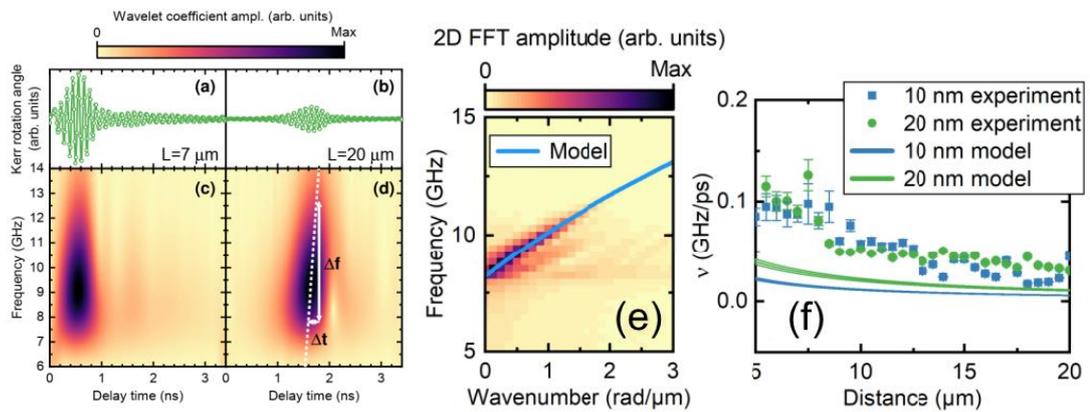


Рис. 2 a,b) Временные зависимости Керровского вращения, иллюстрирующие волновой пакет МСВ на расстояниях 7 и 20 мкм от центра возбуждения в 20 нм пленке железа при ориентации внешнего магнитного поля вдоль трудной оси. (c,d) Соответствующие вейвлет-спектрограммы, демонстрирующие частотную локализацию во временной области. Пунктирная линия на рисунке (d) иллюстрирует изменение максимума во времени. Стрелками схематично указаны диапазон частот  $\Delta f$  и временная задержка  $\Delta t$  внутри пакета спиновых волн, e) цветом показана дисперсия ПМСВ, восстановленная применением двумерного преобразования Фурье к экспериментальным данным для пленки 20 нм железа, аналогичным рис. 1 (c). f) Зависимость параметра чирпа  $\nu$  от пройденного расстояния для импульса ПМСВ в пленках железа толщиной 10 и 20 нм. Символы - экспериментальные данные, линии - аналитические расчеты.

Однако, модификация спектра ПМСВ происходит и далее за пределами лазерно-индуцированного градиента магнитных параметров пленки. Это дает основание полагать, что импульс ПМСВ приобретает частотную модуляцию (чирп) в процессе распространения. Применение вейвлет анализа, действительно, демонстрирует появление временной задержки между спектральными компонентами в импульсе ПМСВ (рис. 2 c,d) Качественно описать изменение параметра частотной модуляции с расстоянием возможно на основе теории, развитой для оптических импульсов в диспергирующей среде при применении восстановленной из эксперимента дисперсии ПМСВ (рис. 2 e,f). Так как дисперсия ПМСВ определяется взаимной ориентацией осей анизотропии и внешнего магнитного поля, то это также позволяет управлять и параметром чирпа [7].

Далее концепция управления спектральными свойствами ПМСВ при возбуждении фемтосекундными лазерными импульсами была расширена для геометрии, когда ПМСВ возбуждаются вблизи доменной стенки Нееля в ферромагнитной полоске (рис. 3a) [8]. Из анализа результатов микромагнитного моделирования показано, что возбуждение ПМСВ происходит за счет изменения эффективного магнитного поля, вызванного лазерным импульсом накачки. При этом, для однодоменного состояния возбуждение прецессии намагниченности не происходит. Это связано с тем, что вращающий момент, действующий на намагниченность в начальный момент времени из-за лазерно-индуцированного изменения параметра анизотропии пропорционален произведению проекций намагниченности  $M_x$  и  $M_y$  в плоскости пленки. Компонента  $M_x$  имеет ненулевое значение только вблизи доменной границы из-за полей рассеяния. Таким образом, амплитуда возбуждаемых волн зависит от положения пятна накачки относительно доменной границы (рис. 3б). Анализ дисперсионных зависимостей МСВ показал, что спектр возбуждаемых волн оказывается зависящим от плотности энергии в импульсе накачки [8]. Это связано с тем, что область возбуждения и доменная стенка эффективно образуют резонатор для ПМСВ, параметры которого определяются величиной изменения анизотропии под действием лазерного импульса. Параметрами такого резонатора также можно управлять относительным положением импульса накачки и ДГ и плотностью энергии в импульсе накачки. Это приводит к смещению резонансных пиков в спектре возбуждаемых ПМСВ.

Для выявления временных масштабов управления ПМСВ были определены характерные времена изменения параметров магнитной анизотропии в исследуемых образцах под действием фемтосекундного лазерного импульса. В результате продемонстрировано, что оптически индуцированный нагрев позволяет контролируемо изменять параметры прецессии намагниченности на временах, меньших времени ее жизни в металлических пленках (рис. 3 в,г). Также установлен степенной закон отношения параметров анизотропии и намагниченности для тонких пленок после воздействия лазерного импульса в процессе релаксации температуры [9].

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 20-32-70149, 19-32-50128), Российского научного фонда (проект № 20-12-00309), фонда БАЗИС (грант 19-1-3-42-1), фонда Синтез.

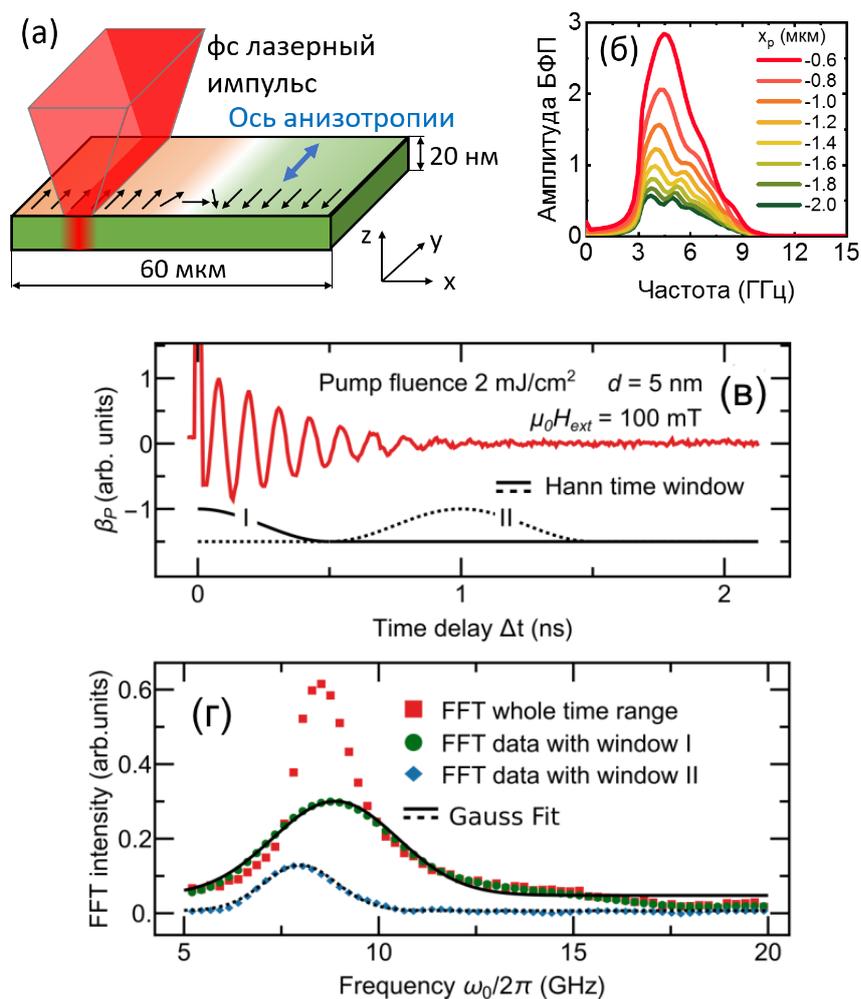


Рис. 3 а) Схема моделируемой системы с  $180^\circ$  доменной стенкой в центре полосы. Малые стрелки схематически показывают ориентацию намагниченности. Большая двойная стрелка указывает ось анизотропии вдоль оси  $y$ . б) Спектр возбуждаемых магнитостатических волн слева от пятна возбуждения при различных пространственных положениях импульса накачки  $x_p$  относительно доменной стенки. в) Зависимость магнитооптического сигнала от времени задержки между импульсами накачки и зондирования. Снизу показаны временные окна Ханна I и II. г) Результат быстрого преобразования Фурье для полного набора данных с рисунка в) (красным) и оконного преобразования Фурье с окнами I и II (зелёным и синим).

## Литература:

1. Kimel A.V., Kalashnikova A.M., Pogrebna A., Zvezdin A.K. Fundamentals and perspectives of ultrafast photoferroic recording // *Physics Reports* 2020. Vol. 852. P. 1-46.
2. Никитов С.А., Сафин А.Р., Калябин Д.В. и др. Диэлектрическая магнетика – от гигагерцев к терагерцам // *Успехи физических наук*. 2020. Т. 190. № 10. С. 1009-1040.
3. Satoh T., et al. Directional control of spin-wave emission by spatially shaped light // *Nat. Photonics* 2012. № 6. P. 662-666.
4. Vogel M, Chumak A., Waller E. et al. Optically-reconfigurable magnetic materials // *Nat. Physics* 2015. №11. P.487–491.
5. N.E. Khokhlov, P.I. Gerevenkov, L.A. Shelukhin, A.V. Azovtsev, N.A. Pertsev, M. Wang, A.W. Rushforth, A.V. Scherbakov, and A.M. Kalashnikova, Optical excitation of propagating magnetostatic waves in an epitaxial galferol film by ultrafast magnetic anisotropy change // *Phys. Rev. Applied* 2019. № 12. P. 044044.
6. Ia. A. Filatov, P. I. Gerevenkov, M. Wang, A. W. Rushforth, A. M. Kalashnikova, and N. E. Khokhlov, Spectrum evolution of magnetostatic waves excited through ultrafast laser-induced heating // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2020. № 1697. P. 012193.
7. Ia. A. Filatov, P. I. Gerevenkov, M. Wang, A. W. Rushforth, A. M. Kalashnikova, N. E. Khokhlov, Spectrum evolution and chirping of laser-induced spin wave packets in thin iron films // *arXiv:2111.00983*. 2021 (submitted to APL).
8. N.E. Khokhlov, A.E. Khranova, Ia.A. Filatov, P.I. Gerevenkov, B.A. Klinskaya, A.M. Kalashnikova, Néel domain wall as a tunable filter for optically excited magnetostatic waves // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2021. № 534. P. 168018.
9. P. I. Gerevenkov, D. V. Kuntu, Ia. A. Filatov, L. A. Shelukhin, M. Wang, D. P. Pattnaik, A. W. Rushforth, A. M. Kalashnikova, and N. E. Khokhlov, Effect of magnetic anisotropy relaxation on laser-induced magnetization precession in thin galferol films // *Physical Review Materials*. 2021. № 5. P. 094407.

**Настраиваемые ферромагнетики для терагерцовой электроники**Л.Н. Алябьева<sup>1</sup>, Е.А. Горбачев<sup>2</sup>, Л.А. Трусов<sup>1,2</sup>, П.Е. Казин<sup>2</sup>, Б.П. Горшунов<sup>1</sup><sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, МО<sup>2</sup>Московский Государственный Университет, Москва

Современные технологии субтерагерцового-терагерцового (субТГц-ТГц) диапазонов, в том числе беспроводные телекоммуникационные системы связи поколений 5G и 6G, а также терагерцовая оптоэлектроника, используют в качестве рабочего диапазон частот от десятков гигагерц до нескольких терагерц (миллиметровые-субмиллиметровые длины волн). Требуемая гибкость различных приложений диктует необходимость тщательного исследования материалов с настраиваемыми функциональными характеристиками. Понимание физических механизмов, ответственных за настраиваемость конкретных параметров материалов, открывает путь для целенаправленного управления их свойствами и, в свою очередь, позволяет выбирать материал с желаемыми характеристиками для конкретного (и/или даже нескольких) приложений при разработке устройств.

Эпсилон-оксид железа,  $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$ , - материал, проявляющий гигантскую магнитотвердость, частоты естественного ферромагнитного резонанса (ЕФМР) которого лежат в субтерагерцовой спектральной области [1]. Соответственно, характеристические свойства эпсилон-оксида железа открывают весьма соблазнительные перспективы для использования этого материала в приборах настраиваемой терагерцовой электроники. Однако в силу определенных технических трудностей данный материал до сих пор не получил широкого применения [2]. Гексаферриты М-типа,  $A^{2+}\text{Fe}_{12}\text{O}_{19}$  ( $A = \text{Ba}, \text{Pb}, \text{Sr}$ ) прочно заняли нишу на рынке магнитных устройств с годовым оборотом порядка миллиардов долларов. И хотя гексаферриты тщательно изучены с точки зрения их радиочастотных магнитных характеристик [3], а также несмотря на их большой потенциал для использования в технологиях субТГц-ТГц диапазонов [4–6], их терагерцовые свойства по-прежнему остаются в некотором роде «белым пятном» на карте научных знаний. Среди ярких примеров перспективности применения гексаферритов в ТГц-технологиях следует упомянуть гексаферрит стронция, допированный ионами кальция и алюминия. Это один из двух безредкоземельных магнитотвердых материалов (второй – упомянутый выше эпсилон-оксид железа  $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ), демонстрирующих гигантские значения коэрцитивной силы (свыше 20 кЭ) [7]. Чистый гексаферрит бария,  $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ , обнаруживает сегнетоэлектрическое упорядочение, которое проявляется в электрической поляризации стенок магнитных доменов, в то время как добавка всего 10% свинца в химическую формулу приводит к исчезновению такой поляризации [8]. Уникальная чувствительность функциональных характеристик гексаферритов (частота ЕФМР, коэрцитивная сила, диэлектрическая постоянная, диэлектрические потери и т. д.) к различным влияющим факторам (таким как химический состав, условия роста, давление или температура) [9-11] определяют привлекательность гексаферритов как для фундаментальных исследований, так и для различных применений. С другой стороны, такая же непостоянность свойств может привести к трудностям в прогнозировании электрических и/или магнитных свойств материалов при воздействии одного или нескольких факторов. Решение данной проблемы возможно лишь при глубоком понимании фундаментальных процессов, определяющих поведение материалов в конкретных условиях. После того, как механизмы, ответственные за изменение свойств, будут ясны и будут предложены соответствующие модели, прогнозирование эволюции характеристик и, следовательно, требуемых параметров материала становится возможным.

Еще одна сложность - поиск эффективных методик роста материалов. Так,  $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$  является метастабильной фазой оксида железа (III) и существует только в наноразмерной форме.

Применяемые методы его синтеза весьма энергозатратны и малоэффективны с точки зрения выхода конечного продукта. Что касается гексаферритов, то затруднением для детального и систематического исследования их свойств и дальнейшего их внедрения в производство является отсутствие технологии выращивания крупных (более  $\approx 5 \times 5 \times 5$  мм<sup>3</sup>) и качественных монокристаллов.

В данном докладе будут обсуждены методы синтеза нанокерамики  $\epsilon$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и монокристаллов гексаферрита. Будут представлены результаты исследования влияния формы материала (нанокерамика, порошки, монокристаллы), размеров зерен, условий роста (окружающая среда, температура и т. д.) и химического состава на магнитные и диэлектрические свойства соединений. Будут представлены результаты анализа природы явлений, наблюдаемых в ТГц-отклике, приведены качественные микроскопические модели происхождения этих явлений. Обнаруженные перестраиваемые свойства исследуемых соединений будут рассмотрены также с прикладной точки зрения.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 21-79-10184), Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-02-00887). Алябьева Л.Н. выражает благодарность системе стипендий президента РФ молодым ученым (СП-777.2021.5). Работа выполнена в тесной коллаборации с Южно-Уральским государственным университетом города Челябинск (группа профессора Д.А. Винника), Лимерикским университетом города Лимерик, Ирландия (В. Лебедев), Университетом Штутгарта (группа профессора М. Дресселя), Университетом Аугсбурга (группа профессора П. Лункенхаймера), Пражским Физическим Институтом (группа профессора С. Камба), Карловым Университетом города Прага (группа профессора Я. Проклешка).

## Литература:

1. E. Gorbachev, M. Soshnikov, M. Wu, et al. (2021) Tuning the particle size, natural ferromagnetic resonance frequency and magnetic properties of  $\epsilon$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles prepared by a rapid sol-gel method, *J. Mater. Chem. C*. doi:10.1039/d1tc01242h.
2. M. Popovici, M. Gich, D. Nižňanský, et al. (2004) Optimized synthesis of the elusive  $\epsilon$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> phase via sol-gel chemistry, *Chem. Mater.* 16:5542–5548. doi:10.1021/cm048628m.
3. R.C. Pullar (2012) Hexagonal ferrites: A review of the synthesis, properties and applications of hexaferrite ceramics, *Prog. Mater. Sci.* 57:1191–1334. doi:10.1016/j.pmatsci.2012.04.001.
4. A. Ahmed, L. Alyabyeva, V. Torgashev, et al. (2019) Effect of aluminium substitution on low energy electrostatics of barium-lead M-type hexagonal ferrites, *J. Phys. Conf. Ser.* 1389:012044. doi:10.1088/1742-6596/1389/1/012044.
5. A.E. Sleptsova, L.N. Alyabyeva, E.A. Gorbachev, et al. (2021) Tuning the morphology and magnetic properties of single-domain SrFe<sub>8</sub>Al<sub>4</sub>O<sub>19</sub> particles prepared by citrate auto-combustion route, *Mend. Commun.* 31:221–223, doi:10.1016/j.mencom.2021.03.025.
6. R. Bowrothu, H.-I.I. Kim, C.S. Smith, D.P. Arnold, et al. (2020) 35-GHz Barium Hexaferrite/PDMS Composite-Based Millimeter-Wave Circulators for 5G Applications, *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.* 68:5065–5071. doi:10.1109/TMTT.2020.3022556.
7. E.A. Gorbachev, L.A. Trusov, A.E. Sleptsova, et al. (2020) Hexaferrite materials displaying ultra-high coercivity and sub-terahertz ferromagnetic resonance frequencies, *Mater. Today*. 32:13–18. doi:10.1016/J.MATOD.2019.05.020.
8. L.N. Alyabyeva, A.S. Prokhorov, D.A. Vinnik, et al. (2021) Lead-substituted barium hexaferrite for tunable terahertz optoelectronics, *NPG Asia Mater.* 13:63 doi: 10.1038/s41427-021-00331-x.
9. M. Karmakar, B. Mondal, M. Pal, K. Mukherjee, (2014) Acetone and ethanol sensing of barium hexaferrite particles: A case study considering the possibilities of non-conventional hexaferrite sensor, *Sens. Actuator B Chem.* 190:627–633. doi:10.1016/j.snb.2013.09.035.

10. K. Kumar, D. Pandey (2017) Quantum phase transitions in  $\text{Ba}(1-x)\text{Ca}x\text{Fe}_{12}\text{O}_{19}$  ( $0 \leq x \leq 0.10$ ), Phys. Rev. B. 96:024102. doi:10.1103/PhysRevB.96.024102.
11. M.A. Almessiere, Y. Slimani, H. Güngüneş, et al. (2019) Structure, Mössbauer and AC susceptibility of strontium nano-hexaferrites: Effect of vanadium ions doping, Ceram. Int. 45:11615–11624. doi:10.1016/j.ceramint.2019.03.033.

Результаты исследований опубликованы в следующих статьях:

1. E.A.Gorbachev, L.A.Trusov, A.E.Sleptsova, E.S.Kozlyakova, L.N.Alyabyeva, S.R.Yegiyanyan, A.S.Prokhorov, V.A.Lebedev, I.V.Roslyakov, A.V.Vasiliev, P.E.Kazin « Hexaferrite Materials Displaying Ultra-High Coercivity and Sub-Terahertz Ferromagnetic Resonance Frequencies» // Materials Today, 2020, V. 32, pp. 13-18 <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2019.05.020>
2. A.E. Sleptsova, L.N. Alyabyeva, E.A. Gorbachev, E.S. Kozlyakova, M.A. Karpov, C. Xinming, A.V. Vasiliev, B.P. Gorshunov, A.S. Prokhorov, P.E. Kazin, L.A. Trusov, Tuning the morphology and magnetic properties of single-domain  $\text{SrFe}_8\text{Al}_4\text{O}_{19}$  particles prepared by citrate auto-combustion route, // Mendeleev Communications, 2021, V.31, I. 2, P. 221-223, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mencom.2021.03.025>
3. Gorbachev E., Soshnikov M., Wu M., Alyabyeva L., Myakishev D., Kozlyakova E., Lebedev V., Anokhin E., Gorshunov B., Brylev O., Kazin P., Trusov L. “Tuning the morphology, natural ferromagnetic resonance frequency and magnetic properties of  $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$  nanoparticles prepared by rapid sol-gel method” // Journal of Materials Chemistry C, 2021 V. 9, pp. 6173-6179 <https://doi.org/10.1039/D1TC01242H>
4. Alyabyeva L.N., Prokhorov A.S., Vinnik D.A., Anzin V.B., Ahmed A.G., Mikheykin A., Bednyakov P., Kadlec C., Kadlec F., de Prado E., Prokleška J., Proschek P., Kamba S., Pronin A.V., Dressel M., Abalmasov V.A., Dremov V.V., Schmid S., Savinov M., Lunkenheimer P., Gorshunov B.P. «Lead-substituted barium hexaferrite for tunable terahertz optoelectronics» // NPG Asia Materials, 13, 63, 2021 <https://doi.org/10.1038/s41427-021-00331-x>
5. E. A. Gorbachev, L.A. Trusov, L.N. Alyabyeva, M.A. Karpov, I.V. Roslyakov, V.A. Lebedev, E.S. Kozlyakova, O.V. Magdysyuk, A.V. Sobolev, I.S. Glazkova, S.A. Beloshapkin, B.P. Gorshunov, A.S. Prokhorov, P.E. Kazin “Ultra-high Coercivity Hexaferrite Ceramics Featuring Terahertz Ferromagnetic Resonance” // Materials Horizons, 2021 [IN REVIEW]
6. Gorbachev E., Trusov L., Mingxi W., Vasiliev A., Svetogorov R., Alyabyeva L., Lebedev V., Sleptsova A., Karpov M., Mozharov Ya., Gorshunov B., Kazin P. “Submicron particles of Ga-substituted strontium hexaferrite obtained by citrate auto-combustion method” // Journal of Materials Chemistry C, 2021, 9, 13832-13840 <https://doi.org/10.1039/D1TC03381F>

## Антиферромагнитный резонанс в индуцированной полем упорядоченной фазе квантового анизотропного антиферромагнетика $\text{NiCl}_2\text{-4SC}(\text{NH}_2)_2$

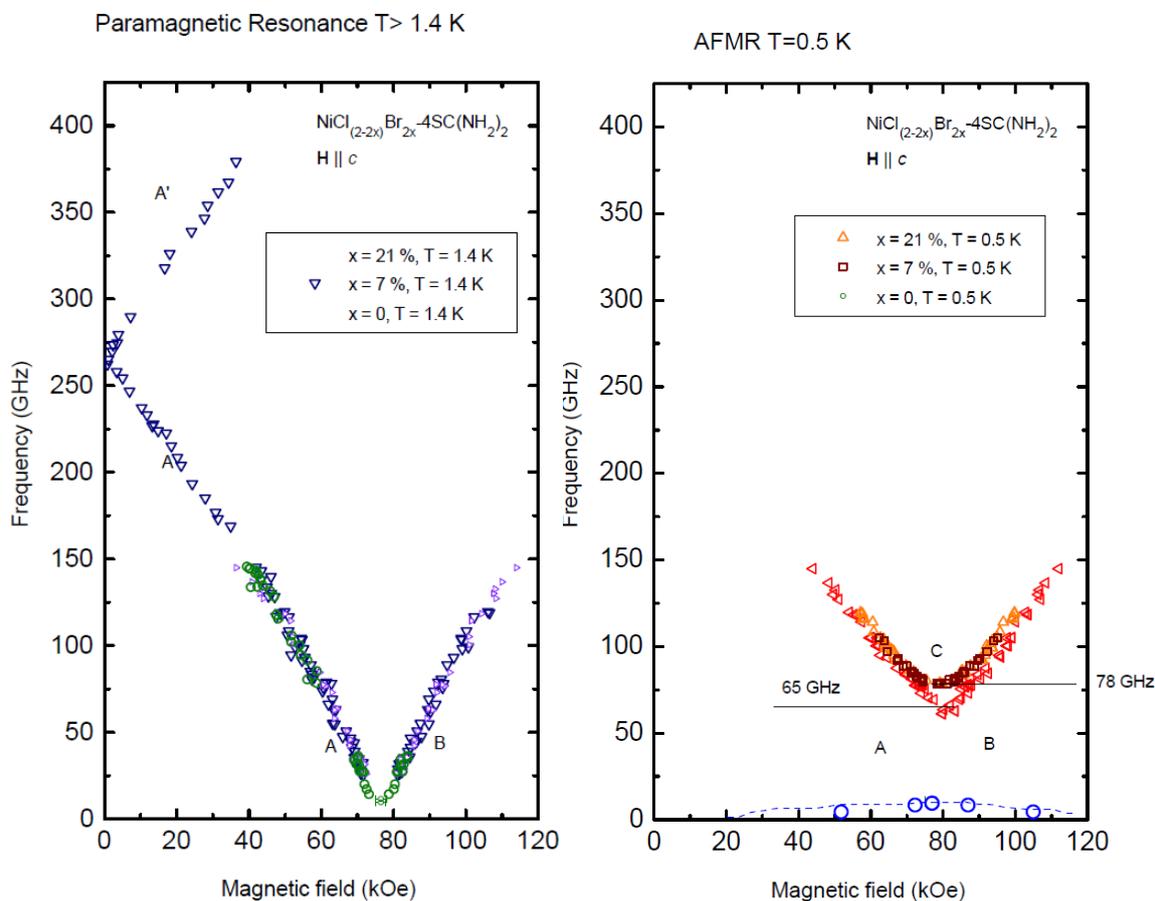
А.И. Смирнов<sup>1</sup>, Т.А. Солдатов<sup>1</sup>, В.Н. Глазков<sup>1</sup>, К.Ю. Поваров<sup>2</sup>, А. Падуан-Фильхо<sup>3</sup>, А.И. Желудев<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, Москва, Россия*

<sup>2</sup> *ETH Zurich, Switzerland*

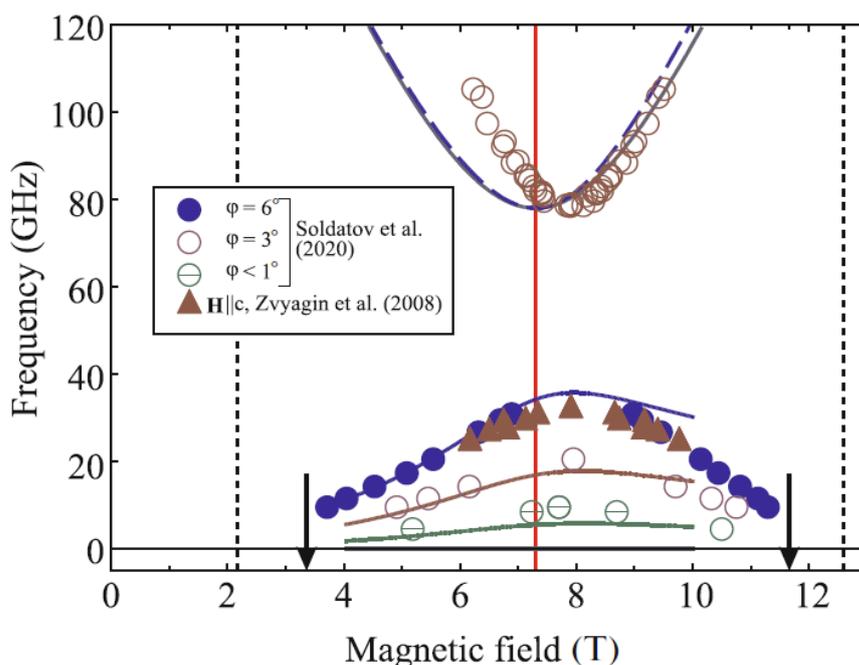
<sup>3</sup> *University of São Paulo, Brazil*

Изучен магнитный резонанс квантового цепочечного магнетика со спином магнитного иона  $S = 1$  и сильной одноионной анизотропией,  $\text{NiCl}_2\text{-4SC}(\text{NH}_2)_2$  (сокращенное наименование DTN) и получено его теоретическое описание. В этом соединении энергия антиферромагнитного обмена магнитных ионов в цепочках меньше энергии одноионной анизотропии легкоплоскостного типа и данный кристалл представляет собой редкий пример спиновой системы с спин-жидкостным основным состоянием, в которой стабилизация квантово-разупорядоченного основного состояния обусловлена не обменным взаимодействием в одномерном магнетике, а анизотропией. Это отличает DTN от классических магнетиков, в которых анизотропия, наоборот, способствует упорядочению. Спектр магнитного резонанса в спин-жидкостной фазе DTN аналогичен спектру спина  $S=1$  в кристаллическом поле [1]. Однако, в специфической антиферромагнитной фазе, индуцированной полем в квантово-критической области, которая существует при температуре ниже 1 K в интервале полей от 20 до 120 кЭ, спектр состоит из двух ветвей необычного антиферромагнитного резонанса. Одна из ветвей имеет минимальную частоту 80 ГГц в середине интервала существования упорядоченной фазы, а вторая является голдстоуновской модой с нулевой частотой. Голдстоуновская мода, тем не менее, приобретает конечную частоту при слабом отклонении направления магнитного поля от оси симметрии четвертого порядка.



На рисунках 1 и 2 представлена зависимость частоты магнитного резонанса от магнитного поля в парамагнитной фазе (слева) и в упорядоченной фазе при температуре 0.5 К (справа).

Предложена простая теоретическая модель для описания необычного антиферромагнитного резонанса в интервале полей от 20 до 120 кЭ, в которой параметр порядка сильно зависит от магнитного поля, обращаясь в ноль на краях этого диапазона и достигая максимума в поле около 80 кЭ. В рамках упрощенной теории описание спектра может быть получено проектированием состояния системы на два близких одноионных уровня с  $S_z=0$  и  $S_z=1$ , которые в области критического магнитного поля оказываются близки из-за закрывания спиновой щели магнитным полем. Эта приближительная трактовка системы как двухуровневой (псевдоспин одна вторая) системы позволяет получить описание спектра путем использования известных результатов для цепочки спинов одна вторая с сильной XY анизотропией, для которой эффективное поле оказывается суммой внешнего магнитного поля, обменного поля и поля анизотропии. Результаты сравнения этой приближительной наглядной теории (сплошные линии) и эксперимента показаны на рис. 3. Теория хорошо улавливает эффект минимума частоты в точке максимума параметра порядка. Получено также количественное описание угловой зависимости квази-голдстоуновской моды при повороте направления поля относительно главной оси анизотропии на угол  $\phi$ . Теория опубликована в работе [2].



1. T.A.Soldatov, A.I.Smirnov, K.Yu. Povarov, A. Paduan-Filho, A. Zheludev. Phys. Rev. B 101, 104410 (2020).
2. V. N. Glazkov. JETP Letters, 2020, Vol. 112, No. 10, pp. 647–650. [Russian Text Pis'ma v Zhurnal Eksperimental'noi i Teoreticheskoi Fiziki, 2020, Vol. 112, No. 10, pp. 688–692.]

## Анализ микроволновых резонансных свойств композитных сред с нано- и микро-размерными ферромагнитными частицами различной формы

Д.В. Перов, А.Б. Ринкевич

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

С использованием экспериментальной методики, основанной на теории распространения электромагнитных волн в пространственно-ограниченных средах, получены частотные и полевые зависимости коэффициентов отражения и прохождения волн для образцов композитных сред с ферромагнитными частицами различной формы. Показано, что в такого рода средах наблюдается сильная зависимость глубины проникновения электромагнитных волн от поля намагничивания, обусловленная ферромагнитным резонансом. В сочетании со сравнительно малой диэлектрической проницаемостью композитных сред, это приводит к существенным (до 50%) изменениям коэффициентов отражения и прохождения, что дает основание рассматривать эти материалы в качестве перспективных для практического применения в микроволновых устройствах, управляемых магнитным полем. Предложена теоретическая модель для определения эффективной комплексной магнитной проницаемости композитных сред с ферромагнитными частицами в виде эллипсоидов вращения общего вида, дающее адекватное описание их резонансных особенностей.

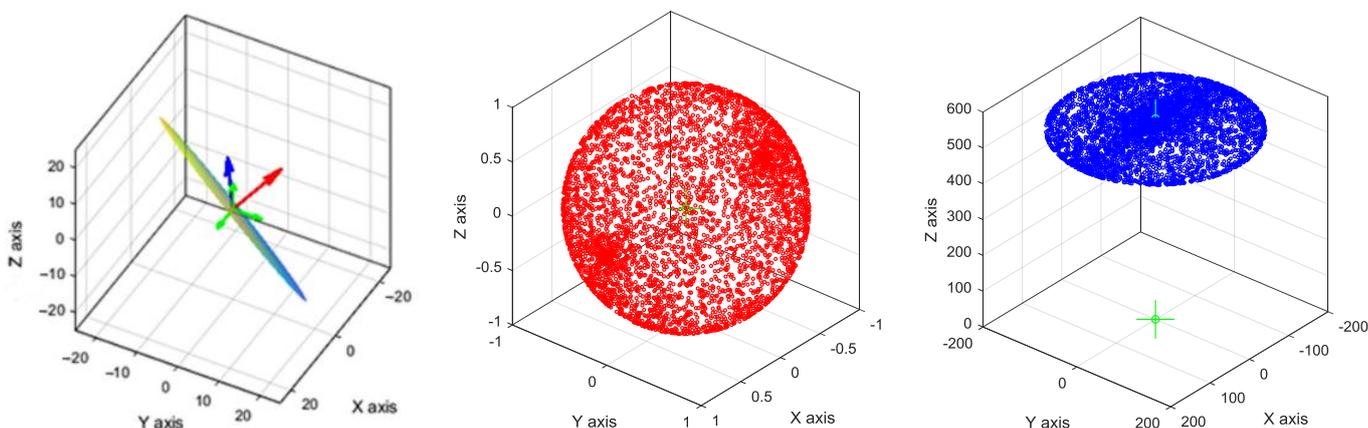


Рисунок - 1 Положение векторов нормали (красный) и постоянной намагниченности (синий) относительно ортов декартовой системы координат (зеленый) для одиночной ферромагнитной частицы в виде эллипсоида вращения с соотношением размеров полуосей 25:25:1 и распределения направлений соответствующих векторов для ансамбля из 5000 таких частиц с различной пространственной ориентацией.

### Публикации:

1. [Ferromagnetic Resonance and Antiresonance in Composite Medium with Flakes of Finemet-Like Alloy](#) / D. V. Perov, A. B. Rinkevich // *Nanomaterials*.—2021.—V.11.—1748.
2. [Transmission, Reflection and Dissipation of Microwaves in Magnetic Composites with Nanocrystalline Finemet-Type Flakes](#) / A. B. Rinkevich, D. V. Perov, Yu. I. Ryabkov // *Materials*.—2021.—V.14.—3499.
3. [Microwave refraction coefficient of composite with flakes of Fe-Si-Nb-Cu-B alloy](#) / A. B. Rinkevich, Yu. I. Ryabkov, D. V. Perov, O. V. Nemytova // *JMMM*.—2021.—V.529.—167901.
4. [Определение эффективной магнитной проницаемости нанокompозитных сред](#) / А. Б. Ринкевич, Д. В. Перов, // *Докл. Рос. акад. наук. Физ., техн. науки*.— 2021.—Т.499.—С.22—24.
5. [Прохождение микроволн через композитный материал с частицами из сплава Fe-Si-Nb-Cu-B](#) / А. Б. Ринкевич, Ю. И. Рябков, Д. В. Перов, Я. А. Пахомов, Е. А. Кузнецов // *ФММ*.—2021.—Т.122.—С.377—383.

*Актуальность* исследования: результаты выполненных ранее экспериментальных исследований микроволновых электрических и магнитных параметров композитных сред с нано- и микрогазмерными ферромагнитными частицами показали, что такие материалы могут обладать необычными свойствами, наличие которых делает их перспективными для создания элементов высокочастотных радиотехнических устройств

*Цель* нашего исследования: экспериментально и теоретически исследовать параметры электромагнитных волн в процессе их взаимодействия с композитными средами, которые состоят из металлических ферромагнитных частиц, помещенных в диэлектрическую немагнитную матрицу, в зависимости от частоты электромагнитных колебаний и величины поля намагничивания, а также создать и проанализировать модель, дающую теоретическое описание магнитных параметров такого рода сред с учетом их резонансных свойств в микроволновом диапазоне для частиц различной формы.

*Задачи* исследования:

- 1) Выполнить экспериментальные исследования процессов взаимодействия электромагнитных волн с композитными средами;
- 2) Разработать теоретическую модель для определения эффективной комплексной магнитной проницаемости композитных сред;
- 3) Проанализировать особенности волновых процессов в композитных средах.

*Объект* исследования: образцы из композитных материалов, различающиеся объемной долей ферромагнитной фазы, которые содержат помещенные в эпоксидную матрицу частицы размером не более 50 мкм из ферромагнитного сплава типа Finemet (Fe-Si-Nb-Cu-B).

*Методы* исследования: эксперименты с использованием измерительных волноводов, работающих в микроволновом диапазоне, расчеты (теоретическая электродинамика сплошных сред, теория эффективной среды), статистическое моделирование.

*Авторский вклад* сотрудников ИФМ: идея исследования, постановка задачи, выполнение и обработка результатов экспериментальных исследований, создание теоретической модели, проведение расчётов, анализ результатов исследований, подготовка текстов статей.

## **1. Выполнены экспериментальные исследования процессов взаимодействия электромагнитных волн с композитными средами.**

Получены полевые зависимости коэффициентов отражения и прохождения для ряда частот в диапазонах 12-17 и 26-38 ГГц. Образцы для измерений были выполнены из композитных материалов, содержащих частицы в виде пластин толщиной порядка 2 мкм и остальными размерами не превышающими 50 мкм из ферромагнитного сплава типа Finemet (Fe-Si-Nb-Cu-B), которые помещены в эпоксидную матрицу. Объемные доли ферромагнитной фазы в различных образцах составляли 15 и 30%. Частицы в композитных материалах ориентированы в пространстве произвольным образом.

Полевые зависимости коэффициентов прохождения имеют минимумы, обусловленные увеличением поглощения энергии электромагнитных волн в условиях ферромагнитного резонанса. Аналогичным образом ведут себя и коэффициенты отражения в диапазоне частот 12-17 ГГц. Однако при увеличении частоты до 26-38 ГГц на полевых зависимостях коэффициентов отражения появляются дополнительные максимумы, причем соответствующие им значения поля намагничивания меньше соответствующих полей ферромагнитного резонанса. Данные признаки соответствуют условию ферромагнитного антирезонанса.

Относительные изменения на полевых зависимостях коэффициентов отражения весьма велики, они достигают значений от -50 до +50% по отношению к величине коэффициента в отсутствие магнитного поля.

## **2. Разработана теоретическая модель для определения эффективной комплексной магнитной проницаемости композитных сред.**

Разработана теоретическая модель, в рамках которой получены аналитические выражения для определения элементов обобщенного тензора магнитной восприимчивости полдеровского типа для композитной среды с ферромагнитными частицами в виде эллипсоидов вращения общего вида. При теоретических построениях использовалась модель смещения на основе приближения степенными законами (формула Зильберштейна).

Результаты численного моделирования с использованием полученных формул показали, что форма и ширина линии ферромагнитного резонанса, а также значения магнитных полей, соответствующих ферромагнитному резонансу и антирезонансу, существенным образом зависят от формы магнитных частиц в композите и их ориентации относительно поля намагничивания.

С использованием методов численного статистического анализа были построены полевые зависимости эффективных комплексных магнитных проницаемостей композитных сред для различной формы ферромагнитных частиц при их произвольной ориентации относительно поля намагничивания.

## **3. Выполнен анализ особенностей волновых процессов в композитных средах.**

Показано хорошее соответствие, в том числе – с точки зрения локализации их резонансных особенностей, между экспериментальными полевыми и частотными зависимостями коэффициентов прохождения и отражения и соответствующими теоретическими кривыми, полученными с использованием эффективных магнитных проницаемостей композитных сред.

Выполнен анализ глубины проникновения электромагнитных волн в композитные среды с ферромагнитными частицами. Показано, что она может изменяться в 4-5 раз при изменении величины поля намагничивания, что дает основание рассматривать эти материалы в качестве перспективных для практического применения в микроволновых устройствах, управляемых магнитным полем.

### **Выводы:**

Для образцов из композитных материалов, содержащих ферромагнитные частицы из ферромагнитного сплава типа Finemet (Fe-Si-Nb-Cu-B), которые помещены в эпоксидную матрицу, относительные изменения на полевых зависимостях коэффициентов прохождения и отражения составляют несколько десятков процентов по отношению к величине коэффициента в отсутствие магнитного поля.

Предложена теоретическая модель для определения эффективной комплексной магнитной проницаемости композитных сред с нано- и микроразмерными ферромагнитными частицами в виде эллипсоидов вращения общего вида, дающее адекватное описание их резонансных особенностей.

Показано, что глубина проникновения электромагнитных волн в композитные среды изменяется в несколько раз при изменении поля намагничивания.

## Магнитный порядок и спиновая динамика $5f$ электронов в монокристалле урана

В.В. Оглобличев, С.В. Верховский, А.В. Мирмельштейн<sup>1</sup>, Ю.В. Пискунов, А.Ф. Губкин, А.Ю. Гермов, А.В. Андреев<sup>2</sup>, А.М. Потапов<sup>3</sup>

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

<sup>1</sup> Российский федеральный ядерный центр - Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. академика Е.И. Забабахина, г. Снежинск

<sup>2</sup> Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения РАН

<sup>3</sup> FZU Institute of Physics, Czech Academy of Sciences, Prague, Czech Republic

В работе методами ЯМР исследован магнитный порядок и спиновая динамика  $5f$  электронов урана в монокристалле урана (UN). Показано, что спектры ЯМР на ядре  $^{14}\text{N}$  в магнитоупорядоченной фазе объясняются в рамках модели антиферромагнитного упорядочения типа  $I$ , соответствующего  $1k$ -структуре при наличии доменной структуры. Установлено, что в магнитном поле 9.28 Тл наблюдается разный объем магнитных доменов, в которых магнитные моменты урана лежат вдоль и перпендикулярно направлению магнитного поля. Обнаружено, что при низких температурах скорость спин-решеточной релаксации описывается законом Корринги. Это свидетельствует о формировании ферми-жидкостного состояния. Показано, что в парамагнитной области зависимость энергии спиновых флуктуаций  $\Gamma_{\text{ЯМР}}(T)$  близка к зависимости  $\Gamma(T) \propto T^{0.5}$ , характерной для концентрированных систем Кондо. Полученные в работе данные, крайне важны для объяснения магнитных и транспортных свойства соединений на основе  $f$ -электронных элементов.

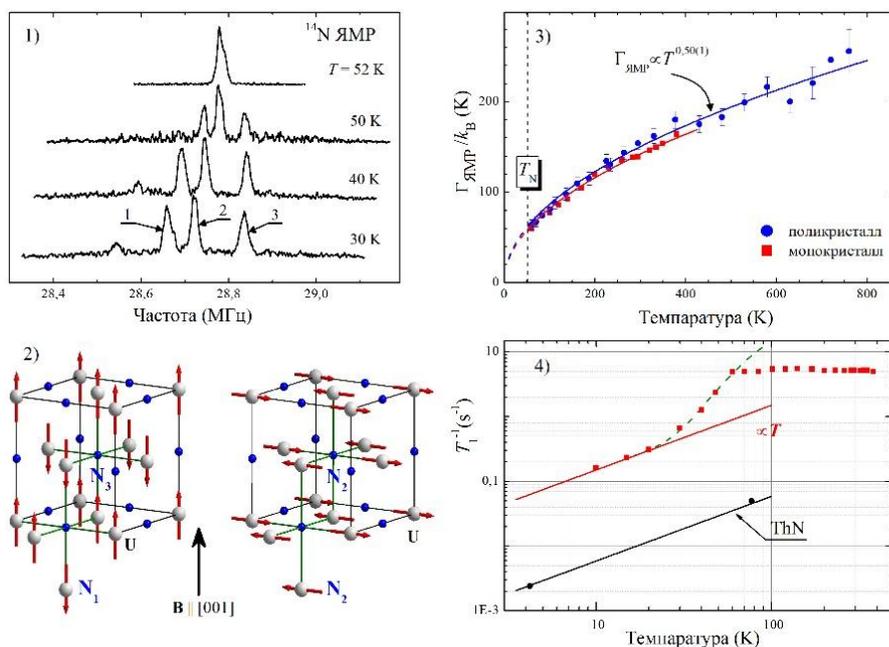


Рисунок – 1 Спектры ЯМР на ядре  $^{14}\text{N}$ . 2. Магнитная структура и варианты магнитных доменов. 3. Зависимость энергии спиновых флуктуаций  $5f$ -электронов урана. 4. Формирование ферми-жидкостного состояния при низких температурах и сравнение результатов с монокристаллом тория.

1. [5f-electron magnetism in single crystal UN probed by  \$^{14}\text{N}\$  NMR](#) [Текст] / V.V. Ogloblichev<sup>1</sup>, S.V. Verkhovskii<sup>1</sup>, A.V. Mirmelstein<sup>0</sup>, Y.V. Piskunov<sup>1</sup>, A.Y. Germov<sup>1</sup>, A.M. Potapov<sup>0</sup>, A.F. Gubkin<sup>2</sup>, A.V. Andreev<sup>0</sup> // Physical Review B. — 2021. — V. 104. — P. 155148—155159
2.  [\$^{14}\text{N}\$  Nuclear Magnetic Resonance and Relaxation in the Paramagnetic Region of Uranium Mononitride](#) [Текст] / V. V. Ogloblichev<sup>1</sup>, A. M. Potapov<sup>0</sup>, S. V. Verkhovskii<sup>1</sup>, A. V. Mirmelstein<sup>0</sup> // JETP Letters. — 2018. — V. 108. — P. 616—622.

**Актуальность** исследования: Магнитные материалы на базе актинидов представляют особый интерес для фундаментальной науки в связи с широким многообразием экзотических свойств и явлений, наблюдаемых в данных объектах. С практической точки зрения нитрид урана рассматривается как потенциальное топливо для ядерных реакторов (смешанное нитридное уран-плутониевое (СНУП) топливо), поэтому построение моделей описания электронного строения данного соединения является актуальной задачей.

**Цель** нашего экспериментального исследования: исследовать особенности магнитного упорядочения и спиновой динамики  $5f$  электронов урана в монокристалле урана.

**Задачи** исследования: 1. Измерить методами ЯМР на ядрах  $^{14}\text{N}$  спектры и спин-решеточную релаксацию в парамагнитной и магнитоупорядоченной фазах в монокристалле и поликристалле UN в широком диапазоне температур  $T = 10\text{--}760\text{ K}$ . 2. Построить модель магнитоупорядоченного состояния UN. Подтвердить/опровергнуть наличие доменной магнитной структуры.

**Объект** исследования: монокристалл и поликристалл монокристалла урана.

**Методы** исследования: ядерный магнитный резонанс (ЯМР),

**Авторский вклад** сотрудников ИФМ: идея исследования, постановка задачи, постановка и проведение экспериментов, систематизация и анализ результатов, написание текста статьи.

А.В. Андреев, А.М. Потапов – подготовка образцов

А.В. Мирмельштейн – обсуждение результатов, написание текста статьи.

## 1. Сдвиг линии ЯМР на $^{14}\text{N}$ и магнитная восприимчивость в парамагнитной фазе UN.

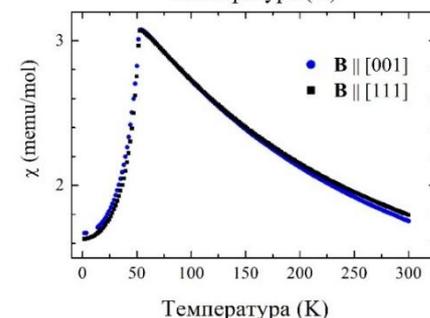
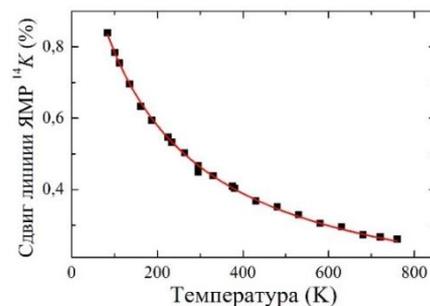
Нитрид урана является антиферромагнетиком с температурой Нееля  $T_N \approx 53\text{ K}$  и  $f$ -электронами, близкими к границе де-локализации. Он имеет простую, модельную, кубическую кристаллическую решетку типа NaCl.

Сдвиг  $K(T)$  линии ЯМР на ядре  $^{14}\text{N}$ , также как и полная магнитная восприимчивость  $\chi(T)$ , следует закону Кюри-Вейсса вплоть до температуры 760 K.

Установлено, что основным вкладом в сдвиг линии ЯМР азота и полную магнитную восприимчивость в парамагнитной фазе UN является спиновый магнетизм  $5f$ -электронов урана.

Показано, что в парамагнитной области все узлы азота эквивалентны в кристаллическом и магнитном отношении, и их зарядовое окружение имеет кубическую симметрию.

Определены константы эффективного сверхтонкого поля, создаваемого на ядре азота электронами  $5f$  оболочек соседних атомов урана:  $H_{d[001]} = 16.2(8)\text{ кЭ}/\mu\text{B}$  и  $H_{f[111]} = 18.1(8)\text{ кЭ}/\mu\text{B}$

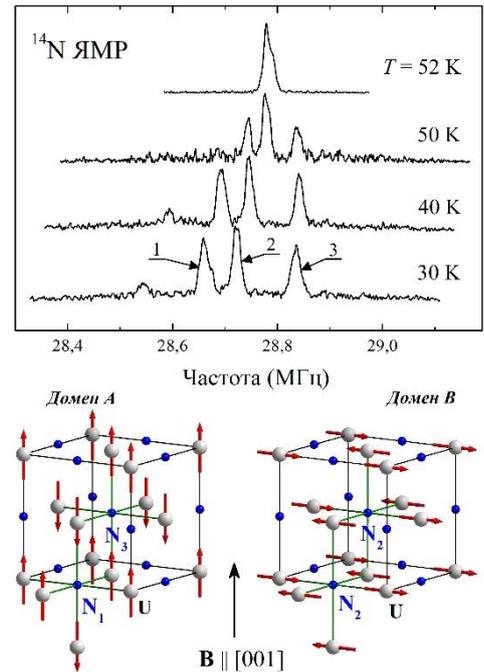


## 2. Магнитная структура в магнитоупорядоченной фазе UN ( $T_N \approx 52$ К).

Спектр ЯМР на ядре  $^{14}\text{N}$  состоит из трех хорошо разрешенных линий 1, 2, 3 при  $\mathbf{B} \parallel [001]$ . Каждая из линий соответствует магнитно-неэквивалентным ионам азота в структуре (позиции  $\mathbf{N}_1$ ,  $\mathbf{N}_2$ ,  $\mathbf{N}_3$ ). Положение и количество линий в спектре ЯМР зависят от ориентации монокристалла относительно внешнего магнитного поля  $\mathbf{B}$ .

Полученные результаты объяснены в модели антиферромагнитного упорядочения типа  $I$ , соответствующего  $1k$ -структуре и при наличии магнитных доменов (Домен А и Домен В).

Из анализа интенсивности линий ЯМР установлено, что в магнитном поле 9.28 Тл доменов, в которых магнитные моменты ионов урана ориентированы вдоль магнитного поля (домен А), в 1.6 раза больше, чем доменов, в которых магнитные моменты ионов урана ориентированы перпендикулярно магнитному полю (Домен В).



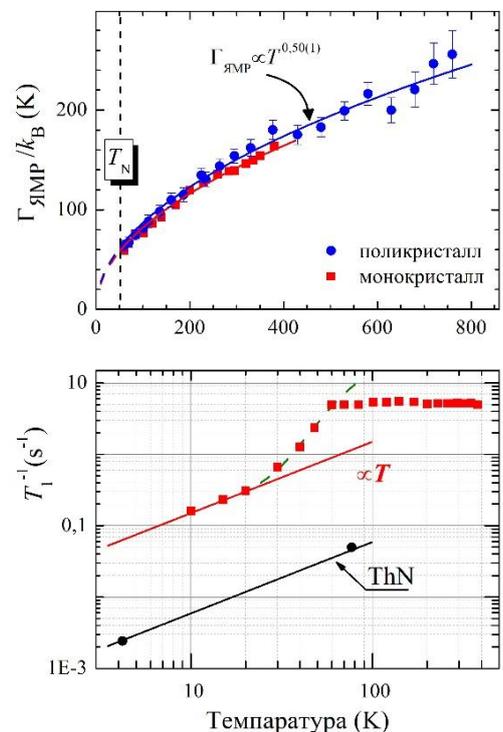
## 3. Скорость ядерной спин-решеточной релаксации и спиновая динамика $f$ -электронов урана в UN.

Энергия спиновых флуктуаций  $5f$  электронов урана  $\Gamma_{\text{ЯМР}}$  монотонно растет с увеличением температуры по степенному закону, почти точно совпадающему с зависимостью  $\Gamma(T) \propto T^{0.5}$ , наблюдаемой в концентрированных системах Кондо выше температуры формирования когерентного состояния

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

Сделано предположение, что основным состоянием иона урана в UN является квантовая суперпозиция нескольких электронных конфигураций  $5f$  оболочек урана

**Выводы** соответствуют формуле существенного результата.



Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (Проект № 18-72-10022).

## Упорядочение в магнитном поле и спиновая динамика в $\text{Cu}_2\text{GaVO}_5$ и $\text{Cu}_2\text{AlVO}_5$ людвигитах

Р.М. Еремина<sup>1</sup>, Т.П. Гаврилова<sup>1</sup>, Е.М. Мошкина<sup>2</sup>, С.Н. Софронова<sup>2</sup>, Д.С. Иносов<sup>3</sup>, В.В. Гуржий<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия

<sup>2</sup> Институт физики им. Л.В.Киренского, Федеральный исследовательский центр КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия

<sup>3</sup> Институт физики твердого тела и материалов, Дрезден, Германия

<sup>4</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Одним из ярких примеров низкоразмерных магнитных соединений являются оксидораты со структурой людвигита, которые имеют общую формулу  $\text{M1}_2^{2+}\text{M2}^{3+}\text{VO}_5$ , где M1 и M2 – это ионы группы железа. В качестве объектов исследования нами выбраны монокристаллы  $\text{Cu}_2\text{GaVO}_5$  и  $\text{Cu}_2\text{AlVO}_5$  людвигитов  $\text{Cu}_2^{2+}\text{Me}^{3+}\text{VO}_5$ , где Me – трехвалентный металл (немагнитный Al или Ga). Монокристаллы  $\text{Cu}_2\text{GaVO}_5$  и  $\text{Cu}_2\text{AlVO}_5$  выращивались раствор-расплавным методом [1]. По данным рентгеноструктурного анализа (РСА) установлено, что все образцы  $\text{Cu}_2\text{AlVO}_5$  и  $\text{Cu}_2\text{GaVO}_5$  имеют моноклинно искаженную структуру людвигита (пространственная группа P21/c). Элементарная ячейка  $\text{Cu}_2\text{GaVO}_5$  и  $\text{Cu}_2\text{AlVO}_5$  содержит четыре неэквивалентных кристаллографических позиций ионов металла. Отличительной особенностью исследуемых структур является избирательное распределение катионов Cu и Ga/Al. Две позиции в структуре  $\text{Cu}_2\text{GaVO}_5$  преимущественно заняты атомами Ga с меньшим количеством Cu (Ga:Cu = 0,71:0,29 и 0,66:0,34 соответственно); в то время как другие позиции полностью заняты атомами Cu. Для  $\text{Cu}_2\text{GaVO}_5$  все позиции частично заняты атомами Al и Cu. Позиции M1 и M2 преимущественно заняты атомами Cu со значительно меньшим количеством Al (Cu:Al = 0,88:0,12 и 0,86:0,14 соответственно); в то время как позиции M3 и M4 преимущественно заняты атомами Al с меньшим количеством Cu (Cu:Al = 0,34:0,66 и 0,33:0,67, соответственно) [2]. Совместный анализ низкотемпературных данных магнитной восприимчивости и магнитного вклада в удельную теплоемкость показал, что в  $\text{Cu}_2\text{AlVO}_5$  и  $\text{Cu}_2\text{GaVO}_5$  наблюдается антиферромагнитный переход в упорядоченное состояние при  $T_N=2,4$  и  $4,1$  К соответственно. Показано, что внешнее магнитное поле выше 2,5Тл и 2,8Тл для  $\text{Cu}_2\text{GaVO}_5$  и  $\text{Cu}_2\text{AlVO}_5$ , соответственно, приводит к уширению магнитного фазового перехода, указывающего на подавление дальнего антиферромагнитного порядка, но при этом магнитный порядок ближнего окружения сохраняется. Полуэмпирическая модель для расчета косвенных обменных взаимодействий использовалась для расчета величин изотропных обменных взаимодействий между спинами ионов меди в решетке [3]. Рассчитано, что между спинами ионов меди в цепочке реализуется антиферромагнитный обмен с величиной 7,9К. Проведены измерения спектров ЭПР в парамагнитной области. Учитывая значения симметричного анизотропного обменного взаимодействия, связанного с квантовой интерференцией  $J_{zz}$  и рассчитанную величину изотропного симметричного обменного взаимодействия в монокристаллических  $\text{Cu}_2\text{AlVO}_5$  и  $\text{Cu}_2\text{GaVO}_5$  мы оценили ширину линии ЭПР, которая совпадает с экспериментальными данными.

Из дифракции нейтронов нашли, что вектор магнитного распространения в  $\text{Cu}_2\text{GaVO}_5$  соизмерим и лежит на границе зоны Бриллюэна в плоскости (H0L),  $q_m=(0,45, 0, -0,7)$ , что соответствует сложной неколлинеарной дальнедействующей упорядоченной структуре [4]. В рассматриваемой нами структуре существует фрустрация обменных взаимодействий, которые приводят к разложению на подсистемы.

Работа выполнена при поддержке РФФИ № 17-02-00953.

## Литература

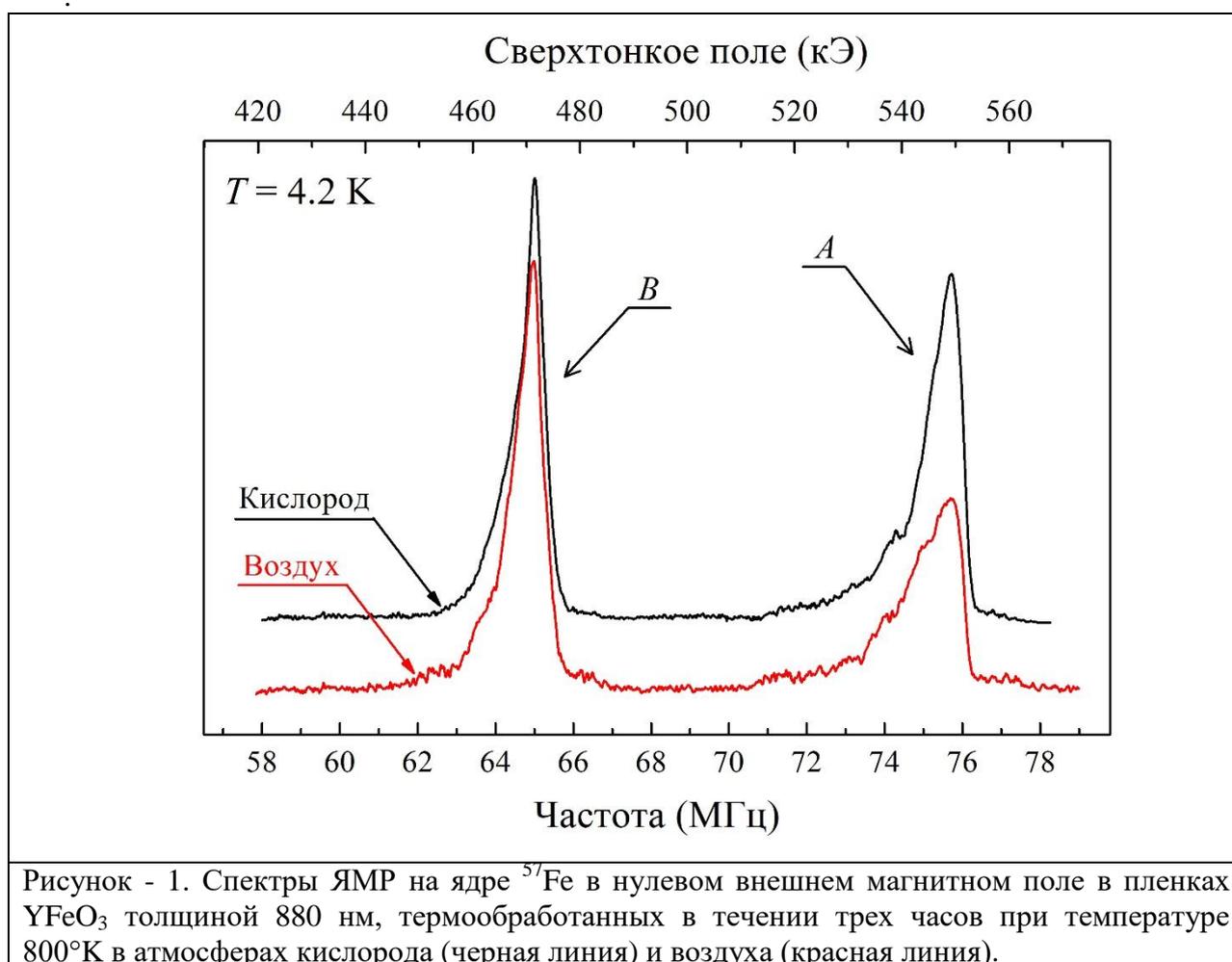
1. Flux crystal growth of  $\text{Cu}_2\text{GaBO}_5$  and  $\text{Cu}_2\text{AlBO}_5$  / E.M. Moshkina, T.P. Gavrilova, I.F. Gilmutdinov, A.G. Kiiamov, R.M. Eremina // Journal of Crystal Growth.-2020.-V.545.-p.125723
2. Structure, magnetic and thermodynamic properties of heterometallic ludwigites:  $\text{Cu}_2\text{GaBO}_5$  and  $\text{Cu}_2\text{AlBO}_5$ / R.M. Eremina, T.P. Gavrilova, E.M. Moshkina, I.F. Gilmutdinov, R.G. Batulin, V.V. Gurzhiy, V. Grinenko, D.S. Inosov // Journal of Magnetism and Magnetic Materials.-2020.-V.515.- 167262
3. Sofronova, S., Eremina, R., Yatsyk, I., Moshkina, E. / Exchange interactions in  $\text{Cu}_2\text{AlBO}_5$  and  $\text{Cu}_2\text{GaBO}_5$  //AIP Conference Proceedings. – AIP Publishing LLC, 2020. – Т. 2218. – №. 1. – С. 040001
4. A. A. Kulbakov, R. Sarkar, O. Janson, S. Dengre, T. Weinhold, E. M. Moshkina, P. Y. Portnichenko, H. Luetkens, F. Yokaichiya, A. S. Sukhanov, R. M. Eremina, Ph. Schlender, A. Schneidewind, H.-H. Klauss, and D. S. Inosov / Destruction of long-range magnetic order in an external magnetic field and the associated spin dynamics in  $\text{Cu}_2\text{GaBO}_5$  and  $\text{Cu}_2\text{AlBO}_5$  ludwigites //Physical Review B. – 2021. – Т. 103. – №. 2. – С. 024447.

**Неоднородное магнитное состояние пленок  $\text{YFeO}_3$  по данным ЯМР спектроскопии**

А.П. Носов, В.В. Оглобличев, В.И. Изюров, Ю.В. Пискунов, А.Г. Смольников, А.Ф. Садыков, С. А. Чупраков, С.С. Дубинин, С.В. Наумов

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

Методами спектроскопии ядерного магнитного резонанса исследованы особенности неоднородного магнитного состояния тонких пленок антиферромагнетика  $\text{YFeO}_3$  при термообработке в атмосфере кислорода и воздуха. Обнаружено существенно неоднородное распределение локальных магнитных полей внутри пленок на масштабах межатомного расстояния, отвечающих положению ядер внутри доменов и в доменных стенках. Установлено, что в исследованных пленках  $\text{YFeO}_3$  присутствуют две магнитно неэквивалентные позиции ионов железа, соответствующие его разным валентным состояниям. Соотношение неэквивалентных позиций железа и степень искажения кристаллической решетки меняются в зависимости от атмосферы термообработки.

**Публикация:**

1. [Inhomogeneous Magnetic State of  \$\text{YFeO}\_3\$  Thin Films According to NMR Spectroscopy Data](#) / V.V.Ogloblichev, V.I.Izyurov, Yu.P.Piskunov, A.G.Smol'nikov, A.F.Sadykov, S.A.Chuprakov, A.P.Nosov // JETP Letters.—2021.—V.114.—No.1-P.29 (6 pp).

*Актуальность* исследования: в настоящее время будущее спинтроники и магноники все больше связывают с антиферромагнитными материалами, в которых наблюдается широкий спектр уникальных физических явлений. Особое место среди антиферромагнетиков принадлежит редкоземельным ортоферритам с орторомбической структурой. В этих материалах сочетание эффектов симметрии и спин-орбитального взаимодействия приводит к появлению сложных типов магнитных взаимодействия, включая антиферромагнитный обмен и антисимметричное обменное взаимодействие Дзялошинского-Мории. К настоящему времени наиболее полно исследованы монокристаллы ортоферрита иттрия  $\text{YFeO}_3$ , в которых обнаружены такие эффекты как сверхзвуковые (до  $\sim 20$  км/с) скорости движения доменных границ и сверхбыстрый (временной диапазон до десятков фемтосекунд) магнетизм. Всестороннее исследование свойств микро-, нано-объектов из ортоферритов (порошков и пленок), физических процессов, характерных для них крайне важно, поскольку они могут отличаться от таковых в объемных образцах, Работы по исследованию тонких пленок  $\text{YFeO}_3$  практически отсутствуют.

*Цель* исследования: методами спектроскопии ядерного магнитного резонанса выявить изменения локального окружения катионов железа в кристаллической решетке тонких пленок ортоферрита иттрия  $\text{YFeO}_3$ , обусловленных их термообработкой в атмосферах кислорода и воздуха, а также установить особенности детектирования сигналов ЯМР на ядре  $^{57}\text{Fe}$  в  $\text{YFeO}_3$ .

*Задачи* исследования: синтезировать обогащенные изотопом  $^{57}\text{Fe}$  тонкие пленки  $\text{YFeO}_3$ , получить и проанализировать сигналы ЯМР на ядре  $^{57}\text{Fe}$  в тонких пленках и объемных монокристаллах  $\text{YFeO}_3$ ; выполнить сравнительный анализ формы и ширины линий ЯМР спектров для тонких пленок и массивных образцов; изучить взаимосвязь формы линии и локальной магнитной структуры; в рамках модельных представлений проанализировать полученные результаты.

*Объекты* исследования: пленки ортоферрита иттрия  $\text{YFeO}_3$  толщиной 880 нм, обогащенные и не обогащенные изотопом  $^{57}\text{Fe}$ , подвергнутые термообработке в атмосферах кислорода и воздуха. Тонкие пленки получены в ИФМ методом магнетронного распыления стехиометрической мишени, обогащенной изотопом  $^{57}\text{Fe}$ . В качестве подложек использованы монокристаллические пластины  $r\text{-Al}_2\text{O}_3$ . Сравнительные измерения были выполнены на объемном образце монокристалла  $\text{YFeO}_3$  с естественным содержанием изотопа  $^{57}\text{Fe}$ .

*Методы* исследования: Основным методом исследования был ядерный магнитный резонанс (ЯМР). Исследование проводилось при температурах  $T = 4.2$  К и  $T = 77$  К в нулевом внешнем магнитном поле.

*Авторский вклад* сотрудников ИФМ: идея исследования, постановка задачи, получение образцов, проведение ЯМР измерений, анализ результатов, написание текста статьи.

**Получены и проинтерпретированы сигналы ЯМР в тонких пленках  $\text{YFeO}_3$  обогащенных и небогатенных изотопом  $^{57}\text{Fe}$ , а также в объемном монокристалле.**

На рисунке 1 представлены спектры ЯМР  $^{57}\text{Fe}$  в пленках  $\text{YFeO}_3$  в нулевом внешнем магнитном поле при  $T = 4.2$  К. В спектрах можно выделить две области частот, в которых наблюдается сигнал:  $\nu_1 = 71 - 77$  МГц (далее – линия А) и  $\nu_2 = 62 - 66$  МГц (далее – линия Б). Сигнал ЯМР  $^{57}\text{Fe}$ , дающий вклад в линию А, хорошо изучен в работах на массивных монокристаллах  $\text{YFeO}_3$ . По своим параметрам этот сигнала является типичным для (слабо) ферромагнитных фаз и сигналов от доменных стенок и может рассматриваться как свидетельство наличия таковых в образце.

Обратимся теперь к линии В. Для исключения гипотезы о том, что этот сигнал является сигналом ЯМР от иттрия  $^{89}\text{Y}$ , были выполнены ЯМР измерения на двух пленках  $\text{YFeO}_3$ , обогащенной изотопом  $^{57}\text{Fe}$  и не обогащенной. Относительная интенсивность линий А и Б в обеих пленках была примерно одинаковой. Этого никак не могло бы быть в случае, если бы линия Б была сигналом ЯМР от  $^{89}\text{Y}$ . Из этого эксперимента следует вывод, что Линия Б на рис. 1 соответствует ядрам железа, находящимся в другом валентном состоянии в отличие от ядер железа дающих вклад в сигнал линии А.

Сравнительный анализ результатов ЯМР экспериментов, выполненные на пленках, отожженных в атмосферах кислорода и воздуха позволил сделать вывод о том, что причиной уменьшения сверхтонких полей является наличие вакансий по кислородной подрешетке. Сравнение двух  $^{57}\text{Fe}$  ЯМР-спектров, полученных для пленок, отожженных в атмосферах кислорода и воздуха показывает, что линии А и Б для пленки, отожженной в атмосфере воздуха шире соответствующих линий для пленки, отожженной в атмосфере кислорода. Кроме того, отношения интегральных интенсивностей линий А и В для пленок, отожженных в разных атмосферах, существенно отличаются:  $(Int_A/Int_B)_{\text{oxygen}} \approx 1.1$ ,  $(Int_A/Int_B)_{\text{air}} = 0.8$ . Исходя из того, что ширина линий ЯМР отражает степень дефектности кристаллической решетки, а отношение  $(Int_A/Int_B)$  характеризует соотношение в образце ионов  $\text{Fe}^{3+}$  и  $\text{Fe}^{2+}$ , можно утверждать: при отжиге в атмосфере кислорода часть позиций железа  $\text{Fe}^{2+}$  восстанавливается до состояния  $\text{Fe}^{3+}$  ( $4s^03d^5$ ), что и должно наблюдаться при уменьшении кислородных вакансий во время отжига в атмосфере кислорода.

Для наблюдения сигнала ЯМР от ядер, расположенных внутри доменов, были выполнены ЯМР-измерения на монокристаллическом образце  $\text{YFeO}_3$  с природным содержанием изотопа  $^{57}\text{Fe}$  (2.1%). Результаты представлены на рисунке 2. Спектры представляют собой одиночные узкие ( $\Delta\nu \approx 40$  КГц) симметричные линии (далее – линии С). Аналогичные результаты были получены другими исследователями ранее. Важным обстоятельством является то, что монокристалле сигналы от доменных границ в частотных диапазонах А и Б не были обнаружены, а в пленках  $\text{YFeO}_3$  линии С не наблюдались.

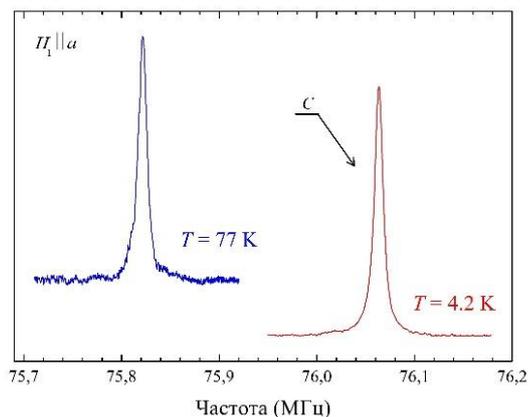


Рисунок - 2. Спектры ЯМР на ядре  $^{57}\text{Fe}$  в нулевом внешнем магнитном поле в монокристалле  $\text{YFeO}_3$ . Сигнал ЯМР от ядер  $^{57}\text{Fe}$ , находящихся внутри антиферромагнитных доменов.

## Выводы:

Впервые получены ЯМР спектры для тонких пленок  $\text{YFeO}_3$ . Анализ параметров релаксации ядерных моментов, формы и ширины линий ЯМР спектра  $^{57}\text{Fe}$ , свидетельствуют о существенной неоднородности распределения локальных магнитных полей в пленках  $\text{YFeO}_3$  на масштабах межатомных расстояний. Вся совокупность ЯМР-данных указывает на то, что пленка  $\text{YFeO}_3$  состоит практически из одних доменных стенок. Обнаружено, что в исследованных пленках примерно половина ионов железа находится в состоянии  $\text{Fe}^{3+}$ , другая половина в состоянии  $\text{Fe}^{2+}$ , что может быть связано с дефектностью по кислородной подрешетке.

**Терагерцовая спектроскопия магнитоэлектрика  $\text{HoAl}_3(\text{VO}_3)_4$** 

А. М. Кузьменко<sup>1</sup>, В. Ю. Иванов<sup>1</sup>, А. Ю. Тихановский<sup>1</sup>, А. Г. Пименов<sup>2</sup>, А. М. Шуваев<sup>2</sup>,  
И. А. Гудим<sup>3</sup>, А. А. Мухин<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия*

<sup>2</sup> *Institute of Solid State Physics, Vienna University of Technology, Vienna, Austria*

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

Проведено экспериментальное и теоретическое исследование субмиллиметровых (терагерцовых) спектроскопических и магнитных свойств редкоземельного алюмобората  $\text{HoAl}_3(\text{VO}_3)_4$  при температурах 3–300 К. В диапазоне частот 2–35  $\text{см}^{-1}$  в спектрах пропускания в различных поляризациях обнаружен ряд линий поглощения, идентифицированных как переходы между нижними уровнями основного мультиплета иона  $\text{Ho}^{3+}$  расщепленного в кристаллическом поле. Они включают как переходы с основного на возбужденные состояния, так и переходы между возбужденными состояниями. Установленные условия возбуждения мод и моделирование спектров позволили разделить магнито- и электродипольные переходы и определить энергии соответствующих состояний, их симметрию и матричные элементы переходов. Обнаружены низкочастотные линии, которые не вписываются в установленную картину электронных состояний  $\text{Ho}^{3+}$ , эти линии, по-видимому, соответствуют ионам с искаженной дефектами локальной симметрией кристаллического поля.

В алюмоборате гольмия  $\text{HoAl}_3(\text{VO}_3)_4$ , обнаружено рекордное для кристаллов значение индуцированной магнитным полем электрической поляризации  $\sim 3600$   $\text{мкКл/м}^2$  в поле 70 кЭ при температуре 3 К [1], характер температурных зависимостей магнитной восприимчивости и индуцированной поляризации [1] свидетельствует о преобладании вклада низкочастотных состояний в магнитные и магнитоэлектрические свойства. Для непосредственного наблюдения электронных переходов между низкоэнергетическими состояниями иона  $\text{Ho}^{3+}$  в  $\text{HoAl}_3(\text{VO}_3)_4$  было проведено исследование методом квазиоптической субмиллиметровой (терагерцовой) спектроскопии с лампами обратной волны в качестве источника излучения в диапазоне частот 2–35  $\text{см}^{-1}$  [2]. Примеры спектров приведены на рис. 1. На фоне характерных осцилляций, обусловленных интерференцией в плоскопараллельном образце, при понижении температуры в образце наблюдалась сложная картина резонансных линий поглощения. Для получения детальной информации о переходах полученные спектры моделировались (линии на рис. 1) с использованием формул Френеля для плоскопараллельного слоя с учетом вкладов соответствующих электронных переходов дисперсию диэлектрической и магнитной проницаемости.

Для анализа полученного спектра использованы результаты работы [3], где была определена структура уровней основного мультиплета иона  $\text{Ho}^{3+}$  в разбавленной системе  $\text{Ho}_{0.01}\text{Y}_{0.99}\text{Al}_3(\text{VO}_3)_4$ . На основе этих данных сделаны исходные предположения о положениях и симметрии уровней редкоземельного иона в  $\text{HoAl}_3(\text{VO}_3)_4$  (рис. 2). В исследованный нами диапазон частот попадают уровни двух нижних дублетов E и двух синглетов A<sub>1</sub> и A<sub>2</sub>, а энергия следующего возбужденного уровня составляет 126  $\text{см}^{-1}$ .

Учитывая правила отбора наблюдаемых переходов, большую часть линий в образце *a*-среза можно однозначно идентифицировать как магнито- либо электродипольные в каждой из поляризаций. Однако переходы 1,2 $\Rightarrow$ 3,4 могут возбуждаться как электрической, так и магнитной компонентами излучения. Соответствующие частоты переходов, полученные из моделирования наблюдаемых резонансных линий в спектрах пропускания, позволили определить значения энергий рассмотренных состояний:  $E_{1,2} = 0$   $\text{см}^{-1}$ ,  $E_{3,4} = 12.3$   $\text{см}^{-1}$ ,  $E_5 = 14.5$   $\text{см}^{-1}$ ,  $E_6 \approx 34$   $\text{см}^{-1}$ , что хорошо согласуется с результатами работы [3].

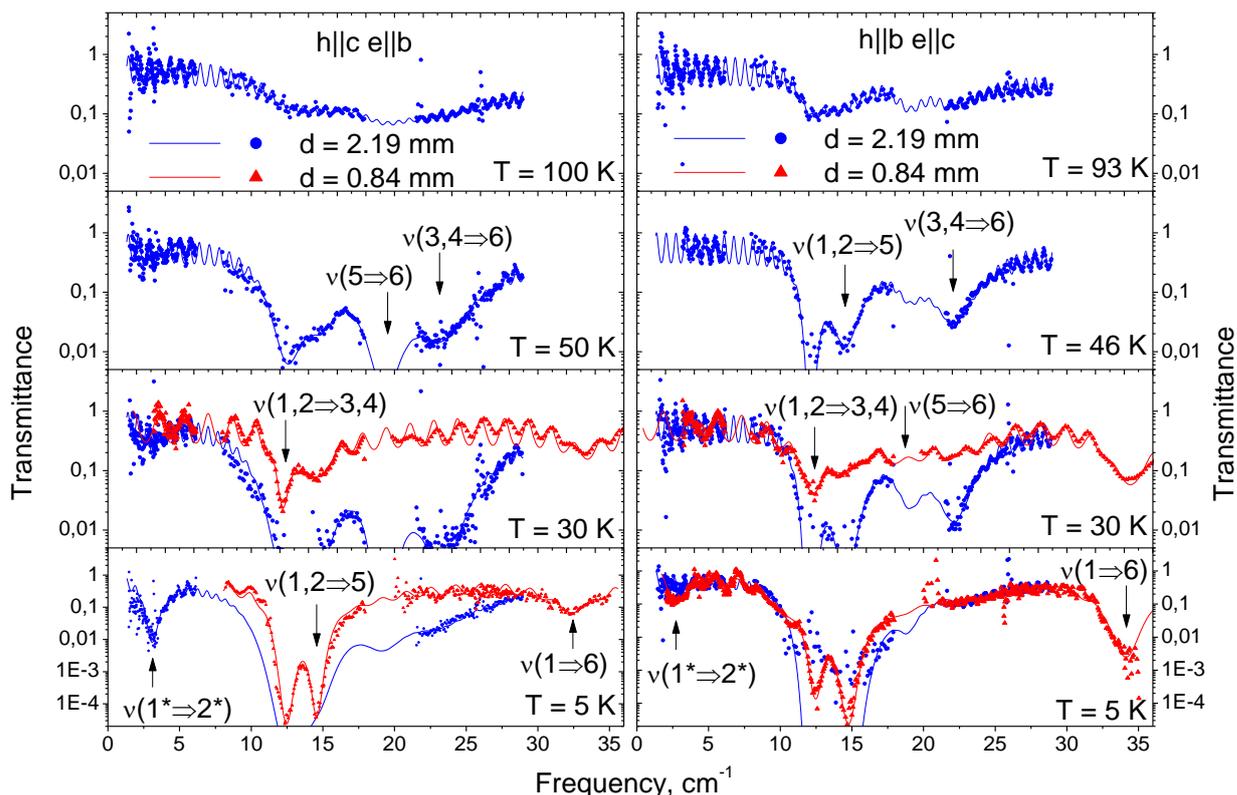


Рис. 1. Терагерцовые спектры пропускания  $a$ -среза  $\text{HoAl}_3(\text{BO}_3)_4$  для поляризаций излучения  $h||c e||b$  (левый столбец) и  $h||b e||c$  (правый столбец). Значки – экспериментальные данные для разных толщин образца: кружки –  $d = 2.19$  мм, треугольники –  $d = 0.84$  мм. Линии – теория.

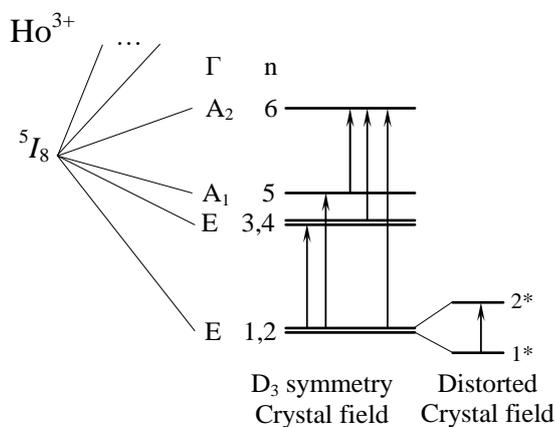


Рис. 2. Схема нижних электронных состояний основного мультиплета иона  $\text{Ho}^{3+}$  в кристалле  $\text{HoAl}_3(\text{BO}_3)_4$ . Стрелки обозначают наблюдаемые в спектрах переходы. Справа – схема дополнительного расщепления основного состояния за счет возможных искажений локальной симметрии кристаллического поля.

Параметры резонансных линий (частоты и вклады), наблюдаемых в  $\text{HoAl}_3(\text{BO}_3)_4$ , приведены на рис. 3. Проведено моделирование температурных зависимостей вкладов наблюдаемых переходов в магнитную и диэлектрическую проницаемость для магнито- и электроактивных мод соответственно (линии на рис. 3). Определены ненулевые матричные элементы магнитодипольных переходов:  $\mu_{1,2 \rightarrow 5}^b = 3.2 \mu_B$ ,  $\mu_{1,2 \rightarrow 6}^b = 1.5 \mu_B$ ,  $\mu_{3,4 \rightarrow 6}^b = 3.0 \mu_B$ ,  $\mu_{5 \rightarrow 6}^c = 6.1 \mu_B$ . Ввиду неопределенности в условиях возбуждения моды  $1,2 \rightarrow 3,4$ , ее интенсивность описана магнитодипольным вкладом в магнитную проницаемость, то есть для величин недиагональных матричных элементов переходов между дублетами  $1,2 \rightarrow 3,4$  определена фактически верхняя граница их значений  $\mu_{1,2 \rightarrow 3,4}^b \leq 3.6 \mu_B$ ,  $\mu_{1,2 \rightarrow 3,4}^c \leq 4.9 \mu_B$ .

Из описаний температурных зависимостей вкладов электроактивных мод (рис. 3с,ф) получены следующие значения матричных элементов (электрические дипольные моменты в дебаях):  $d_{15}^b = d_{25}^b = 0.1$  D;  $d_{16}^b = d_{26}^b = 0.06$  D;  $d_{36}^b = d_{46}^b = 0.11$  D;  $d_{56}^c = 0.12$  D.

В спектрах пропускания помимо идентифицированных линий поглощения наблюдалась низкочастотная мода  $1^* \Rightarrow 2^*$ . Ее вклад в разных поляризациях растет вплоть до низких температур, что указывает на то, что она соответствует переходам с основного состояния. Таким образом, она не может быть интерпретирована как переход между возбужденными уровнями  $3,4 \Rightarrow 5$ . Для определенности при описании интенсивности этой линии она рассматривалась как магнитодипольная и описывалась при помощи выражения (3) вкладом в магнитную проницаемость (рис. 3б). Для этого описания получены значения матричных элементов  $\mu_{1^*2^*}^b = 2.1 \mu_B$ ,  $\mu_{1^*2^*}^c = 4.2 \mu_B$ . Возможной причиной появления этой моды могли бы быть переходы между компонентами основного дублета расщепленного за счет локальных искажений их симметрии  $D_3$  для ряда позиций редкоземельных ионов (см. правую часть рис. 2). Для вышележащих мод заметных признаков такого расщепления не обнаружено, что может свидетельствовать о небольшом количестве искаженных позиций.

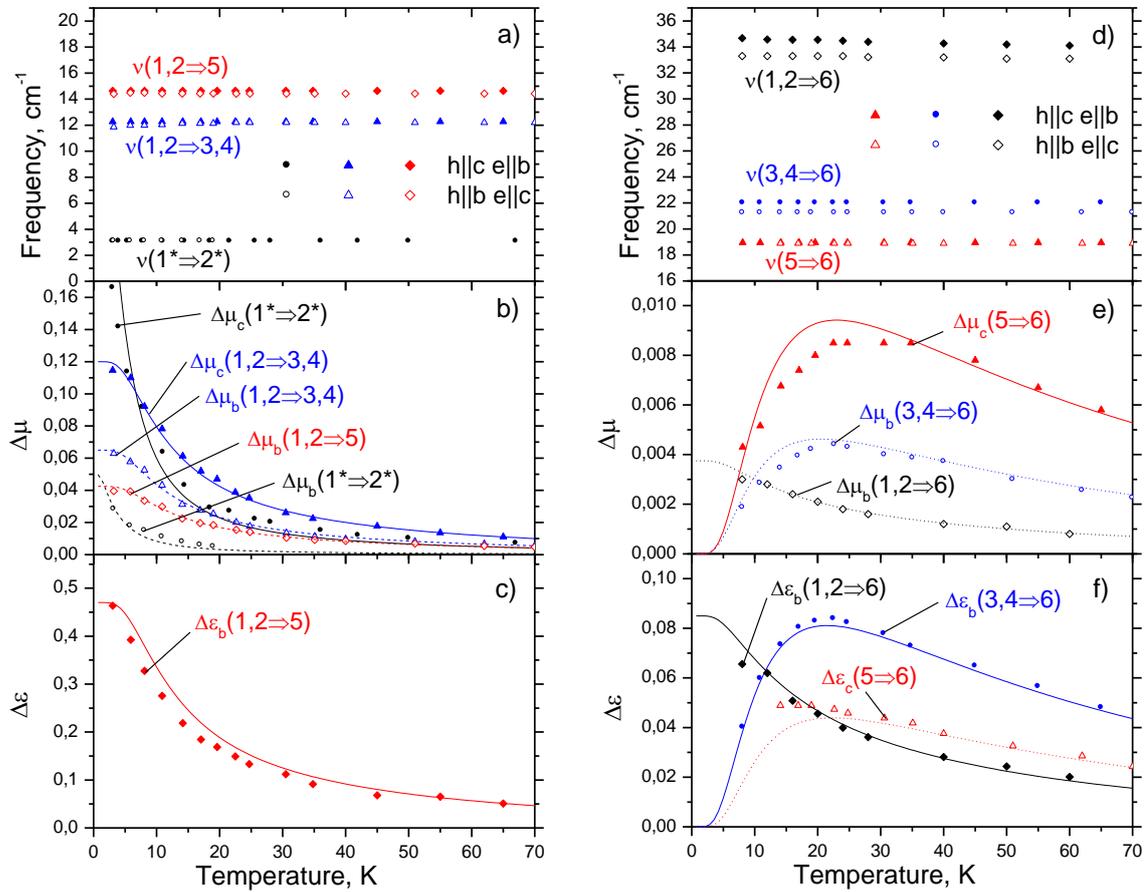


Рис. 3. Температурные зависимости параметров резонансных мод: частот (а, d), вкладов в магнитную (b, e) и диэлектрическую (с, f) проницаемости. Символы – эксперимент, линии – теория.

### Литература:

- [1] К.-С. Liang, R.P. Chaudhury, B. Lorenz et al. Phys. Rev. B, **83**, 180417(R) (2011).
- [2] Кузьменко А.М., Иванов В.Ю. и др. Оптика и спектроскопия, том **130**, вып. 1, с. 59 (2022) (<https://journals.ioffe.ru/articles/51890>).
- [3] A. Baraldi, R. Capelletti, M. Mazzeri et al. Phys. Rev. B, **76**, 165130 (2007).

**Применение магнитного псевдорезонанса для изучения анизотропии магнитосопротивления в тонких ферромагнитных плёнках**

В. А. Ацаркин, В. В. Демидов, Г. А. Овсянников, Т. А. Шайхулов

*ИРЭ им. В. А. Котельникова РАН*

На протяжении последнего десятилетия в нашем Институте развивалась методика исследования тонких ферромагнитных плёнок с помощью так называемого псевдорезонанса. Дело в том, что в ферромагнитных плёнках с одноосной магнитной анизотропией наблюдается эффект резкого усиления радиочастотной (РЧ) динамической магнитной восприимчивости [1-3]. Он наблюдается, когда внешнее магнитное поле  $\mathbf{H}$  направлено перпендикулярно оси лёгкого намагничивания  $\mathbf{n}_u$  (и, следовательно, параллельно трудной оси) и проходит через значение  $H = H_u$ , где  $H_u$  – величина поля одноосной магнитной анизотропии пленки. При этом регистрирующее радиочастотное магнитное поле с частотой  $\omega$   $\mathbf{h}(t) = \mathbf{h}_1 \cdot e^{i\omega t}$  направлено перпендикулярно полю  $\mathbf{H}$ . Эффект проявляется в виде сравнительно узкого резонансноподобного сигнала поглощения с максимумом при значении поля  $H = H_u$ . Особенностью этого сигнала является то, что при изменении частоты  $\omega$  в широких пределах величина резонансного поля остается неизменной и равной  $H_u$ . Вот почему было предложено назвать этот эффект ”магнитным псевдорезонансом” [3].

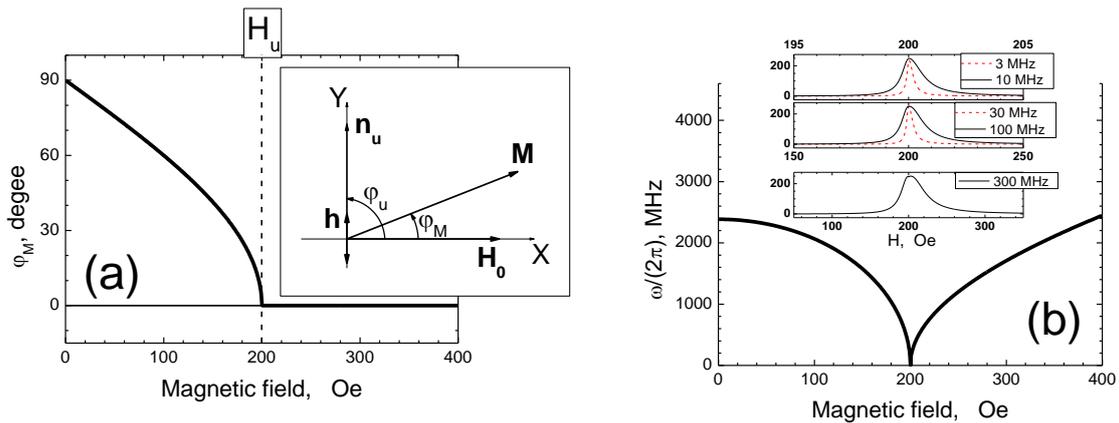


Рис. 1. (а) – изменение угла между вектором намагниченности и направлением внешнего магнитного поля от величины этого поля; на вставке показано взаимное расположение векторов  $\mathbf{H}_0$ ,  $\mathbf{M}$ ,  $\mathbf{h}$  и  $\mathbf{n}_u$ . (б) – зависимость резонансной частоты ФМР от величины внешнего магнитного поля; вверху показаны расчётные линии псевдорезонанса в диапазоне частот 3-300 МГц. Все рисунки показаны для направления внешнего магнитного поля вдоль оси трудного намагничивания при  $H_u = 200$  Э.

Рисунок 1(а) демонстрирует, что при достижении внешнего магнитного поля, направленного вдоль трудной оси, величины  $H_u$  происходит резкое изменение направления намагниченности, что, в свою очередь, приводит к резкому увеличению магнитной восприимчивости. На рисунке 1(б) показаны расчётные спектры поглощения в диапазоне частот 3-300 МГц. Видно, что для всех частот резонанс возникает при одинаковом значении внешнего магнитного поля.

По аналогии с экспериментами по изучению анизотропного магнитосопротивления (АМР) в условиях ферромагнитного резонанса [4] нами были получены и исследованы сигналы АМР в условиях псевдорезонанса.

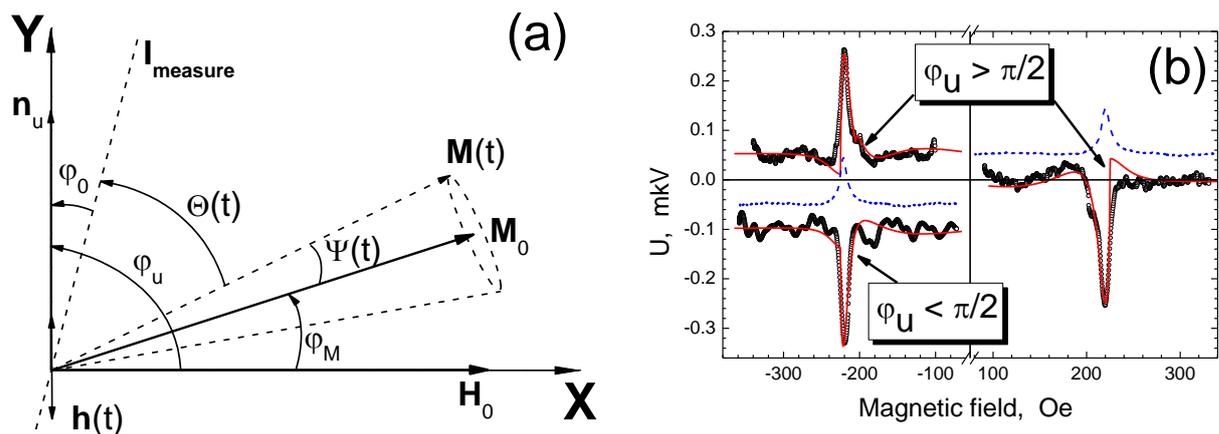


Рис. 2. (а) – взаимное расположение векторов, участвующих в процессе измерения АМР; (б) – сигналы регистрируемых напряжений, возникающих за счёт АМР в условиях ФМР; точки – эксперимент, сплошные линии (красные в онлайн) – расчёты по формуле (9); штриховые линии (синие в онлайн) – сигналы РЧ поглощения, уменьшенные на 4 порядка.

На рисунке 2 показаны геометрия эксперимента, регистрируемые сигналы АМР и расчётные сигналы АМР в условиях псевдорезонанса [5]. Здесь следует обратить внимание на изменение знака сигнала, которое происходит при добавлении постоянного магнитного поля величиной  $1 \text{ Э}$ , направленного перпендикулярно  $\mathbf{H}_0$ .

### Литература.

1. Б. А. Беляев, А. В. Изотов, С. Я. Кипарисов. “Особенность высокочастотной восприимчивости тонких магнитных плёнок с одноосной анизотропией”. Письма в ЖЭТФ **74**, 248 (2001)
2. Т. М. Василевская, Д. И. Семенцов. “Ферромагнитный резонанс в одноосной магнитной плёнке при подмагничивании вдоль оси трудного намагничивания”. ЖЭТФ **137**, 861 (2010).
3. V. A. Atsarkin, V. V. Demidov, A. E. Mefed, V. Yu. Nagorkin, “Magnetic Pseudoresonance in Manganite Thin Films”. Appl. Magn. Reson. **45**, 809-816 (2014).
4. A. Azevedo, L. H. Vilela-Leão, R. L. Rodríguez-Suárez, A. F. Lacerda Santos, and S. M. Rezende, “Spin pumping and anisotropic magnetoresistance voltages in magnetic bilayers: Theory and experiment”. Phys. Rev. B **83**, 144402 (2011).
5. V. V. Demidov. “Applying of Magnetic Pseudoresonance for Studying the Anisotropy of Magnetoresistance in Thin Ferromagnetic Films” Appl. Magn. Res. **52**, 797-803 (2021)

**Индукцированные магнитным полем фазовые переходы в высокоанизотропных ферримагнетиках  $RFe_5Al_7$**

Н.В. Мушников, Е.В. Розенфельд, Д.И. Горбунов<sup>1</sup>, Ш. Ямамото<sup>1</sup>, Й. Возница<sup>1</sup>, К. Стром<sup>2</sup>, А.В. Андреев<sup>3</sup>

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

<sup>1</sup>*Лаборатория сильных магнитных полей HLD-EMFL, Дрезден, Германия*

<sup>2</sup>*Немецкий электронный синхротрон DESY, Гамбург, Германия*

<sup>3</sup>*Институт физики Чешской академии наук, Прага, Чехия*

Проведены измерения магнитных свойств и рентгеновского магнитного циркулярного дихроизма (XMCD) ферримагнитных монокристаллов интерметаллидов  $RFe_5Al_7$  ( $R = Tb, Dy, Ho, Tm$ ). На кривых намагничивания вблизи температуры магнитной компенсации обнаружены скачки намагниченности, величина и критическое поле которых сильно зависят от температуры. Предложена модель намагничивания ферримагнетика с двумя магнитными подрешетками, связанными слабым междоузельным обменным взаимодействием. Получены аналитические выражения для кривой намагничивания и критического поля спин-переориентационного перехода. Построена магнитная фазовая диаграмма и определены магнитные структуры, реализующиеся в разных полях при различных температурах. С использованием XMCD в магнитных полях до 30 Тл получено прямое экспериментальное доказательство когерентного скачкообразного вращения магнитных моментов 3d- и 4f-подрешеток.

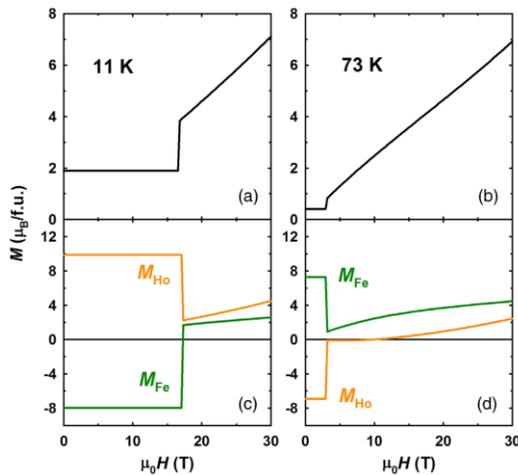


Рисунок - 1 Рассчитанные полевые зависимости намагниченности  $HoFe_5Al_7$  и магнитных моментов подрешеток Fe и Ho при температурах ниже (11 K) и выше (73 K) температуры компенсации

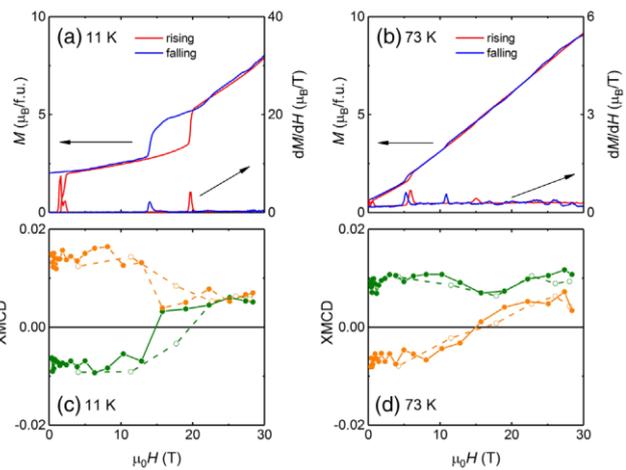


Рисунок - 2 Измеренные полевые зависимости намагниченности и сигнала XMCD от подрешеток Fe (зеленый цвет) и Ho (желтый цвет) монокристалла  $HoFe_5Al_7$

**Публикации:**

1. [High-field soft-x-ray dichroism of a hard ferrimagnet with easy-plane anisotropy](#) / Sh. Yamamoto, D.I. Gorbunov, I.F. Diaz-Ortega, A. Miyata, T. Kihara, Y. Kotani, T. Nakamura, N.V. Mushnikov, A.V. Andreev, H. Nojiri, J. Wosnitza // Phys. Rev. B. — 2021. — V. 104. — P. 064405 (7 p).
2. [Element- and orbital-selective magnetic coherent rotation at the first-order phase transition of a hard uniaxial ferrimagnet](#) / Sh. Yamamoto, D.I. Gorbunov, H. Akai, H. Yasumura, Y. Kotani,

T. Nakamura, T. Kato, N.V. Mushnikov, A.V. Andreev, H. Nojiri, J. Wosnitza // Phys. Rev. B. — 2020. — V. 101. — P. 174430 (6 p).

3. [Microscopic Nature of the First-Order Field-Induced Phase Transition in the Strongly Anisotropic Ferrimagnet  \$\text{HoFe}\_5\text{Al}\_7\$](#)  / D.I. Gorbunov, C. Strohm, M.S. Henriques, P. van der Linden, B. Pedersen, N.V. Mushnikov, E.V. Rosenfeld, V. Petříček, O. Mathon, J. Wosnitza, A.V. Andreev // Phys. Rev. Lett.. — 2019. — V. 122. — P. 127205 (6 p).

*Актуальность* исследования: Редкоземельные интерметаллиды сочетают в себе высокие температуры магнитного упорядочения, типичные для 3d металлов, и сильную магнитную анизотропию редкоземельных ионов. Изучение взаимодействия между делокализованными 3d электронами и локализованными 4f электронами представляет как фундаментальный, так и практический интерес. Экспериментально это взаимодействие можно исследовать в ферримагнетиках с противоположно направленными подрешетками. В теоретическом рассмотрении необходимо учитывать, что в магнитном поле подрешетки оказываются неколлинеарными.

*Цель работы:* Экспериментально исследовать магнитные свойства ферримагнетиков  $R\text{Fe}_5\text{Al}_7$  и предложить модель намагничивания анизотропного ферримагнетика, которая позволяет интерпретировать полученные результаты.

*Авторский вклад* сотрудников ИФМ: Развитие теории намагничивания двухподрешеточного анизотропного ферримагнетика со слабым межподрешеточным обменным взаимодействием, анализ результатов исследования, написание текста статей.

## 1. Параметры межподрешеточного обменного взаимодействия.

С использованием теории молекулярного поля для двухподрешеточного ферримагнетика из температурных зависимостей намагниченности определен параметр обменного взаимодействия  $n_{R-Fe}$ . Предполагается, что подрешетка  $R$  упорядочивается под действием молекулярного поля, создаваемого подрешеткой Fe. Для  $\text{DyFe}_5\text{Al}_7$  (Рисунок 3) получены значения  $n_{R-Fe} = 5.3$  Тл/ $\mu_B$ , что соответствует молекулярному полю 42 Тл. В ряду  $R\text{Fe}_5\text{Al}_7$  с различными  $R$  молекулярное поле убывает от 62 Тл для  $R = \text{Gd}$  до 16 Тл для  $R = \text{Tm}$ .

## 2. Процессы намагничивания.

При приложении магнитного поля вдоль направления легкого намагничивания в базисной плоскости вблизи температуры магнитной компенсации в соединениях с  $R = \text{Dy}$ ,  $\text{Ho}$  и  $\text{Tb}$  обнаружен скачок намагниченности в критическом поле, значение которого стремится к нулю в точке компенсации.

Для объяснения наблюдаемых фазовых переходов развита феноменологическая теория намагничивания анизотропного ферримагнетика с двумя слабо взаимодействующими магнитными подрешетками, одна из которых обладает магнитной анизотропией. Предполагается, что под действием магнитного поля происходит спин-переориентационный переход в направлении оси легкого намагничивания тетрагонального кристалла, перпендикулярной приложенному магнитному полю. Получены аналитические выражения

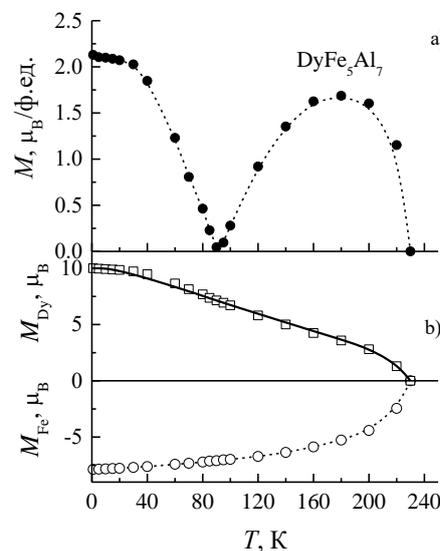


Рисунок - 3 Температурные зависимости спонтанного магнитного момента (a) и магнитных моментов подрешеток (b) монокристалла  $\text{DyFe}_5\text{Al}_7$

для кривой намагничивания и критического поля спин-переориентационного перехода. Предсказано, что в дополнение к наблюдаемому экспериментально индуцированному магнитным полем фазовому переходу, в сильных магнитных полях должен наблюдаться еще один переход, после которого ориентация магнитных моментов будет близка к коллинеарной ферромагнитной.

Построена магнитная фазовая диаграмма и определены магнитные структуры, реализующиеся в разных полях при различных температурах (Рисунок 4).

В  $TmFe_5Al_7$  с увеличением температуры вследствие конкуренции одноосной анизотропии Tm и плоскостной анизотропии Fe подрешетки при 64 К происходит спонтанный спин-переориентационный переход из направления [001] к базисной плоскости. Структура становится антиферромагнитной в интервале температур 64-82 К. Предложена модель, объясняющая смену типа магнитного упорядочения вследствие ослабления обменного взаимодействия Tm-Fe.

### 3. Исследования XMCD.

Экспериментальная верификация модели намагничивания ферромагнетиков  $RFe_5Al_7$  была проведена при исследовании рентгеновского магнитного циркулярного дихроизма на синхротронах Desy (Германия) и SPring-8 (Япония) в сильных импульсных магнитных полях. Метод позволяет отслеживать вращение намагниченности отдельно в подрешетках R и Fe. Эксперименты подтвердили наличие индуцированного магнитным полем фазового перехода 1-го рода в направлении перпендикулярно приложенному полю как выше, так и ниже точки компенсации (Рисунки 1, 2 и 5). Обнаружено, что модель нежестких магнитных подрешеток дает более адекватное описание полевой зависимости намагниченности выше температуры компенсации.

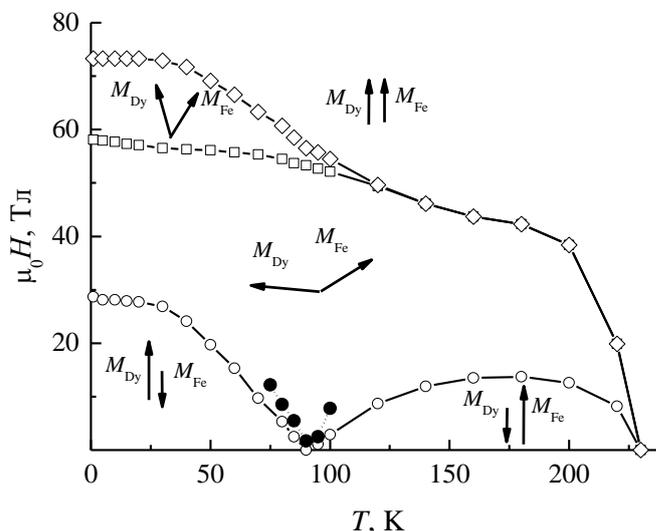


Рисунок - 4 Магнитная фазовая диаграмма  $DyFe_5Al_7$  в плоскости  $T-H$  при намагничивании вдоль направления [100] кристалла. Сплошные символы – эксперимент.

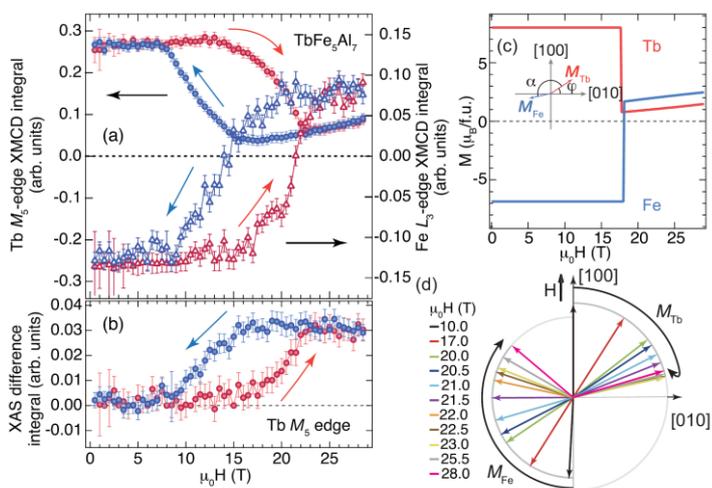


Рисунок - 5 XMCD (a) и XAS (b) сигналы, расчетные значения намагниченностей подрешеток (c) и схема вращения магнитных моментов (d) монокристалла  $TbFe_5Al_7$ .

*Дополнительные публикации:*

4. Magnetic anisotropy and magnetic phase transitions in  $RFe_5Al_7$  [Текст] / D.I. Gorbunov, S. Yasin, A.V. Andreev, Y. Skourski, N.V. Mushnikov, E.V. Rosenfeld, S. Zherlitsyn, J. Wosnitza // *J. Magn. Magn. Mater.* — 2015. — V. 383. — P. 208—214.
5. Phase transitions of anisotropic and exchange origins in  $TmFe_5Al_7$  [Текст] / D.I. Gorbunov, S. Yasin, A.V. Andreev, N.V. Mushnikov, E.V. Rosenfeld, Y. Skourski, S. Zherlitsyn, J. Wosnitza // *Phys. Rev. B.* — 2014. — V. 89. — P. 214417 (10 p).
6. Spontaneous and field-induced phase transitions in  $TbFe_5Al_7$  [Текст] / D.I. Gorbunov, S. Yasin, A.V. Andreev, N.V. Mushnikov, Y. Skourski, S. Zherlitsyn, J. Wosnitza // *J. Magn. Magn. Mater.* — 2014. — V. 365. — P. 56—63.
7. Магнитные фазовые переходы в ферримагнетике  $DyFe_5Al_7$  вблизи точки компенсации [Текст] / Н.В. Мушников, Е.В. Розенфельд, Д.И. Горбунов, А.В. Андреев // *ФММ.* — 2014. — Т. 115. — С. 274—284.

## Магнитострикция и тепловое расширение в нестехиометрических соединениях $TbCo_2Mn_x$

Е.Г. Герасимов, А.А. Инишев, П.Б. Терентьев, В.А. Казанцев, Н.В. Мушников  
Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург

Исследованы магнитострикция и тепловое расширение нестехиометрических соединений  $TbCo_2Mn_x$  ( $0 \leq x \leq 0.6$ ), которые кристаллизуются в кубической решетке типа  $MgCu_2$ , несмотря на значительное отклонение от стехиометрии. В рамках модели молекулярного поля для двухподрешеточного ферромагнетика вычислены внутри и междошрешеточные обменные взаимодействия. Показано, что сильное возрастание температуры Кюри в нестехиометрических соединениях с ростом концентрации Mn обусловлено возрастанием магнитного момента 3d подрешетки и внутривошрешеточного 3d-3d обменного взаимодействия. Установлено, что соединения обладают большой объемной и анизотропной магнитострикцией в широком диапазоне температур. При комнатной температуре соединение  $TbCo_2Mn_{0.4}$  обладает высокой линейной магнитострикцией ( $\sim 400 \cdot 10^{-6}$  в магнитном поле 5 кЭ), что позволяет рассматривать нестехиометрические соединения  $TbCo_2Mn_x$  как перспективные материалы для различных магнитострикционных приложений.

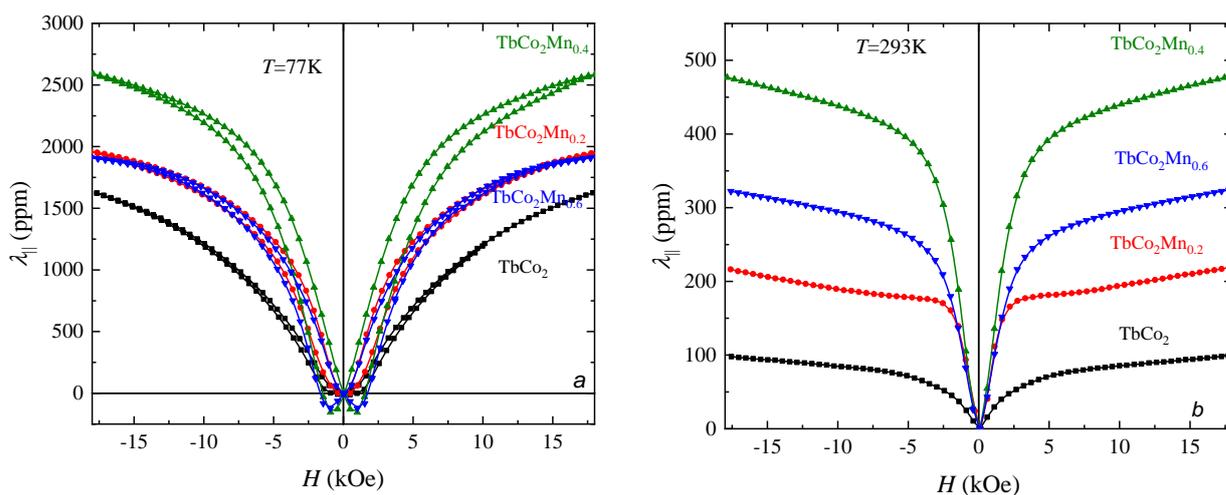


Рисунок - 1 Зависимость линейной магнитострикции от напряженности магнитного поля в нестехиометрических соединениях  $TbCo_2Mn_x$  с различным содержанием марганца при температурах 77K (a) и 293K (b).

### Публикация:

1. [Magnetostriction and thermal expansion of nonstoichiometric  \$TbCo\_2Mn\_x\$  compounds](#) / E.G. Gerasimov, A.A. Inishev, P.B. Terentev, V.A. Kazantsev, N.V. Mushnikov // Journal of Magnetism and Magnetic Materials.—2021.—V.523.—P.167628.

**Актуальность исследования:** недавно было обнаружено существование новых нестехиометрических соединений  $RCo_2Mn_x$  со структурой типа  $MgCu_2$ . В отличие от твердых растворов замещения, в которых атомы 3d переходных металлов занимают только позиции 3d металла (16d), в нестехиометрических соединениях 3d атомы частично занимают и позиции редкоземельного металла (8a). Таким образом в нестехиометрических соединениях

открываются новые возможности для влияния на физические свойства фаз Лавеса со структурой типа  $MgCu_2$ .

*Цель* нашего исследования: экспериментальное изучение теплового расширения, магнитострикции и обменных взаимодействий в нестехиометрических соединениях  $TbCo_2Mn_x$  ( $0 \leq x \leq 0.6$ ).

*Объект* исследования: нестехиометрические сплавы  $TbCo_2Mn_x$ .

*Методы* исследования: тепловое расширение, магнитные свойства, магнитострикция, расчёты обменных взаимодействий в модели молекулярного поля.

*Авторский вклад* сотрудников ИФМ: идея исследования, постановка задачи, синтез соединений, проведение экспериментов, анализ экспериментальных результатов, написание текста статьи.

*Результаты:*

## 1. Исследовано тепловое расширение нестехиометрических соединений $TbCo_2Mn_x$ ( $0 \leq x \leq 0.6$ ), определены различные вклады в тепловое расширение.

На температурных зависимостях линейного теплового расширения  $\Delta L/L$  для всех сплавов наблюдается аномалия при температуре Кюри (Рис.2). В предположении, что выше температуры Кюри тепловое расширение сплавов является суммой электронной, фоновой составляющих и вклада от спиновых флуктуаций, изменение  $\Delta L/L$  с температурой может быть записано в следующем виде:

$$\frac{\Delta L}{L} = (K_1 + K_1')T^2 + K_2T \left(\frac{3}{z^3}\right) \int_0^z \frac{x^3 dx}{e^x - 1}, \quad (1)$$

где:  $K_1$  – коэффициент электронного вклада в тепловое расширение;  $K_1'$  – коэффициент спиновых флуктуаций в тепловое расширение;  $K_2$  – коэффициент фоновый вклад в тепловое расширение;  $T$  – температура;  $z = (\theta_D/T)$ ;  $\theta_D$  – температура Дебая. Пунктирные линии на Рис.2 показывают результаты подгонки экспериментальных кривых с использованием выражения (1). Как видно из Рис.2, уравнение (1) хорошо описывает температурные зависимости теплового расширения соединений при температурах выше температуры Кюри. Величина  $(K_1 + K_1')$  намного меньше, чем в  $YCo_2$  ( $9.2 \cdot 10^{-9}$ ), слабо изменяется с ростом концентрации марганца, и близка к значениям  $(K_1 + K_1')$  в соединениях  $YNi_2$  и  $YAl_2$ , что указывает на малый вклад спиновых флуктуаций в тепловое расширение соединений. Наибольшие изменения с ростом концентрации марганца происходят в величине коэффициента фоновый вклад в тепловое расширение, что может быть связано с особенностью формирования кристаллической решетки нестехиометрических соединений в которой атомы марганца занимают как позиции 3d металла, так и позиции Tb.

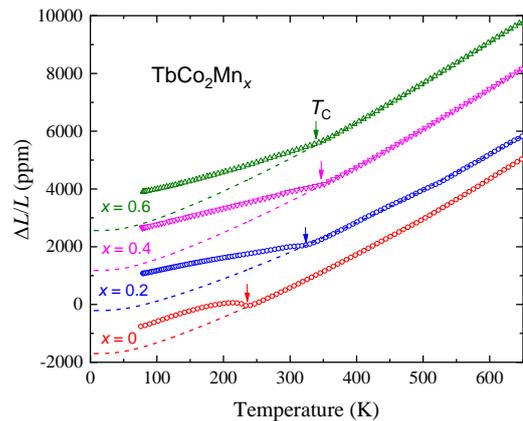


Рисунок - 2 Температурная зависимость теплового расширения соединений  $TbCo_2Mn_x$  с различным содержанием марганца. Точки – эксперимент, пунктирные линии – расчет.

## 2. Измерена магнитострикция соединений, определена анизотропная и объемная магнитострикция и их изменение с изменением температуры и концентрации марганца.

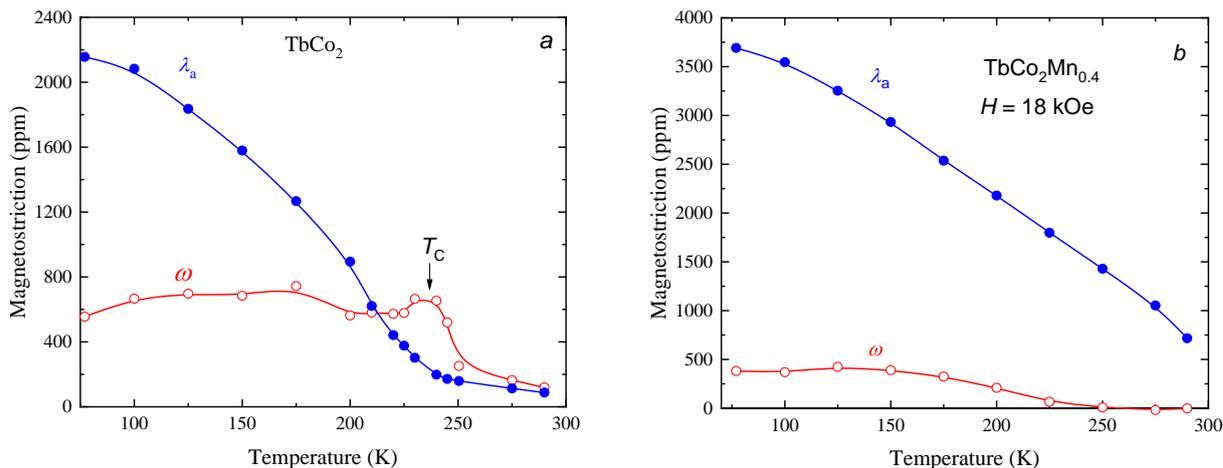


Рисунок - 3 Температурные зависимости объемной  $\omega$  и анизотропной  $\lambda_a$  магнитострикции в магнитном поле 18 кЭ для соединений  $TbCo_2Mn_x$  с различным содержанием марганца.

Во всех соединениях при низких температурах существует значительная по величине объемная магнитострикция, которая дает существенный вклад в общую магнитострикцию соединений. Объемная магнитострикция сравнима по величине с анизотропной в соединениях с  $x = 0, 0.2$ , и уменьшается с ростом концентрации марганца до  $x = 0.4$ , что свидетельствует о том, что магнетизм 3d подрешетки становится все более локализованным. В области комнатной температуры в нестехиометрических соединениях измеряемая силовая магнитострикция практически полностью определяется анизотропной магнитострикцией. Форма кривых  $\lambda(H)$  позволяет сделать заключение, что возрастание магнитострикции частично может быть обусловлено уменьшением магнитной анизотропии соединений с ростом концентраций марганца вследствие того, что марганец частично занимает позиции Tb и ослабляет анизотропию редкоземельной подрешетки. При комнатной температуре возрастание магнитострикции с ростом концентрации марганца обусловлено как уменьшением магнитной анизотропии, так и ростом температуры Кюри соединений. Наблюдаемое увеличение магнитострикции при комнатной температуре в нестехиометрических соединениях в 5 раз, по сравнению, с бинарным TbCo<sub>2</sub> позволяет рассматривать нестехиометрические соединения как потенциальные материалы, применимые для различных магнитострикционных приложений.

### 3. В рамках модели молекулярного поля для двухподрешеточного ферримагнетика определены константы обменных взаимодействий в соединениях.

Значение молекулярного поля, действующего на 3d подрешетку кобальта соединения в TbCo<sub>2</sub> составляет 3735 кЭ и совпадает со значениями, полученными с помощью порошковой рентгеновской дифракции и кривых намагничивания на монокристаллах. Введение марганца в нестехиометрические сплавы приводит к увеличению магнитного момента 3d подрешетки, к небольшому увеличению Tb-3d обменных взаимодействий и к значительному увеличению 3d-3d и Tb-Tb обменных взаимодействий.

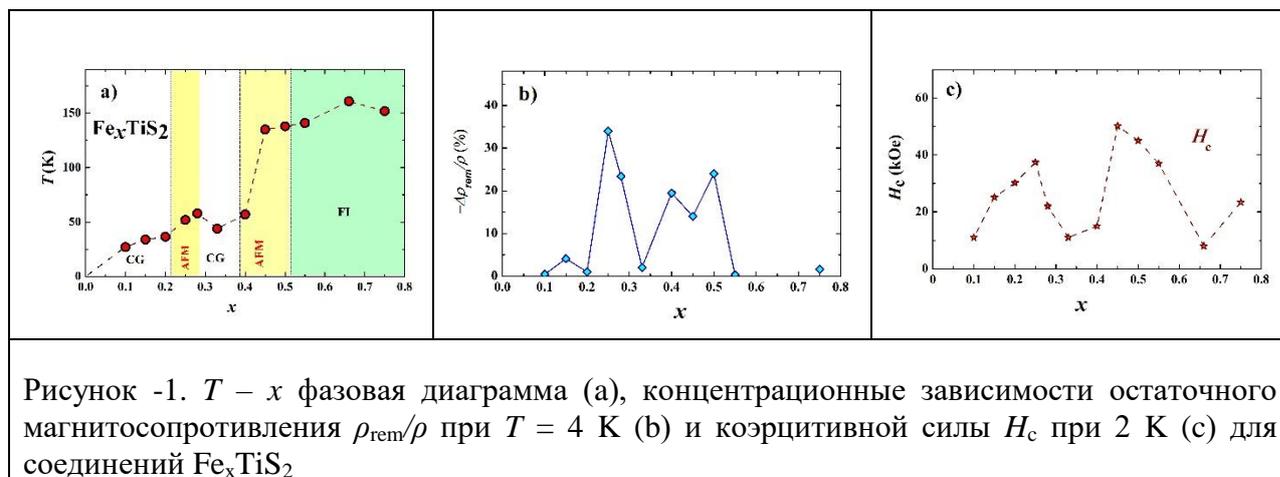
## Магнитные состояния, фазовые превращения и остаточное магнитосопротивление в интеркалированных соединениях $\text{Fe}_x\text{TiS}_2$

Н.В. Баранов, Н.В. Селезнева<sup>1</sup>, Е.М. Шерокалова<sup>1</sup>, А.С. Вологов, А.А. Шерстобитов

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

<sup>1</sup>*Институт естественных наук и математики УрФУ, г. Екатеринбург*

Структурная и концентрационная обусловленность магнитных состояний и транспортных свойств слоистых соединений  $\text{Fe}_x\text{TiS}_2$  ( $0 \leq x \leq 0.75$ ) исследована с помощью рентгеновской и нейтронной дифракции, измерений намагниченности, электросопротивления и магнитосопротивления. Установлено, что в системе  $\text{Fe}_x\text{TiS}_2$  с увеличением содержания Fe реализуются различные магнитные состояния в следующей последовательности: спиновое и кластерное стекло при  $x < 0.25$ , антиферромагнитный (AFM) порядок при  $x \approx 0.25-0.28$ , состояние кластерного стекла при  $x \approx 0.33$ , AFM при  $x \approx 0.45-0.5$  и ферромагнитное упорядочение при  $x > 0.5$ . Изменения магнитного состояния  $\text{Fe}_x\text{TiS}_2$  с концентрацией Fe сопровождаются немонотонными изменениями остаточного магнитосопротивления и коэрцитивной силы с максимальными абсолютными значениями в соединениях с AFM упорядочением. Большие значения коэрцитивной силы ( $H_c$  до 50 кЭ при 2 К) в соединениях  $\text{Fe}_x\text{TiS}_2$  с исходным AFM состоянием указывают на большую роль в процессах перемагничивания внутреннего обменного смещения, что представляет интерес для разработки новых магнитотвердых материалов, не содержащих дорогостоящих редкоземельных элементов.



### Публикации:

1. [Multiple magnetic states and irreversibilities in the  \$\text{Fe}\_x\text{TiS}\_2\$  system](#) [Текст] / Selezneva N.V., Baranov N.V., Sherokalova E.M., Volegov A.S., Sherstobitov A.A. // Physical Review B. — 2021. — V. 104. — P. 64411—64424.
2. [Remnant magnetoresistance and virgin magnetic state in  \$\text{Fe}\_{0.25}\text{TiS}\_2\$](#)  [Текст] / Selezneva N.V., Baranov N.V., Sherokalova E.M., Volegov A.S., Sherstobitov A.A. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2021. — V. 519. — P. 167480—167487.

**Актуальность** исследования: Исследование магнитных и транспортных свойств соединений с квазидвумерной структурой является актуальным благодаря проявлению в них необычных электронных и магнитных состояний и потенциальными возможностями их практических применений.

**Цель** нашего экспериментального исследования: выявить связь магнитного состояния и транспортных свойств интеркалированных соединений на основе дихалькогенидов переходных металлов с особенностями их кристаллической структуры.

**Задачи** исследования:

1) Выполнить синтез однофазных поликристаллических образцов  $\text{Fe}_{0.25}\text{TiS}_2$  и установить закономерности изменений их кристаллической структуры при увеличении содержания атомов Fe; 2) провести детальные исследования изменений в поведении намагниченности и электросопротивления с температурой и под действием магнитного поля в зависимости от содержания Fe; 3) на основе анализа результатов комплексного исследования, включая данные нейтронографии, построить магнитную фазовую диаграмму исследуемой системы.

**Объект** исследования: поликристаллические образцы интеркалированных соединений  $\text{Fe}_x\text{TiX}_2$ .

**Методы** исследования: рентгеновская и нейтронная дифракция, измерения температурных и полевых зависимостей намагниченности, электросопротивления и магнитосопротивления.

**Авторский вклад** сотрудников ИФМ: идея исследования, постановка задачи, проведение измерений магнитосопротивления, анализ результатов исследования, написание текста статьи.

1. Установлено, что при увеличении содержания Fe в соединениях  $\text{Fe}_x\text{TiS}_2$  происходит переход от структуры с неупорядоченным расположением интеркалированных атомов типа  $\text{CdI}_2$  при  $x < 0.25$  к сверхструктурам типа  $M_5X_8$ ,  $M_2X_3$  и  $M_3X_4$  с различной симметрией при  $x \geq 0.25$  (рис.2).

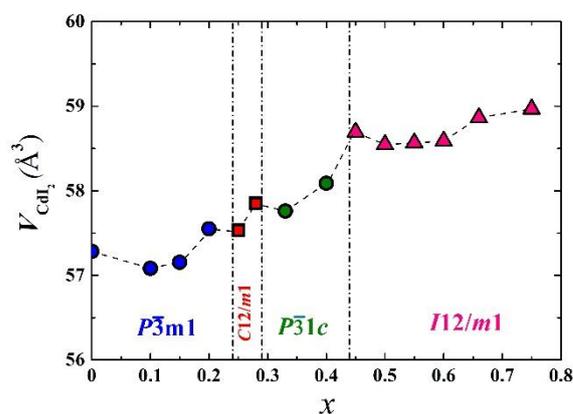
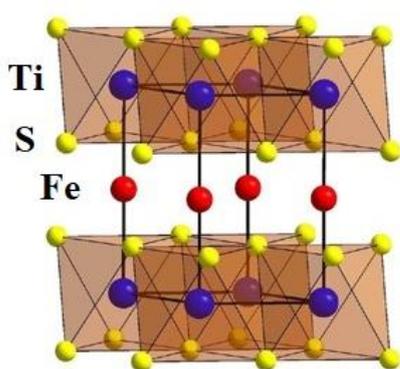


Рисунок - 2 Схематическое изображение кристаллической структуры соединений  $\text{Fe}_x\text{TiS}_2$  и изменение приведенного объема элементарной ячейки структуры типа  $\text{CdI}_2$  и симметрии кристаллической решетки с увеличением содержания Fe в  $\text{Fe}_x\text{TiS}_2$ .

2. На основе совместного анализа результатов измерений намагниченности и магнитосопротивления (рис.3) показано, что в системе реализуется следующая последовательность магнитных состояний: спиновое и кластерное стекло при  $x < 0.25$ , антиферромагнитный (AFM) порядок при  $x \approx 0.25-0.28$ , состояние кластерного стекла при  $x \approx 0.33$ , AFM при  $x \approx 0.45-0.5$  и ферримагнитное упорядочение при  $x > 0.5$ . Отсутствие дальнего магнитного порядка при  $x = 0.33$  подтверждено данными нейтронографии и обусловлено образованием треугольной треугольной сетки атомов Fe и фрустрациями обменных взаимодействий. Ферримагнитное упорядочение при  $x > 0.5$  является следствием частичного перемешивания атомов Fe и Ti в катионных слоях.

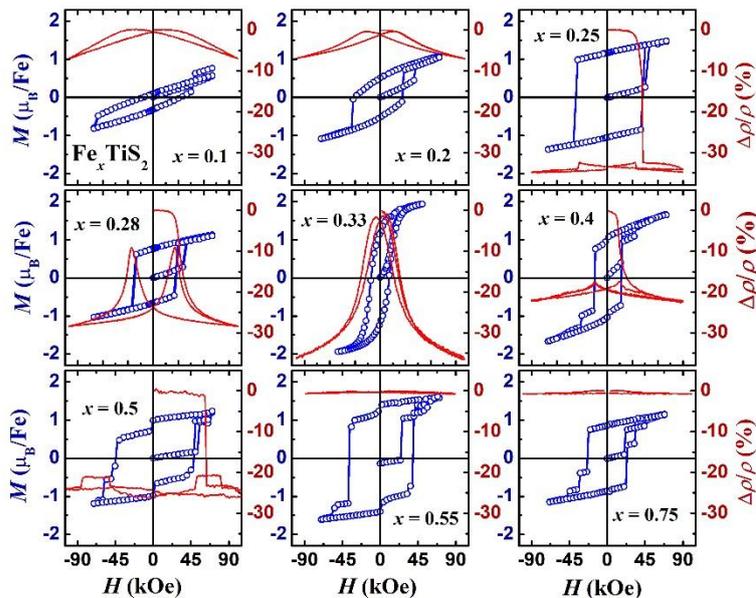


Рисунок - 3 Полевые зависимости магнитосопротивления (линии) при  $T = 4$  К и намагниченности (символы) при 2 К на поликристаллических образцах  $\text{Fe}_x\text{TiS}_2$ .

### Выводы:

- 1) Проведены исследования кристаллической структуры, магнитных состояний, фазовых переходов и процессов перемангничивания в интеркалированных атомами железа дихалькогенидах титана  $\text{Fe}_x\text{TiS}_2$ .
- 2) Установлено, что в системе  $\text{Fe}_x\text{TiS}_2$  формируются различные магнитные состояния в зависимости от концентрации атомов Fe и характера их распределения: спиновое и кластерное стекло при  $x < 0.25$ , AFM упорядочение при  $x \approx 0.25-0.28$ , кластерное стекло при  $x \approx 0.33$ , AFM порядок при  $x \approx 0.45-0.5$  и ферримагнитное упорядочение при  $x > 0.5$ .
- 3) Изменение магнитного состояния  $\text{Fe}_x\text{TiS}_2$  с концентрацией Fe сопровождаются немонотонными изменениями остаточного магнитосопротивления ( $|\Delta\rho_{\text{rem}}/\rho|$  до 35 %) и коэрцитивной силы (от 10 до 60 кЭ) с максимальными абсолютными значениями в соединениях с антиферромагнитным основным состоянием. Большие значения коэрцитивной силы ( $H_c$  до 50 кЭ при 2 К) в соединениях  $\text{Fe}_x\text{TiS}_2$  с исходным AFM состоянием указывают на большую роль в процессах перемангничивания внутреннего обменного смещения.

## Влияние упорядочения ионов Pr и Ba в двойных манганитах PrBaMn<sub>2</sub>O<sub>6</sub> на ИК поглощение и эффект магнитопротекания

Е. В. Мостовщикова, Е. В. Стерхов<sup>1</sup>, С. В. Наумов, Н. С. Ермолов, С. А. Упоров<sup>1</sup>, С. Г. Титова<sup>1</sup>

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

<sup>1</sup> *Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург*

Исследованы магнитные и оптические свойства в ближнем ИК диапазоне двойных слоистых манганитов PrBaMn<sub>2</sub>O<sub>6</sub> с упорядочением ионов Pr и Ba 90, 40 и 0%. Сопоставление магнитных данных и спектров оптической плотности и температурных зависимостей пропускания света в ближнем ИК диапазоне свидетельствует об изменениях в системе носителей заряда в виде перехода металл-изолятор вблизи магнитных фазовых переходов. Температуры и тип магнитных переходов и характер переходов металл-изолятор зависят от степени упорядочения ионов Pr и Ba. Для двойных манганитов PrBaMn<sub>2</sub>O<sub>6</sub> впервые измерен эффект магнитопротекания, который объясняется увеличением доли делокализованных носителей заряда при приложении магнитного поля. Наибольшее значение магнитопротекания (до 12% в поле 8 кЭ) обнаружено с манганите с частичным упорядочением.

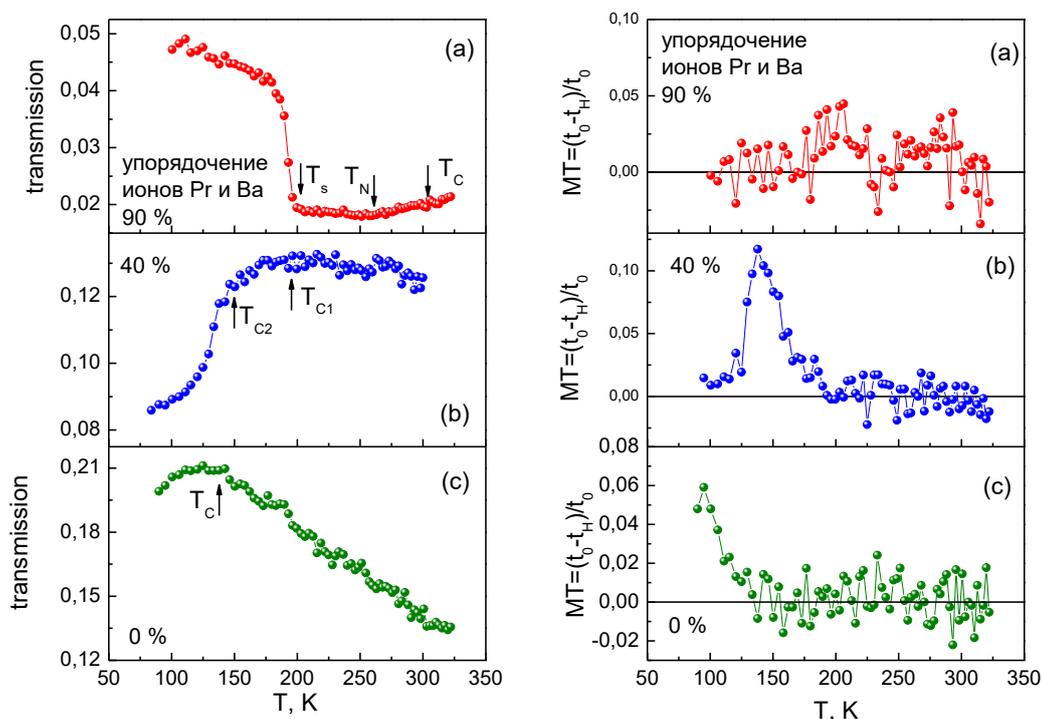


Рисунок - 1 Температурные зависимости пропускания света (слева) и магнитопротекания (справа) при энергии E=0.2 эВ манганитов PrBaMn<sub>2</sub>O<sub>6</sub> с разной степенью упорядочения ионов Pr и Ba

### Публикация:

1. [Effect of A-site ordering on IR absorption and magnetotransmission in PrBaMn<sub>2</sub>O<sub>6</sub> double manganite](#) / E. V. Mostovshchikova, E. V. Sterkhov, S. V. Naumov, N. S. Ermolov, S. A. Uporov, S. G. Titova // Journal of Magnetism and Magnetic Materials.—2021.—V.538.—P.168247.

*Актуальность.* В отличие от манганитов  $\text{Re}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  послойное упорядочение ионов редкоземельного элемента (Re) и Ba в двойных манганитах  $\text{ReBaMn}_2\text{O}_6$  приводит к сильному росту температур фазового перехода (ФП) из парамагнитного в магнитоупорядоченное состояние, и (в зависимости от вида Re элемента) наблюдается набор магнитных и структурных ФП. Ключевым фактором, влияющим на температуры ФП, является степень упорядочения ионов Re и Ba. Особенности зарядовой подсистемы в зависимости от упорядочения в манганитах типа  $\text{ReBaMn}_2\text{O}_6$  и взаимосвязь с магнитными ФП недостаточно изучены, поскольку преимущественно изучаются порошки или поликристаллы. Оптические исследования в области взаимодействия света с носителями заряда (ближний ИК диапазон) дают возможность изучения изменений в зарядовой подсистеме при магнитных и/или структурных ФП. Кроме того, в работе [S.Yamada et al. PRB 123, 126602 (2019)] показано, что в двойном манганите  $\text{NdBaMn}_2\text{O}_6$  наблюдается «колоссальное магнитосопротивление в низких магнитных полях при комнатной температуре», что позволило предположить возможность обнаружения магнитопротекания в подобных манганитах. Поиск новых материалов с эффектом магнитопротекания необходим для расширения класса материалов для магнитооптических устройств.

*Цель работы* состоит в изучении изменений в зарядовой подсистеме, происходящих в двойных манганитах  $\text{PrBaMn}_2\text{O}_6$  с разной степенью упорядочения ионов Pr и Ba при магнитных и структурных фазовых переходах.

*Задачи исследования:* 1) получить манганиты  $\text{PrBaMn}_2\text{O}_6$  с разной степенью упорядочения ионов Pr и Ba; 2) определить магнитные характеристики и измерить оптические свойства в ближнем ИК диапазоне в парамагнитном и магнитоупорядоченном состоянии без и в магнитном поле; 3) сделать выводы о взаимосвязи изменений в магнитной и зарядовой подсистеме с температурой в зависимости от степени упорядочения; 4) сделать выводы о влиянии упорядочения на эффект магнитопротекания.

*Объекты исследования:* нанопорошок  $\text{PrBaMn}_2\text{O}_6$ , выращенный из него монокристалл манганита с частичным упорядочением и поликристалл неупорядоченного  $\text{Pr}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$ .

*Методы исследования:* измерение рентгеновской дифракции в широком диапазоне углов (от 10 до  $110^\circ$ ), для определения степени структурного упорядочения, магнитометрия, просвечивающая ИК спектроскопия порошковых композитов.

*Авторский вклад* сотрудников ИФМ: идея исследования, постановка задачи, изготовления части образцов, проведение оптических и магнитооптических исследований, анализ результатов исследования, написание текста статьи.

*Область возможного применения полученных результатов:* ИК оптоэлектроника - создание новых рабочих тел для магнитооптических устройств, работающих на эффекте магнитопротекания.

## **1. Определено магнитное состояние и температуры магнитных фазовых переходов.**

Данные магнитометрии свидетельствуют об изменении магнитного состояния в зависимости от степени упорядочения ионов Pr и Ba в манганите  $\text{PrBaMn}_2\text{O}_6$ . При упорядочении 90 % наблюдается фазовый переход из парамагнитного в ферромагнитное состояние при  $T_C=305$  К и переход в антиферромагнитное состояние при  $T_N=262$  К. Для неупорядоченного манганита наблюдается небольшой рост намагниченности ниже 130 К и поведение типа спинового стекла. Для манганита с частичным упорядочением имеется переход в ферромагнитное состояние вблизи  $T_{C1}=190$  К и, возможно, существование еще

одной фазы с более низкой температурой Кюри  $T_{C2}=154$  К. Сравнение с литературными данными позволило оценить степень упорядочения этого манганита как 40 %.

## **2. Проанализированы спектры ИК поглощения и температурные зависимости пропускания.**

Для исследованных манганитов измерены спектры пропускания в интервале 0.09 – 0.6 эВ и рассчитаны спектры оптической плотности (аналог спектров поглощения). Обнаружено, что упорядоченный манганит имеет наибольшее поглощение. Охлаждение приводит к изменению поглощения при  $E < 0.3$  эВ. Для 90 % упорядоченного и неупорядоченного манганитов происходит уменьшение поглощения, а для манганита с 40% упорядочения – увеличение, и абсолютная разница в поглощении растет с уменьшением энергии, что характерно для исчезновения или появления Друде-вклада, соответственно. Для уточнения характера изменения системы носителей заряда измерены температурные зависимости пропускания в области 0.1 – 0.5 эВ в интервале 85 – 320 К и обнаружено, что в области Друде-вклада для манганита 90 % вблизи  $T_N$  происходит смена уменьшения пропускания при охлаждении («металлический» характер) на увеличение («полупроводниковый» характер) с последующим резким ростом пропускания вблизи температуры структурного перехода. Для манганита с частичным упорядочением вблизи  $T_{C1}$  высокотемпературный «полупроводниковый» характер сменяется «металлическим», который усиливается вблизи  $T_{C2}$ . Для неупорядоченного манганита наблюдается ярко выраженный полупроводниковый характер температурной зависимости пропускания до  $T=120$  К (вблизи начала роста намагниченности), а затем – «металлический». Сопоставление данных оптических и магнитных исследований свидетельствует об отклике зарядовой подсистемы на магнитные фазовые переходы в виде перехода «металл-изолятор», как в манганитах типа  $Re_{1-x}Ae_xMnO_3$ .

## **3. Обнаружено магнитопропускание.**

Измерение температурных зависимостей пропускания в магнитном поле 8 кЭ позволило обнаружить эффект магнитопропускания, который наблюдается вблизи  $T_C$  и имеет наибольшее абсолютное значение для манганита с упорядочением 40 %. Для манганита с упорядочением 90% обнаружено также магнитопропускание ~2% вблизи структурного перехода (вблизи 200 К). Ранее магнитооптический отклик на структурные переходы в манганитах  $Re_{1-x}Ae_xMnO_3$  не наблюдался. Для определения спектральной области существования эффекта магнитопропускания проведены измерения в интервале 0.1 – 0.5 эВ и обнаружено, что эффект магнитопропускания имеет место только в той спектральной области, где происходит отклик зарядовой подсистемы на магнитные фазовые переходы, т.е. в области Друде-вклада, и абсолютная величина эффекта растет с уменьшением энергии. Это свидетельствует о том, что эффект магнитопропускания связан с увеличением доли делокализованных носителей заряда при приложении магнитного поля.

### **Выводы:**

В манганитах  $PtBaMn_2O_6$  с разной степенью упорядочения ионов Pt и Ba обнаружен отклик зарядовой подсистемы на магнитные фазовые переходы; вблизи температур Кюри наблюдается переход металл-изолятор. Впервые обнаружен эффект магнитопропускания в двойных манганитах  $PtBaMn_2O_6$ , который достигает 12% в манганите с упорядочением 40 %. Наименьшее магнитопропускание наблюдается в манганите с наибольшей долей упорядочения. Полное упорядочение ионов, которое приводит к росту температуры Кюри, негативным образом сказывается на величине эффекта.

**Магнитотепловые свойства тяжелых редкоземельных металлов, сплавов на основе Fe-Rh, наночастиц ферромагнитных оксидов в области фазовых переходов**

В.И. Зверев

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

Действенным инструментом повышения эффективности изучения магнитных материалов является экспериментальное измерение и анализ их магнитотепловых свойств в силу фундаментальной взаимосвязи, существующей между электронной, решеточной и магнитными подсистемами материала при проявлении того или иного магнитотеплового свойства. Под термином магнитотепловые в данной работе понимаются магнитокалорический эффект (МКЭ), магнитные вклады в теплоемкость и энтропию, а также специальные параметры, введенные для характеристики нагрева магнитных наночастиц [1,2]: удельная мощность поглощения (SAR) и собственная мощность потерь (ILP). Указанные параметры объединяют в себе информацию о ключевых свойствах магнитного материала: намагниченности, теплоемкости, магнитной восприимчивости. В ряду магнитотепловых свойств отдельно необходимо отметить магнитокалорический эффект в силу его наибольшей чувствительности к фазовым переходам в магнитных материалах, а также перспективам практического использования эффекта, связанным с построением магнитных холодильных и тепловых машин, основанных на применении МКЭ, применением в медицине, получением сверхнизких температур и др. [3–6] Важно отметить, что максимальных величин магнитотепловые свойства достигают в области магнитных фазовых переходов [7], которые и изучаются в настоящей работе в различных магнитных материалах.

В работе данное явление изучено в нескольких видах магнитных материалов, которые можно рассматривать в качестве модельных, и, соответственно, распространить полученные результаты на более широкие классы функциональных материалов: для анализа были выбраны тяжелые редкоземельные металлы (гадолиний, тербий, диспрозий, гольмий, эрбий, тулий); сплавы на основе железо-родий и наночастицы ферромагнитных оксидов.

Редкоземельные металлы в настоящее время используются во всех без исключения отраслях промышленности. По оценкам экспертов, потребность промышленности в химических соединениях на их основе сохранит тенденцию к росту на протяжении ближайших десятков лет. Вместе с тем практическое использование высокочистых металлов редкоземельной группы требует максимально точного понимания физико-химических свойств используемых металлов, в особенности, магнитных. РЗМ испытывают множество фазовых переходов между совершенно различными магнитными состояниями, критические температуры которых зачастую находятся весьма близко друг от друга и, в основном, в низкотемпературной области. Данное обстоятельство ограничивает практическое применение изученных материалов в широком диапазоне температур и магнитных полей в «рабочей» области (около комнатных температур).

Сплавы FeRh с соотношением атомов железа и родия около 1:1 проявляют максимальные значения МКЭ из всех известных на сегодняшний день материалов. Величины изменения магнитной части энтропии и адиабатического изменения температуры втрое превышают соответствующие значения чистого гадолиния. Более того, эквиатомный сплав железо-родий претерпевает единственный фазовый переход первого рода АФМ-ФМ в области около комнатных температур. В этом смысле данный сплав является модельным соединением, в отличие от модельного гадолиния с единственным фазовым переходом второго рода и других РЗМ, в которых наблюдается каскад фазовых переходов смешанного типа. Соответственно, данный материал интересен как с фундаментальной точки зрения, так как позволяет прояснить

механизм магнитно-структурного фазового перехода первого рода, так и с прикладной, поскольку величина МКЭ в нем в полтора-два раза выше соответствующих значений в других материалах, проявляющих гигантский МКЭ:  $Gd_5Si_{4-x}Ge_x$  [8],  $La(Fe_xSi_{1-x})$  [9],  $MnFeP(As,Ge)$  [10].

При этом, диапазон химических составов, магнитных полей и температур, в котором бинарные сплавы семейства железо-родий проявляют необходимые для практического применения магнитотепловые свойства, довольно узок. Кроме того, родий является одним из самых дорогих металлов в мире в настоящее время, что также существенно затрудняет его широкое использование даже в лабораторных условиях. В связи с этим актуален поиск сплавов, обладающих гигантским МКЭ, но не имеющих в своем составе родия. Таким образом, исследование характера изменений МКЭ и других магнитотепловых свойств при замещении родия более доступными материалами (в трехкомпонентных сплавах на основе железо-родий) также весьма актуально.

В связи с вышесказанным в работе предложена относительно новая область применения изучаемых магнитотепловых явлений (в отличие от ставшей классической области магнитного охлаждения и разработки магнитных тепловых машин), а именно, медицинские приложения.

В используемых на сегодняшний день методиках гипертермии (общая гипертермия, локальная гипертермия с использованием радиочастотного и микроволнового излучения, а также ультразвука) нагрев опухоли вызывает также и существенное повышение температуры соседних здоровых тканей. Для контроля теплового режима проводится измерение температуры с помощью датчиков, введенных в область воздействия. Таким образом, основными недостатками используемых в настоящее время методик гипертермии являются низкая селективность воздействия, а также инвазивный метод контроля температуры [11]. В работе проведен анализ магнитных материалов в виде микро- и наночастиц с уникальными магнитотепловыми свойствами, которые могут найти применение в методе магнитожидкостной гипертермии (МЖГ).

Среди различных способов применения магнитокалорического эффекта особенный интерес представляет технология адресной доставки лекарственных средств. Процесс удаленной, неинвазивной доставки лекарств в пораженные органы или ткани человека является одной из актуальных проблем, стоящих перед наукой в настоящее время. Существующие технологии частично ограничены из-за их неспособности эффективно срабатывать в естественных условиях в отсутствие местного имплантированного источника тепла, невозможности воспроизводимого выпуска в течение нескольких тепловых циклов, медленного ответа на стимулы, их неспособности динамически отрегулировать дозирование препарата в соответствии с потребностями пациента. Соответственно, в работе изучены термодинамические характеристики магнитокалорического материала для покрытия имплантатов и носителей лекарственных средств, который позволит управлять количеством и временем высвобождения лекарственного препарата из покрытия имплантанта.

## Литература:

- [1] R.E. Rosensweig, Heating magnetic fluid with alternating magnetic field, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 252 (2002) 370–374. [https://doi.org/10.1016/S0304-8853\(02\)00706-0](https://doi.org/10.1016/S0304-8853(02)00706-0).
- [2] M. Kallumadil, M. Tada, T. Nakagawa, M. Abe, P. Southern, Q.A. Pankhurst, Suitability of commercial colloids for magnetic hyperthermia, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 321 (2009) 1509–1513. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2009.02.075>.

- [3] A. Kitanovski, P.W. Egolf, Application of magnetic refrigeration and its assessment, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 321 (2009) 777–781. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2008.11.078>.
- [4] A.M. Tishin, Y.I. Spichkin, *The Magnetocaloric Effect and its Applications*, IOP Publishing, Bristol, 2003.
- [5] K.A. Gschneidner Jr, V.K. Pecharsky, A.O. Tsokol, Recent developments in magnetocaloric materials, *Rep. Prog. Phys.* 68 (2005) 1479. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/68/6/R04>.
- [6] N.A. Zarkevich, V.I. Zverev, Viable Materials with a Giant Magnetocaloric Effect, *Crystals*. 10 (2020) 815. <https://doi.org/10.3390/cryst10090815>.
- [7] Н.В. Мушников, *Магнетизм и магнитные фазовые переходы : учебное пособие*, Издательство Уральского университета, 2017. <https://elar.urfu.ru/handle/10995/48961> (accessed August 9, 2021).
- [8] V.K. Pecharsky, Jr. Gschneidner K.A., Giant Magnetocaloric Effect in  $Gd_5(Si_2Ge_2)$ , *Phys. Rev. Lett.* 78 (1997) 4494–4497. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.78.4494>.
- [9] S. Fujieda, A. Fujita, K. Fukamichi, Large magnetocaloric effect in  $La(Fe_xSi_{1-x})_{13}$  itinerant-electron metamagnetic compounds, *Applied Physics Letters*. 81 (2002) 1276–1278. <https://doi.org/10.1063/1.1498148>.
- [10] H. Wada, Y. Tanabe, Giant magnetocaloric effect of  $MnAs_{1-x}Sb_x$ , *Applied Physics Letters*. 79 (2001) 3302–3304. <https://doi.org/10.1063/1.1419048>.
- [11] J. van der Zee, Heating the patient: a promising approach?, *Annals of Oncology*. 13 (2002) 1173–1184. <https://doi.org/10.1093/annonc/mdf280>.

#### Публикации автора по теме работы

1. Гимаев Р. Р. / Особенности магнитных и магнитотепловых свойств сплавов Fe–Rh в области фазового перехода антиферромагнетик–ферромагнетик / Гимаев Р.Р., Ваулин А.А., Губкин А.Ф., **Зверев В.И.** // *Физика металлов и металловедение*. 2020. Т. 121. № 9. С. 907. <https://doi.org/10.31857/S0015323020090041>. IF = 0.877.
2. Девятериков Д. И. / Влияние размерных эффектов на температуру Кюри в тонких пленках Dy и Ho / Девятериков Д.И., Проглядо В.В., Жакетов В.Д., Никитенко Ю.В., Кондратьев О.А., Пашаев Э.М., Субботин И.А., **Зверев В.И.**, Кравцов Е.А., Устинов В.В. // *Физика металлов и металловедение*. 2021. Т. 122. № 5. С. 499. <https://doi.org/10.31857/S001532302105003X>. IF = 0.877.
3. Arreguín-Hernández M. L. / Magnetoelastic transition and magnetocaloric effect in induction melted  $Fe_{100-x}Rh_x$  bulk alloys with  $x = 50, 51$  / Arreguín-Hernández M.L., Sánchez-Valdés C.F., Llamazares J.L.Sánchez, Ríos-Jara D., Pecharsky V.K., Blinov M.I., Prudnikov V.N., Kovalev B.B., **Zverev V.I.**, Tishin A.M. // *Journal of Alloys and Compounds*. 2021. Т. 871. С. 159586. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.159586>. IF = 5.316
4. Astefanoaei I. / Modelling of working parameters of Gd and FeRh nanoparticles for magnetic hyperthermia / Astefanoaei I., Gimaev R., **Zverev V.**, Stancy A. // *Mater. Res. Express*. 2019. Т. 6. № 12. С. 125089. <https://doi.org/10.1088/2053-1591/ab5c4a>. IF = 1.620
5. Balanov V. A. / Synthesis of  $(Mn_{(1-x)}Zn_x)Fe_2O_4$  nanoparticles for magnetocaloric applications / Balanov V.A., Kiseleva A.P., Krivoschapkina E.F., Kashtanov E.A., Gimaev R.R., **Zverev V.I.**, Krivoschapkin P.V. // *J Sol-Gel Sci Technol*. 2020. Т. 95. С. 795. <https://doi.org/10.1007/s10971-020-05237-8>. IF = 2.326
6. Davydov A. S. / Promising magnetic nanoradiosensitizers for combination of tumor hyperthermia and x-ray therapy: Theoretical calculation / Davydov A.S., Belousov A.V., Krusanov

- G.A., Kolyvanova M.A., Kovalev B.B., Komlev A.S., Krivoschapkin P.V., Morozov V.N., **Zverev V.I.** // Journal of Applied Physics. 2021. T. 129. № 3. C. 033902. <https://doi.org/10.1063/5.0032843>. IF = 2.546
7. Ferreira M. C. / Understanding the Dependence of Nanoparticles Magnetothermal Properties on Their Size for Hyperthermia Applications: A Case Study for La-Sr Manganites / Ferreira M. C., Pimentel B., Andrade V., **Zverev V.**, Gimaev R., Pomorov A., Pyatakov A., Alekhina Y., Komlev A., Makarova L., Perov N., Reis M.S. // Nanomaterials. 2021. T. 11. № 7. C. 1826. <https://doi.org/10.3390/nano11071826>. IF = 5.076
  8. Franco V. / Field dependence of the adiabatic temperature change in second order phase transition materials: Application to Gd / Franco V., Conde A., Romero-Enrique J.M., Spichkin Y.I., **Zverev V.I.**, Tishin A.M. // Journal of Applied Physics. 2009. T. 106. № 10. C. 103911. <https://doi.org/10.1063/1.3261843>. IF = 2.546
  9. Gimaev R. / Peculiarities of the magnetocaloric effect in FeRh-based alloys in the vicinity of the first order magnetic phase transition / Gimaev R., **Zverev V.**, Spichkin Y., Tishin A., Miyanaga T. // EPJ Web Conf. 2018. T. 185. C. 05008. <https://doi.org/10.1051/epjconf/201818505008>. IF = 0.395
  10. Gimaev R. / Review on magnetic refrigeration devices based on HTSC materials / Gimaev R., Spichkin Y., Kovalev B., Kamilov K., **Zverev V.**, Tishin A. // International Journal of Refrigeration. 2019. T. 100. C. 1. <https://doi.org/10.1016/j.ijrefrig.2019.01.024>. IF = 3.629
  11. Gimaev R. R. / Magnetic and Electronic Properties of Heavy Lanthanides (Gd, Tb, Dy, Er, Ho, Tm) / Gimaev R., Komlev A., Davydov A., Kovalev B., **Zverev V.** // Crystals. 2021. T. 11. № 2. C. 82. <https://doi.org/10.3390/cryst11020082>. IF = 2.589
  12. Gimaev R. R., **Zverev V. I.**, Mello V. D. Magnetic properties of single-crystalline terbium and holmium – Experiment and modeling // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2020. T. 505. C. 166781. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2020.166781>. IF = 2.993
  13. Jiménez M. J. / Electronic and thermoelectric properties of FeRh Pd-doped alloys: Ab initio study / Jiménez M. J., Komlev A. S., Gimaev R. R., **Zverev V. I.**, Cabeza G. F. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2021. T. 538. C. 168258. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2021.168258>. IF = 2.993
  14. Komlev A. S. / The influence of chemical impurities on the properties of heavy rare-earth metals (Tb, Dy, Ho): Experimental and theoretical approaches / Komlev A. S., Gimaev R. R., Davydov A. S., **Zverev V. I.** // Materialia. 2021. T. 18. C. 101166. <https://doi.org/10.1016/j.mtla.2021.101166>. IF отсутствует
  15. Komlev A. S. / Ferromagnetic phase nucleation and its growth evolution in FeRh thin films / Komlev A. S., Karpenkov D. Y., Kiselev D. A., Ilina T. S., Chirkova A., Gimaev R. R., Usami T., Taniyama T., **Zverev V. I.**, Perov N. S. // Journal of Alloys and Compounds. 2021. T. 874. C. 159924. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.159924>. IF = 5.316
  16. Komlev A. S., Gimaev R. R., **Zverev V. I.** Smart magnetocaloric coatings for implants: Controlled drug release for targeted delivery // Physics Open. 2021. T. 7. C. 100063. <https://doi.org/10.1016/j.physo.2021.100063>. IF отсутствует
  17. Pimentel B. / Threshold heating temperature for magnetic hyperthermia: Controlling the heat exchange with the blocking temperature of magnetic nanoparticles / Pimentel B., Caraballo-Vivas R.J., Checca N.R., **Zverev V.I.**, Salakhova R.T., Makarova L.A., Pyatakov A.P., Perov N.S., Tishin

- A.M., Shtil A.A., Rossi A.L., Reis M.S. // *Journal of Solid-State Chemistry*. 2018. T. 260. C. 34. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2018.01.001>. IF = 3.498
18. Salakhova R. T. / Frequency dependence of magnetothermal properties for magnetic fluid and magnetically functionalized implants / Salakhova R.T., Vylegzhanin A.G., Kashtanov E.A., **Zverev V.I.**, Müller R., de Sena Pereira F.D., Parfenov V.A., Mironov V.A., Kritskaya E.A., Pyatakov A.P., Markov V.K., Malyshev A.Yu., Kamilov K.I., Tishin A.M. // *EPJ Web Conf*. 2018. T. 185. C. 09003. <https://doi.org/10.1051/epjconf/201818509003>. IF = 0.395
  19. Salakhova R. T. / The frequency dependence of magnetic heating for  $\text{La}_{0.75}\text{Sr}_{0.25}\text{MnO}_3$  nanoparticles / Salakhova R.T., Pyatakov A.P., **Zverev V.I.**, Pimentel B., Caraballo Vivas R.J., Makarova L.A., Perov N.S., Tishin A.M., Shtil A.A., Reis M.S. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2019. T. 470. C. 38. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2017.11.126>. IF = 2.993
  20. Sánchez-Valdés C. F. / The effect of cooling rate on magnetothermal properties of  $\text{Fe}_{49}\text{Rh}_{51}$  / Sánchez-Valdés C.F., Gimaev R.R., López-Cruz M., Sánchez Llamazares J.L., **Zverev V.I.**, Tishin A.M., Carvalho A.M.G, Aguiar D.J.M, Mudryk Y., Pecharsky V.K. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2020. T. 498. C. 166130. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.166130>. IF = 2.993
  21. Tishin A. M. / A review and new perspectives for the magnetocaloric effect: New materials and local heating and cooling inside the human body / Tishin A.M., Spichkin Y.I., **Zverev V.I.**, Egolf P.W. // *International Journal of Refrigeration*. 2016. T. 68. C. 177. <https://doi.org/10.1016/j.ijrefrig.2016.04.020>. IF = 3.629
  22. Tishin A. M. / Developing Antitumor Magnetic Hyperthermia: Principles, Materials and Devices / Tishin A., Shtil A.A., Pyatakov A.P., **Zverev V.I.** // *Recent Patents on Anti-Cancer Drug Discovery*. 2016. T. 11. № 4. C. 360. <https://doi.org/10.2174/0929866523666160720094638>. IF = 4.169
  23. Usman I. T. M. / Evidence for spin mixing in holmium thin film and crystal samples / Usman I.T.M, Yates K.A., Moore J.D., Morrison K., Pecharsky V.K., Gschneidner K.A., Verhagen T., Aarts J., **Zverev V.I.**, Robinson J.W.A, Witt J.D.S, Blamire M.G., Cohen L.F. // *Phys. Rev. B*. 2011. T. 83. № 14. C. 144518. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.144518>. IF = 4.036
  24. Valiev E. / Application of the exchange-striction model for the calculation of the FeRh alloys magnetic properties / Valiev E., **Zverev V.**, Kamilov K., Pyatakov A., Kovalev B., Tishin A. // *Intermetallics*. 2019. T. 108. C. 81. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2019.02.015>. IF = 3.758
  25. Zarkevich N. A., **Zverev V. I.** Viable Materials with a Giant Magnetocaloric Effect // *Crystals*. 2020. T. 10. № 9. C. 815. <https://doi.org/10.3390/cryst10090815>. IF = 2.589
  26. Zhang H. / Review on the materials and devices for magnetic refrigeration in the temperature range of nitrogen and hydrogen liquefaction / Zhang H., Gimaev R., Kovalev B., Kamilov K., **Zverev V.**, Tishin A. // *Physica B: Condensed Matter*. 2019. T. 558. C. 65. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2019.01.035>. IF = 2.436
  27. Zverev V. I. / The role of demagnetization factor in determining the ‘true’ value of the Curie temperature / **Zverev V.I.**, Gimaev R.R., Tishin A.M., Mudryk Ya, Gschneidner Jr K.A., Pecharsky V.K. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2011. T. 323. № 20. C. 2453. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2011.05.012>. IF = 2.993
  28. Zverev V. I. / Magnetic and magnetothermal properties and the magnetic phase diagram of high purity single crystalline terbium along the easy magnetization direction / **Zverev V.I.**, Tishin

- A.M., Chernyshov A.S., Mudryk Ya., Gschneidner K.A. Jr., Pecharsky V. K. // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2014. T. 26. № 6. C. 066001. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/26/6/066001>. IF = 2.333
29. Zverev V. I. / Magnetic and magnetothermal properties, and the magnetic phase diagram of single-crystal holmium along the easy magnetization direction / **Zverev V.I.**, Tishin A.M., Zou Min, Mudryk Ya., Gschneidner K.A. Jr., Pecharsky V. K. // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2015. T. 27. № 14. C. 146002. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/27/14/146002>. IF = 2.333
  30. Zverev V. I. / Influence of structural defects on the magnetocaloric effect in the vicinity of the first order magnetic transition in Fe<sub>50.4</sub>Rh<sub>49.6</sub>/ **Zverev V.I.**, Saletsky A.M., Gimaev R.R., Tishin A.M., Miyanaga T., Staunton J.B. // *Applied Physics Letters*. 2016. T. 108. № 19. C. 192405. <https://doi.org/10.1063/1.4949355>. IF = 3.791
  31. Zverev V. I. / Novel applications of magnetic materials and technologies for medicine / **Zverev V.I.**, Pyatakov A.P., Shtil A.A., Tishin A.M. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2018. T. 459. C. 182. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2017.11.032>. IF = 2.993
  32. Zverev V. I. / Peculiarities of the phase transformation dynamics in bulk FeRh based alloys from magnetic and structural measurements / **Zverev V. I.**, Gimaev R. R., Miyanaga T., Vaulin A. A., Gubkin A. F., Kovalev B. B., dos Santos A. M., Lovell E., Cohen L. F., Zarkevich N. A. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2021. T. 522. C. 167560. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2020.167560>. IF = 2.993
  33. Zverev V. I. / Magnetic properties of dysprosium – Experiment and modeling / **Zverev V. I.**, Gimaev R. R., Komlev A. S., Kovalev B. B., Queiroz F.G., Mello V.D. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2021. T. 524. C. 167593. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2020.167593>. IF = 2.993
  34. **Zverev V. I.**, Gimaev R. R. Explanation of relatively high values of the magnetic entropy change in single crystalline terbium // *Physica B: Condensed Matter*. 2016. T. 502. C. 187. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2016.09.005>. IF = 2.436
  35. **Zverev V. I.**, Tishin A. M., Kuz'min M. D. The maximum possible magnetocaloric  $\Delta T$  effect // *Journal of Applied Physics*. 2010. T. 107. № 4. C. 043907. <https://doi.org/10.1063/1.3309769>. IF = 2.546

## Магнитные фазовые диаграммы и индуцированный ориентационными переходами магнитодиэлектрический эффект в монокристаллах чистого и Mn-замещенного $\text{Pb}_2\text{Fe}_2\text{Ge}_2\text{O}_9$

А.Панкрац, М.Колков, А.Балаев, А.Фрейдман, А.Васильев, Д.Балаев

Институт физики им. Л.В.Киренского, Федеральный исследовательский центр КНЦ СО РАН, Красноярск

Ромбические антиферромагнитные кристаллы семейства  $\text{Pb}_2\text{M}_2\text{X}_2\text{O}_9$  ( $\text{M}=\text{Fe}$ ,  $\text{Mn}$  и  $\text{X}=\text{Ge}$ ,  $\text{Si}$ ) являются ярким примером соединений, содержащих стереохимические ионы типа  $\text{Pb}^{2+}$  или  $\text{Bi}^{3+}$ . Такие ионы содержат изолированные пары  $6s^2$  валентных электронов и могут приводить к механизмам связи между магнитными и зарядовыми степенями свободы.

С использованием модифицированной раствор-расплавной технологии выращены монокристаллы  $\text{Pb}_2\text{Fe}_2\text{Ge}_2\text{O}_9$  и  $\text{Pb}_2\text{Fe}_{1.6}\text{Mn}_{0.4}\text{Ge}_2\text{O}_9$  и исследованы их температурные и полевые зависимости намагниченности, магнитные фазовые диаграммы и магнитодиэлектрические свойства.

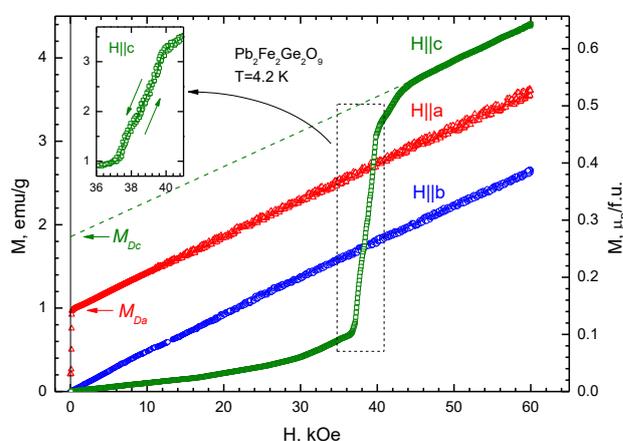


Рис. 1. Полевые зависимости намагниченности монокристалла  $\text{Pb}_2\text{Fe}_2\text{Ge}_2\text{O}_9$  для трех ромбических осей,  $T = 4,2$  К.

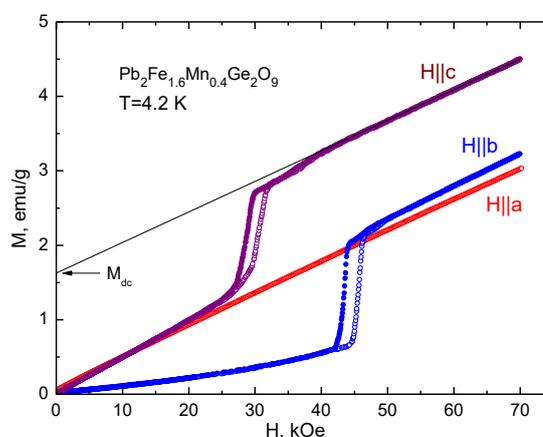


Рис. 2. Полевые зависимости намагниченности монокристалла  $\text{Pb}_2\text{Fe}_{1.6}\text{Mn}_{0.4}\text{Ge}_2\text{O}_9$  для трех ромбических осей,  $T = 4,2$  К.

Частичное замещение ионов  $\text{Fe}^{3+}$  сильноанизотропными ионами  $\text{Mn}^{3+}$  привело к кардинальным изменениям магнитной структуры кристалла. На рис. 1 показаны полевые зависимости намагниченности монокристалла  $\text{Pb}_2\text{Fe}_2\text{Ge}_2\text{O}_9$ , измеренные при  $T=4.2$  К вдоль трех ромбических осей [1]. Приведенные зависимости позволяют сделать вывод о том, что кристалл является антиферромагнетиком с осью анизотропии, совпадающей с ромбической осью  $c$ , и слабым скосом подрешеток в направлении оси  $a$ . Симметричный анализ [2] допускает в термодинамическом потенциале существование инвариантов  $m_x l_z$  и  $m_z l_x$ , в соответствии с этим в спин-флоп состоянии в направлении оси  $c$  появляется слабоферромагнитный момент  $M_{Dc}$ , который почти вдвое превосходит момент  $M_{Da}$ , возникающий в направлении оси  $a$ . Такое различие слабоферромагнитных моментов позволяет предположить, что слабый ферромагнетизм в этом соединении обусловлен вкладами, как минимум, двух механизмов: одноионной магнитной анизотропии и взаимодействия Дзялошинского [1, 3].

Частичное замещение ионами  $\text{Mn}^{3+}$  привело к тому, что форма полевых зависимостей намагниченности существенно изменилась [2]. В допированном кристалле слабый ферромагнетизм в основном состоянии отсутствует, а при намагничивании вдоль ромбических осей  $b$  и  $c$  обнаружены скачки намагниченности с гистерезисом по магнитному полю, свидетельствующие о существовании в обоих направлениях ориентационных переходов

первого рода. Кроме того, температура Нееля уменьшилась в результате допирования до  $T_N = 39,9$  К по сравнению с 45,2 К в чистом кристалле.

Для объяснения природы обнаруженных переходов полевые зависимости проанализированы с использованием термодинамического потенциала, записанного с учетом симметрии кристалла. Показано, что локальная ось анизотропии ионов  $Mn^{3+}$ , по-видимому, близка к направлению ромбической оси  $b$ , поэтому в результате конкуренции анизотропных вкладов ионов железа и доминирующего вклада ионов марганца, обладающих сильной магнитной анизотропией, в кристалле устанавливается антиферромагнитная структура с осью анизотропии, совпадающей с осью  $b$ . В этом состоянии слабый ферромагнетизм невозможен, а ориентационный переход, наблюдаемый при намагничивании вдоль оси  $b$ , является обычным спин-флоп переходом.

Скачок намагниченности, обнаруженный при намагничивании вдоль ромбической оси  $c$ , имеет другую природу. Мы предполагаем, что в этом случае при достижении критического поля происходит поворот вектора антиферромагнетизма от оси  $b$  к оси  $a$ . В новом состоянии в магнитных полях выше критического поля появляется скос подрешеток, обусловленный инвариантом  $m_z l_x$ . Таким образом, скачок намагниченности при ориентационном переходе в этом направлении обусловлен появлением в индуцированном поле состоянии слабоферромагнитного момента  $M_{DC}$ .

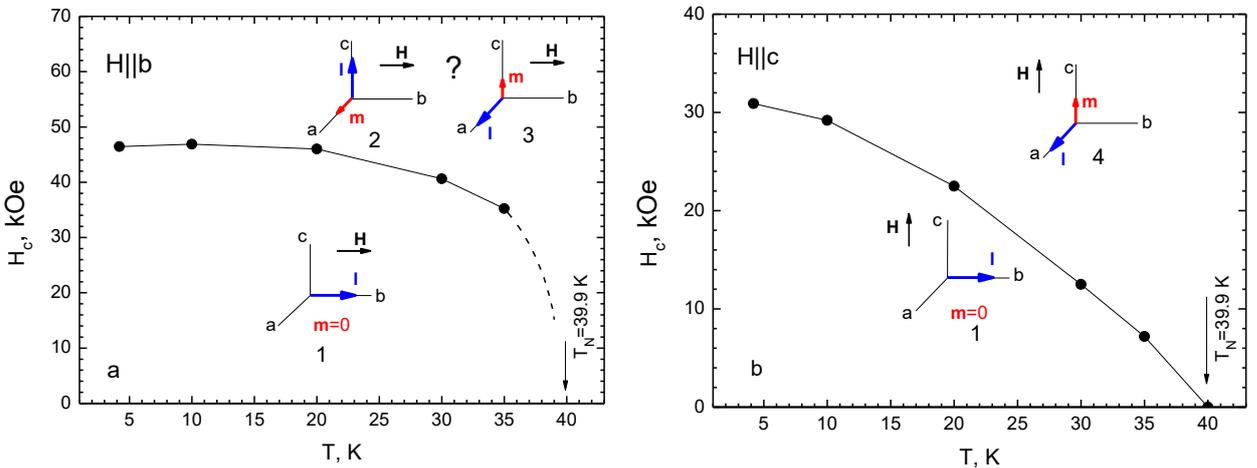


Рис. 3. Магнитные фазовые диаграммы монокристалла  $Pb_2Fe_{1.6}Mn_{0.4}Ge_2O_9$  для ориентаций магнитного поля  $H||b$  (а) и  $H||c$  (б).

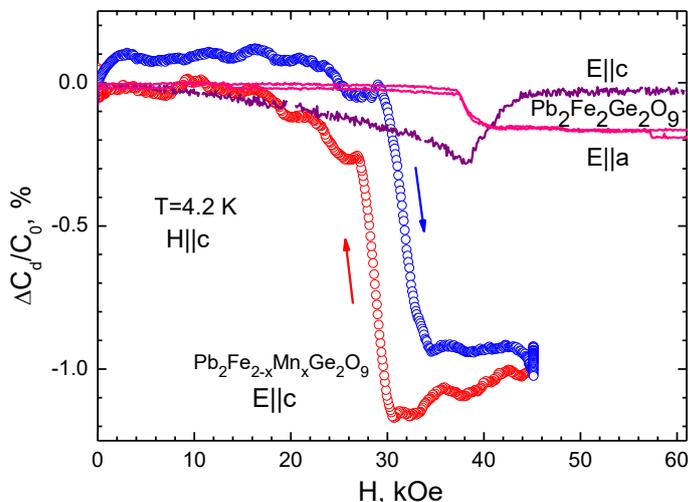


Рис. 4. Полевые зависимости магнитоэлектрического отклика в кристаллах  $Pb_2Fe_2Ge_2O_9$  и  $Pb_2Fe_{1.6}Mn_{0.4}Ge_2O_9$ ,  $T = 4,2$  К.

Семейства полевых зависимостей намагниченности  $Pb_2Fe_{1.6}Mn_{0.4}Ge_2O_9$  для направлений поля  $H||b$  и  $H||c$  измерены в интервале температур от 4,2 до  $T_N$ . Построены магнитные фазовые диаграммы Mn-замещенного кристалла для двух ориентаций магнитного поля (Рис. 3а и 3б).

Еще одно следствие допирования сильноанизотропным ионом  $Mn^{3+}$  заключается в том, что в Mn-замещенном кристалле наблюдается магнитоэлектрический отклик при ориентационном переходе в поле  $H||c$  в три раза

сильнее, чем в чистом  $\text{Pb}_2\text{Fe}_2\text{Ge}_2\text{O}_9$  (Рис. 4).

### Литература:

1. A.I. Pankrats, D.A. Balaev, S.E. Nikitin, A.L. Freydmann, A.A. Krasikov, A.D. Balaev, S.I. Popkov, M.I. Kolkov, Magnetic and thermodynamic properties and spin-flop-driven magnetodielectric response of the antiferromagnetic  $\text{Pb}_2\text{Fe}_2\text{Ge}_2\text{O}_9$  single crystals, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 479 (2019) 114–120.
2. A. Pankrats, M. Kolkov, A. Balaev, A. Freidman, A. Vasiliev, D. Balaev, Comparative study of the magnetic phase diagrams and spin-flop-driven magnetodielectric responses of the pure and  $\text{Mn}^{3+}$ -doped  $\text{Pb}_2\text{Fe}_2\text{Ge}_2\text{O}_9$  single crystals, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 534 (2021) 168023.
3. S.N. Martynov, Single-ion mechanism of weak ferromagnetism and a spin-flop transition in one- and two-position antiferromagnets, *JETP Lett.* 108 (2018) 196.

**Исследование фазовых превращений в сплавах Гейслера Ni-Mn-In методом просвечивающей электронной микроскопии**

Д.Д. Кузнецов<sup>1</sup>, Е.И. Кузнецова<sup>2</sup>, А.В. Маширов<sup>1</sup>, А.С. Лошаченко<sup>3</sup>, Д.В. Данилов<sup>3</sup>, Г.А. Шандрюк<sup>4</sup>, В.Г. Шавров<sup>1</sup>, В.В. Коледов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

<sup>3</sup>*МРЦ по направлению «Нанотехнологии», Научный парк, Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия*

<sup>4</sup>*Институт нефтехимического синтеза имени А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия*

В работе представлены исследования метамагнитоструктурного превращения мартенситного типа в сплаве  $Ni_{46}Mn_{41}In_{13}$  с магнитной памятью формы и обратным магнитокалорическим эффектом. Характерные температуры начала и конца прямого и обратного превращения определялись методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК). Характерные особенности превращения и предмартенситные состояния изучались методом просвечивающей электронной микроскопии. Проведена оценка толщины материала, при которой блокируется мартенситное превращение.

Сплавы на основе системы Ni-Mn-In являются классом материалов, проявляющих эффект магнитной памяти формы, сопровождающий мартенситное превращение из кубической фазы (аустенит) в низкосимметричную фазу (мартенсит). Несмотря на интенсивные исследования, механизм мартенситного превращения в этой системе остается до конца не ясным. В сплавах, способных испытывать мартенситное превращение наблюдаются, так называемые, предпереходные явления, в которых метастабильная предмартенситная фаза рассматривается как предшественник термодинамически стабильной мартенситной фазы. При этом материал демонстрирует аномалию упругих, тепловых, электрических и магнитных свойств. Эти аномалии напрямую связаны с эволюцией предмартенситной структуры, которая может рассматриваться как зарождающаяся мартенситная фаза или, как фактически независимая фаза перед мартенситным превращением, о чем свидетельствуют исследования сплавов на основе Ti-Ni [1]. В последние годы сплавы Гейслера систем Ni-Mn-Z ( $Z = Ga, In, Sn$ ) привлекают большой интерес исследователей, как ферромагнитные сплавы с эффектом памяти формы (ЭПФ) вследствие уникальных физических свойств и их потенциального применения для создания магнитных актюаторов, спинтронных устройств и твердотельных магнитных охлаждающих систем [2-8].

Кристаллическая структура образца исследовалась в температурном диапазоне 100...340 К при помощи просвечивающего электронного микроскопа (ПЭМ) Carl Zeiss Libra 200FE (ускоряющее напряжение 200 kV) с энергетическим ОМЕГА фильтром, энергодисперсионным детектором рентгеновских излучений Oxford Instruments X-Max 80 и с двухосевым криоаналитическим держателем Gatan Model 636 с контроллером температуры Model 900 SmartSet cold stage controller.

Электронно-микроскопические исследования проводились на фольгах, полученных стандартными методами в режимах светло- и темнопольного получения изображений. Для идентификации локальных фаз использовался метод микродифракции. Для прямого определения толщины фольги, после проведения микроскопических исследований, в изучаемом месте был произведён срез с помощью сфокусированного ионного пучка Ga на дуолучевой рабочей станции Carl Zeiss Auriga Laser.

Электронно-микроскопические исследования и подготовка фольг для ПЭМ были выполнены в Междисциплинарном Ресурсном Центре по направлению «Нанотехнологии», СПбГУ, г. Санкт-Петербург.

Данные полевых зависимостей намагниченности показывают, что чувствительность материала к магнитному полю составила  $K_{Ms}=7$  К/Т (рис. 2), то есть прикладываемые внешние магнитные поля смещают температуру метамгнитоструктурного превращения на 7 К в сторону низких температур.

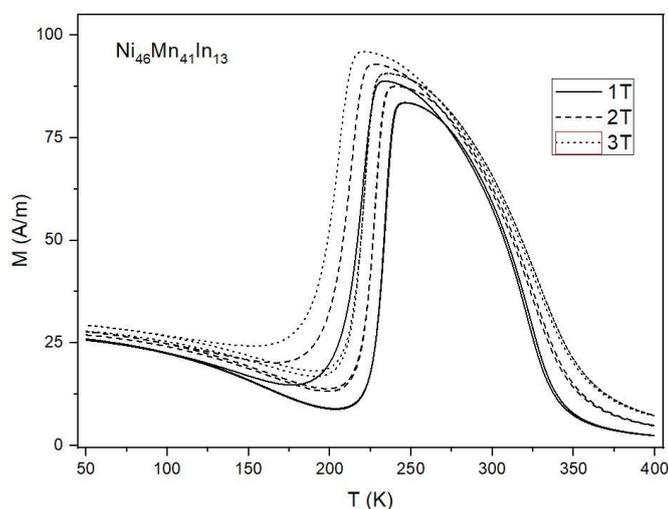


Рис. 2. Зависимость намагниченности ( $M$  (А/м)) образца от температуры ( $T$  (К)).

Была выявлена зависимость температуры начала метамгнитоструктурного превращения мартенситного типа от толщины образца в виде клинообразной фольги. Обнаружено, что мартенситная фаза при прямом мартенситном превращении, в тонких областях фольги с толщиной менее 150 нм, начинает появляться при  $M_s=215$  К (то есть при температурах ниже, чем в объёмном материале) после первого цикла охлаждения-нагрев-охлаждение, после второго цикла  $M_s=210$  К и после третьего  $M_s=208$  К, вероятно, это связано с накоплением дефектов и/или окислением материала, это явление требует отдельного исследования. Дальнейшее снижение температуры для каждого из циклов, приводит к увеличению доли мартенсита, однако, превращение блокируется на расстоянии примерно 600 нм от края образца при толщине пластины менее 50 нм, таким образом образование мартенситной структуры здесь не наблюдается даже при температуре жидкого азота (рис. 3).

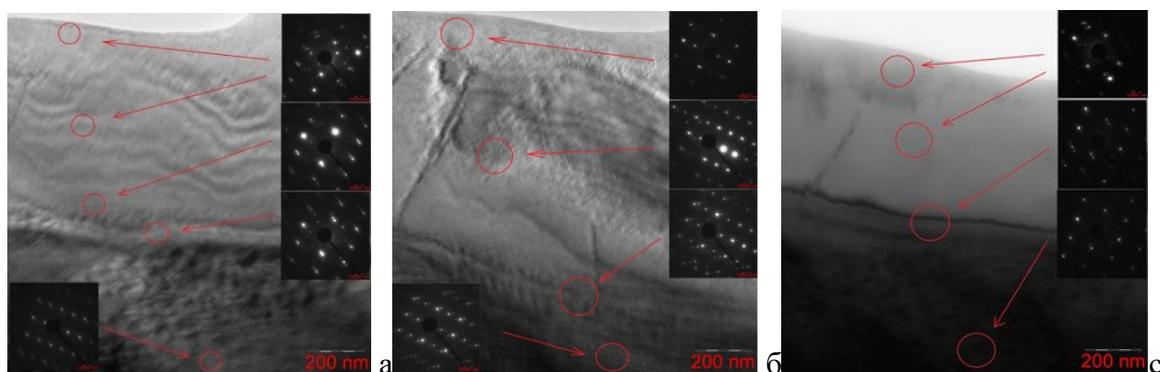


Рис. 3. Светлопольные изображения и дифракционные картины выделенных участков сплава  $Ni_{46}Mn_{41}In_{13}$  при температуре 215 К (а), 208 К (б), 100 К (с).

Так как наблюдаемые явления имеют определённые перспективы из-за потенциального применения исследуемого сплава в наномасштабных устройствах и системах магнитного

охлаждения, исследование особенностей мартенситного превращения в тонкой клиновидной фольге представляется крайне интересным. Влияние «размерных эффектов» на основные параметры, характеризующие мартенситное превращение, такие как  $M_s$ , рассматривают, в основном, с позиции наличия энергетических барьеров, связанных с энергией границ раздела аустенит – мартенсит и мартенсит – мартенсит, которые замедляют или даже полностью блокируют превращение [9]. Кроме того, закономерности перестройки при мартенситном превращении вытекают из ориентационных соотношений между атомно-кристаллическими решетками аустенитной и мартенситной фаз и их микроструктурных особенностей. Учитывая, что структура нестехиометрических сплавов на основе соединения Ni-Mn-In менее изучена, чем структура стехиометрического соединения, подробно рассмотрим эволюцию тонкой структуры сплава  $Ni_{46}Mn_{41}In_{13}$ .

Полученные результаты демонстрируют, что фазовое превращение в сплаве  $Ni_{46}Mn_{41}In_{13}$  происходит неравномерно по всему образцу, о чем свидетельствует разнообразие наблюдаемых структур (черно-белый контраст, твид, ламельная структура). Ниже  $M_s$  кубическая  $L2_1$  фаза превращается в модулированные мартенситные варианты с остаточным аустенитом. Дальнейшее снижение температуры приводит к увеличению доли мартенситной фазы, однако, обнаружено, что мартенситное превращение полностью подавляется при толщине пластины менее 50 nm.

Температуры прямого и обратного мартенситного превращения зависят не только от величины магнитного поля, но и от размеров и конфигурации образца. Уменьшение толщины пластины и магнитные поля приводят к снижению температуры прямого мартенситного превращения, расширяя область существования ферромагнитного аустенита.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда (проект № 20-79-10197).

### Литература:

1. Yu.S. Koshkid'ko, E.T. Dilmieva, J. Cwik, K. Rogacki, D. Kowalska, A.P. Kamantsev, V.V. Koledov, A.V. Mashirov, V.G. Shavrov, V.I. Valkov, A.V. Golovchan, A.P. Sivachenko, S.N. Shevyrtalov, V.V. Rodionova, I.V. Shchetinin, V. Sampath. *Journal of Alloys and Compounds*. **798**, 810 (2019).
2. А.П. Каманцев, В.В. Коледов, А.В. Маширов, Э.Т. Дильмиева, В.Г. Шавров, Я. Цвик, И.С. Терешина, М.В. Лянге, В.В. Ховайло, Дж. Поркари, М. Топич. *Известия РАН. Серия Физическая*, **79**, 9, 1230 (2015).
3. Н.И. Коуров, А.В. Королев, В.Г. Пушин, В.В. Коледов, В.Г. Шавров, В.В. Ховайло. *Физика Металлов и Металловедение*. **99**, 4, 38 (2005).
4. В.Г. Пушин, Н.И. Коуров, А.В. Королев, В.А. Казанцев, Л.И. Юрченко, В.В. Коледов, В.Г. Шавров, В.В. Ховайло. *Физика Металлов и Металловедение*. **99**, 4, 64 (2005).
5. E. Kalimullina, A. Kamantsev, V. Koledov, V. Shavrov, V. Nizhankovskii, A. Irzhak, F. Albertini, S. Fabbri, P. Ranzieri, P. Ari-Gur. *PHYSICA STATUS SOLIDI C: CURRENT TOPICS IN SOLID STATE PHYSICS*. **11**, 5-6, 1023 (2014).
6. A.P. Kamantsev, V.V. Koledov, A.V. Mashirov, E.T. Dilmieva, V.G. Shavrov, J. Cwik, A.S. Los, V.I. Nizhankovskii, K. Rogacki, I.S. Tereshina, Y.S. Koshkid'ko, M.V. Lyange, V.V. Khovaylo, P. Ari-Gur. *JOURNAL OF APPLIED PHYSICS*. **117**, 16, 163903 (2015).
7. J. Liu, Z. Liu, X. Jin. *Philosophical Magazine*. **94**, 1, 56 (2014).
8. S.B. Madiligama, P. Ari-Gur, V.G. Shavrov, V.V. Koledov, S. Calder, A.V. Mashirov, A.P. Kamantsev, E.T. Dilmieva, L. Gonzalez-Legarreta, B.H. Grande, V.V. Vega, A. Kayani. *Smart Materials and Structures*. **8**, 085013 (2016).
9. T. Waitz, T. Antretter, F.D. Fischer, N.K. Simha. *J. Mech. Phys. Solids*. **55**, 419 (2007).

**Новый теоретический метод изучения спиновой динамики в магнетиках со спином  $1/2$** 

А.В. Сыромятников

*ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»*

В современной теории сильно коррелированных систем множество коллективных явлений описывается в терминах элементарных возбуждений (квазичастиц). Поэтому поиск и характеристика элементарных возбуждений имеет принципиальное значение. Поскольку полюсы функций Грина определяются спектрами элементарных возбуждений, квазичастицы дают пики в динамических корреляторах, которые можно наблюдать экспериментально и численно. Однако некоторые пики могут быть размыты из-за их малых спектральных весов (малых вычетов соответствующих полюсов), недостаточного экспериментального разрешения, эффектов конечного размера (в численных исследованиях) и/или конечного затухания квазичастиц. Кроме того, некоторые аномалии наблюдаемых величин могут иметь не одночастичный характер, а быть обусловленными континуумом возбуждений. Поэтому интерпретация численных и экспериментальных данных в значительной степени основывается на выводах существующих аналитических подходов, оперирующих подходящими квазичастицами.

Можно сказать, что на сегодняшний день свойства длинноволновых элементарных возбуждений (магнонов) в упорядоченных фазах квантовых спиновых систем хорошо изучены. Однако в последнее время появляется все больше экспериментальных и численных свидетельств того, что в (квази-)двумерных коллинеарных и неколлинеарных квантовых системах стандартные аналитические методы даже качественно не описывают коротковолновые спиновые возбуждения.

Например, весьма экзотическая картина была обнаружена численно в антиферромагнетике Гейзенберга (АФГ) со спином  $S=1/2$  на квадратной решетке в сильном магнитном поле: недалеко от поля насыщения в динамических спиновых корреляторах появляется большое количество пиков при заданном импульсе (вместо одного магнонного пика). В серии недавних экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов, проведенных сразу тремя группами в  $Va_3CoSb_2O_9$ , была продемонстрирована полная неспособность стандартных теоретических подходов к описанию коротковолновых спиновых возбуждений в АФГ со спином  $1/2$  на треугольной решетке. В частности, в сечении рассеяния на границе зоны Бриллюэна (ЗБ) можно выделить как минимум четыре пика, тогда как, например, спин-волновая теория предсказывает только два магнонных пика и высокоэнергетический континуум возбуждений.

Чтобы устранить этот пробел в теории, мы недавно предложили и апробировали на ряде систем новый метод, основанный на кластерном представлении спиновых операторов  $1/2$  через бозе-операторы [1,2,3,4]. Этот подход очень близок по духу к стандартной спин-волновой теории, основанной на представлении Голдстейна-Примакова, но он точнее учитывает коротковолновые спиновые корреляции и дает возможность наряду с магнонами довольно просто изучать и высокоэнергетические возбуждения, возникающие в стандартной спин-волновой теории, как связанные состояния нескольких магнонов.

В основе метода лежит идея расширения элементарной ячейки с тем, чтобы учесть все спиновые степени свободы в ней. Предлагаемое кластерное спиновое представление содержит не один бозе-оператор, как хорошо известное представление Голдстейна-Примакова для одного спина, а несколько бозе-операторов, каждый из которых рождает или уничтожает одно из квантовых состояний всей ячейки. В работе [1] подробно описана общая процедура построения спинового представления, которая может быть применена для произвольного

числа спинов в ячейке. Подчеркнем, что такое представление воспроизводит коммутационную алгебру всех спиновых операторов в ячейке.

Кроме того, оно содержит формальный параметр  $n$ , максимальное количество бозонов, которое может находиться в одной ячейке. Этот параметр играет в кластерном представлении ту же роль, что и величина спина  $S$  в представлении Голдстейна-Примакова: все наблюдаемые величины можно представить в виде рядов по  $1/n$ , которые находятся при помощи стандартной диаграммной техники. Конечно, ценность такого подхода может показаться сомнительной, поскольку физические результаты соответствуют случаю  $n=1$  (впрочем, ценность спин-волновой теории, оперирующей рядами по  $1/S$  при  $S \sim 1$ , из этих же соображений также должна быть невелика). Однако сравнение результатов, полученных нашим методом, с многочисленными результатами численных расчетов, проведенных ранее в простых моделях, показало, что ряды для наблюдаемых по  $1/n$  удивительно быстро сходятся: зачастую уже первых членов ряда по  $1/n$  достаточно для получения **количественного** согласия с численными результатами.

В нашей работе [3] новым методом были воспроизведены многочисленные аномалии в динамических спиновых корреляторах в АФГ со спином  $1/2$  на квадратной решетке в сильном поле, найденные ранее в работах [5,6] численно (см. Рис. 1). Мы обнаружили весьма редкое явление: квантовые флуктуации в системе столь сильны, что эти аномалии соответствуют полюсам функций Грина, которые не имеют аналогов в квазиклассической спин-волновой теории (учет собственно энергетических частей в нашем новом подходе приводит к возникновению новых полюсов). То есть, в системе присутствуют многочисленные коротковолновые спиновые возбуждения (магноны), которые не имеют ничего общего с магнонами в спин-волновой теории.

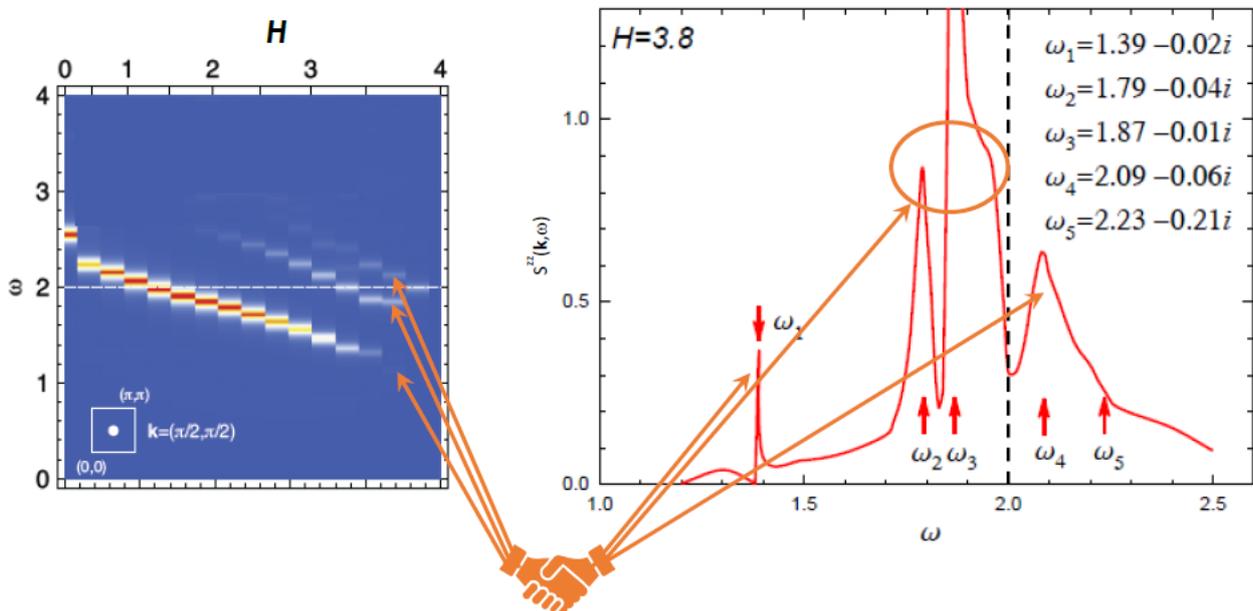


Рис. 1 Слева показан график плотности мнимой части продольного динамического спинового коррелятора, найденный численно в работе [5] для импульса  $\mathbf{k}=(\pi/2,\pi/2)$  в АФГ со спином  $1/2$  на квадратной решетке в магнитном поле  $H$ . Справа – та же величина для  $H=3.8$  (константа обмена  $J=1$ ), полученная предлагаемым нами методом. Демонстрируется появление новых полюсов  $\omega_{1,2,4,5}$  в спиновых корреляционных функциях, соответствующих новым квазичастицам, которые не имеют аналогов в спин-волновой теории.

В работе [4] мы использовали трех-спиновый вариант предложенного в [1] кластерного спинового представления (для трех спинов в магнитной элементарной ячейке) для изучения АФГ на треугольной решетке. В теории при этом возникает семь бозе-операторов, три из которых отвечают обычным магнонам. Наши вычисления успешно воспроизвели

стодвадцатиградусную структуру, которую образуют магнитные моменты, а намагниченность трех магнитных подрешеток, найденная в первом порядке по  $1/n$ , находится в прекрасном согласии с предыдущими численными результатами. Наши вычисления динамических спиновых корреляторов показали, что квантовые флуктуации снимают вырождение спектра магнонов вдоль некоторых направлений в зоне Бриллюэна (это явление не возникает в спин-волновой теории даже в первом порядке по  $1/S$ ) и приводят к появлению новой квазичастицы. Эти выводы находятся в хорошем согласии с результатами недавних нейтронных исследований (см. Рис. 2).

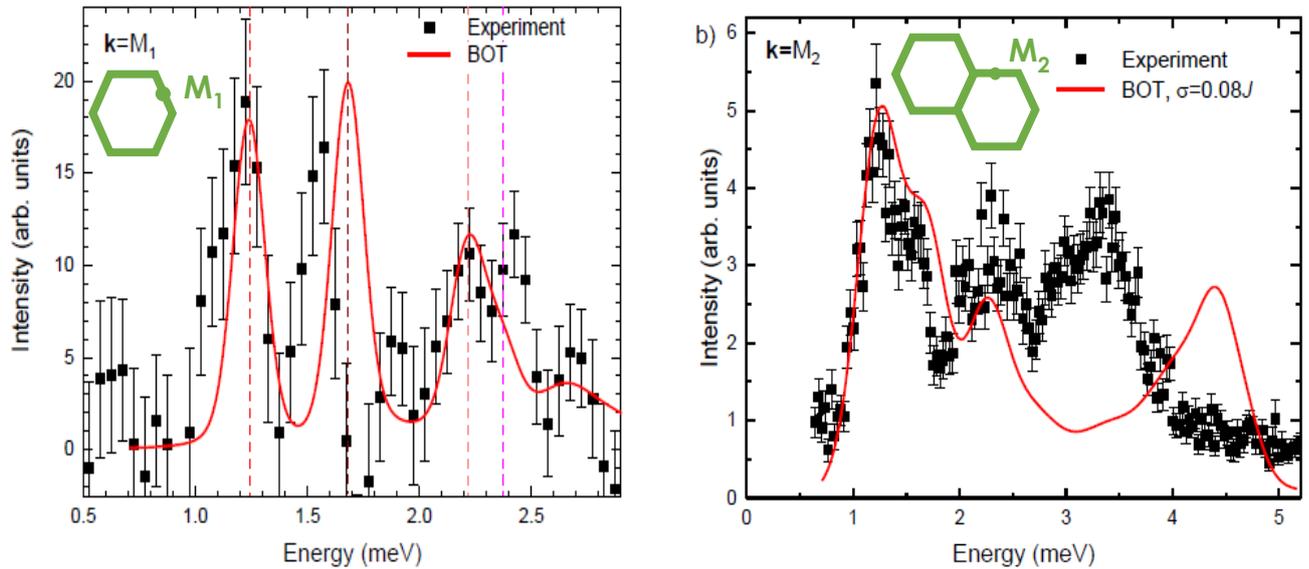


Рис. 2 Нейтронные данные, полученные в  $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$  в точках  $M$  на границе зоны Бриллюэна в работах [7] (слева) и, с меньшим разрешением, но в большем диапазоне по энергии, [8] (справа). Это соединение хорошо описывается моделью АФГ со спином  $1/2$  на треугольной решетке. Спин-волновая теория не может объяснить эти экспериментальные результаты даже качественно. Напротив, предложенный нами подход хорошо описывает эти эксперименты (красная линия на графиках): можно считать, что согласие количественное при  $\omega < 2.8$  meV и качественное при больших  $\omega$ .

### Литература:

1. A.V. Syromyatnikov, "Collective excitations in spin-1/2 magnets through bond-operator formalism designed both for paramagnetic and ordered phases", *Phys. Rev. B* **98**, 184421 (2018).
2. A.V. Syromyatnikov and A.Yu. Aktersky, "Elementary excitations in the ordered phase of spin-1/2  $J_1$ - $J_2$  model on square lattice", *Phys. Rev. B* **99**, 224402 (2019).
3. A.V. Syromyatnikov, "Multiple magnon modes in spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on simple square lattice in strong magnetic field", *Phys. Rev. B* **102**, 014409 (2020).
4. A.V. Syromyatnikov, "Novel elementary excitations in spin-1/2 antiferromagnets on the triangular lattice", arXiv:2107.00256.
5. A. Lüscher and A.M. Läuchli, "Exact diagonalization study of the antiferromagnetic spin-1/2 Heisenberg model on the square lattice in a magnetic field", *Phys. Rev. B* **79**, 195102 (2009).
6. O. F. Syljuåsen, "Numerical evidence for unstable magnons at high fields in the Heisenberg antiferromagnet on the square lattice", *Phys. Rev. B* **78**, 180413(R) (2008).
7. J. Ma et al., "Static and Dynamical Properties of the Spin-1/2 Equilateral Triangular-Lattice Antiferromagnet  $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ ", *Phys. Rev. Lett.* **116**, 087201 (2016).
8. S. Ito, N. Kurita, H. Tanaka et al., "Structure of the magnetic excitations in the spin-1/2 triangular-lattice Heisenberg antiferromagnet  $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ ", *Nature Communications* **8**, 235 (2017).

## Нестандартные квазиаддитивные интегралы движения и барическая зависимость фононных заселенностей

Ф.С. Джебпаров

НИЦ «Курчатовский Институт» - ИТЭФ, Москва, Россия

Московский физико-технический институт (государственный университет),

Долгопрудный, МО

Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

Одним из следствий эквивалентности гиббсовых ансамблей для не малых систем является то, что для многих явлений, связанных с ангармонизмом решеточных колебаний, зависимость средних чисел заполнения (заселенностей)  $n_k = \langle c_k^+ c_k \rangle$  фононов в кристалле от внешнего давления  $P^{(ex)}$  проявляется только через зависимость от давления частот фононов  $\omega_k(P^{(ex)})$  [1,2], при этом

$$n_k = n_k^{(0)}(P^{(ex)}) = \left[ \exp(\beta \omega_k(P^{(ex)})) - 1 \right]^{-1}. \quad (1)$$

Здесь  $\beta = 1/T$  – обратная температура, а  $c_k^+$  и  $c_k$  операторы рождения и уничтожения фонона в состоянии с безразмерным номером  $k$ . Формула (5) составляет основу так называемого квазигармонического приближения [1], в области применимости которого колебания малы и могут рассматриваться как гармонические, а влияние ангармонизма решетки сводится к тому, что частоты фононов зависят от объема кристалла, который связан с давлением. Это приближение широко используется, например, для описания теплового расширения и теплопроводности кристаллов.

Прямое измерение зависимости  $n_k(P^{(ex)})$  было выполнено в работах [3,4] на основе сравнения интенсивностей стоксовой и антистоксовой компонент при комбинационном рассеянии света. Эти работы продолжили изучение [5] комбинационного рассеяния света в напряженных кристаллических пластинах кремния. Их результаты (достаточно убедительно статистически) описываются не формулой (1), а соотношением

$$n_k(P^{(ex)}) = \left\{ \exp \left[ \beta \left( \omega_k(P^{(ex)}) + \Delta_k(P^{(ex)}) \right) \right] - 1 \right\}^{-1}, \quad (2)$$

где  $\Delta_k(P^{(ex)}) = \omega_k(P^{(ex)}) - \omega_k(0)$ .

Измерения [3,4] выполнены при  $|\Delta_k(P^{(ex)})| \leq \omega_k(P^{(ex)})/15$  и при комнатной температуре. Эти условия вполне соответствуют области применимости квазигармонического приближения.

Результат (2) был получен высоко квалифицированным коллективом в одном из крупнейших физических центров. Тем не менее, он не привлек широкого внимания исследователей, по-видимому, потому, что не получил убедительного теоретического обоснования. Существующая статистическая физика ничего, кроме соотношения (1), для квазигармонических условий не предлагает, причем формула (1) получается как во всех канонических ансамблях Гиббса [6,7], так и в т.н. Р-Т-ансамбле [7].

Отметим, что реально измерения [3,4] было проведено в несколько более сложных условиях, чем изотропное растяжение или сжатие, но мы ограничимся здесь только этим случаем для выделения наиболее важной концептуальной части проблемы.

В общепринятой трактовке основными квазиаддитивными интегралами движения, на основе которых строятся распределения Гиббса для квазигармонических систем, являются упругая энергия и фононный гамильтониан. В данной работе показано, что к ним можно добавить новый квазиаддитивный интеграл движения, среднее значение от которого равно произведению давления на объем системы. После этого, в результате стандартного, например, для информационного подхода [7,8], построения равновесного распределения возникает новый статистический оператор. Он впервые приводит к иным фононным заселенностям для квазигармонических систем, чем канонические распределения Гиббса.

В новом ансамбле получается, что

$$n_k(P^{(ex)}) \approx \left\{ \exp \left[ \beta \left( \omega_k(P^{(ex)} = 0) \right) \right] - 1 \right\}^{-1}. \quad (3)$$

Наличие трех противоречивых результатов (1)-(3) указывает как на необходимость поиска путей прямых измерений зависимости фононных населенностей от давления, так и на желательность новых теоретических исследований по данной проблеме. Были бы чрезвычайно полезны и прямые измерения зависимости от давления магنونных заселенностей.

Более подробная информация о новом ансамбле и методе его построения содержится в [9,10].

#### Литература:

1. Дж. Рейсленд. Физика фононов. М.: МИР, 1975.
2. А.Г. Гуревич. Физика твердого тела. С-Петербург: ФТИ им А.Ф.Иоффе, 2004.
3. В.Г. Хамдамов. Исследование некоторых ангармонических эффектов в фононных системах кристаллов методом резонансного комбинационного рассеяния света. Автореферат дисс. на соискание уч. ст. канд. физ.-мат. наук. Ленинград, ФТИ им. А.Ф.Иоффе, 1985.
4. В.Г. Хамдамов, В.И. Веттегрень, И.И. Новак. Изв. АН Уз.ССР, сер. физ.-мат. наук, 1986, №1, с.50.
5. В.Г. Хамдамов, В.И. Веттегрень, И.И. Новак. ФТТ **26**, 322 (1984).
6. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. М.: Наука, 1976.
7. Д.Н. Зубарев. Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971
8. E.T. Jaynes. Phys. Rev. **106**, 620 (1957).
9. Ф.С.Джепаров. Нестандартные квазиаддитивные интегралы движения и барическая зависимость фононных заселенностей. Препринт ИГЭФ №4-20, М.: 2020.
10. F.Dzheparov. Pressure dependence of phonon populations and non-standard quasiadditive integrals of motion. Report at workshop "New Trends in Mathematical Physics", Steklov Mathematical Institute of Russian Academy of Science, 2020.

**Распространение звука вблизи фазового перехода в магнитоупорядоченную фазу в средах с тетрагональной кристаллической структурой**

В.В. Меньшенин

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

Слоистые соединения на основе Fe вызывают интерес, поскольку обладают необычными свойствами. В частности, в соединении FeGe<sub>2</sub> имеют место два магнитных фазовых перехода. Сначала с понижением температуры в несоизмеримую магнитную фазу, а затем в коллинеарную антиферромагнитную. Целью данного исследования являлась критическая динамика распространения продольной упругой волны вблизи фазового перехода в длиннопериодическую магнитную фазу в соединении FeGe<sub>2</sub> с кристаллической структурой, характеризуемой пространственной группой  $I4/mcm(D_{4h}^{18})$ . Волновой вектор возникающей после перехода несоизмеримой магнитной фазы равен  $\mathbf{k} = \left(\frac{2\pi\mu}{\zeta}, 0, 0\right)$ ,  $2\mu \neq 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Исследование этого фазового перехода можно провести на основе теоретико- группового подхода. Рассмотрим, например, переход в продольную спиновую волну. Этот переход происходит по полному неприводимому представлению (НП)  $D^{\tau_2}$  (в обозначениях НП в соответствии с [1]). Базисными функциями (БФ) этого представления являются

$$\psi_1^{\tau_2} = S_x \exp\left[\frac{i2\pi\mu x}{\zeta}\right], \psi_2^{\tau_2} = -S_x \exp\left[-\frac{i2\pi\mu x}{\zeta}\right], \psi_3^{\tau_2} = S_y \exp\left[\frac{i2\pi\mu y}{\zeta}\right], \psi_4^{\tau_2} = -S_y \exp\left[-\frac{i2\pi\mu y}{\zeta}\right].$$

Здесь  $S_i, (i = x, y)$  – аксиальные базисные орты. Описание перехода, проводится на основе эффективного гамильтониана, записанного исходя из инвариантов, построенных на этих БФ. Этот эффективный гамильтониан имеет вид

$$H_{eff}^{\tau_2} = \int d^d \mathbf{x} \left\{ \frac{r_1}{2} (S_x^2 + S_y^2) + \frac{g_{10}}{24} (S_x^4 + S_y^4) + \frac{g_{20}}{24} S_x^2 S_y^2 + \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\partial S_x}{\partial x_i} \right)^2 + \left( \frac{\partial S_y}{\partial x_i} \right)^2 \right] \right\},$$

где  $d = 4 - \varepsilon$  – размерность пространства,  $\varepsilon \ll 1$ . В этом случае имеется устойчивая неподвижная точка ренормгруппового преобразования и реализуется переход второго рода.

Обратимся теперь к критической динамике распространения продольных звуковых волн вблизи перехода из парамагнитной в несоизмеримую магнитную фазу. Рассмотрим распространение упругой волны вдоль направления [100] кристалла. В этой ситуации статическое действие системы, с учетом предыдущего равенства, записывается в виде [2]

$$S^{st} = - \int d^d \mathbf{x} \left\{ \frac{r_1}{2} (S_x^2 + S_y^2) + \frac{g_{10}}{24} (S_x^4 + S_y^4) + \frac{g_{20}}{24} S_x^2 S_y^2 + \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\partial S_x}{\partial x_i} \right)^2 + \left( \frac{\partial S_y}{\partial x_i} \right)^2 \right] + \frac{1}{2} u^2 + \gamma_{u0} u (S_x^2 + S_y^2) + \frac{1}{2} s^2 + \gamma_{s0} s (S_x^2 + S_y^2) + wus \right\}$$

В этом выражении  $u$ - упругая переменная, которая пропорциональна флуктуациям плотности в системе,  $s$ -пропорциональна флуктуациям энтропии на единицу массы,  $r_1 = T - T_{c0}$ ,  $T_{c0}$ -затравочная температура фазового перехода. Наличие слагаемых  $\int d^d \mathbf{x} \{u^2/2 + s^2/2 + wsu\}$  в (4) можно понять из теории термодинамических флуктуаций.

Стохастические уравнения, описывающие взаимодействие параметра порядка со звуком имеют вид

$$\frac{dS_i}{dt} = \lambda_0 \frac{\delta S^{st}}{\delta S_i} + \theta_i(\mathbf{x}, t), \frac{ds}{dt} = -\kappa \Delta \frac{\delta S^{st}}{\delta s} + \theta_s(\mathbf{x}, t), M\ddot{u} = -\Delta \frac{\delta S^{st}}{\delta u} + DM\Delta \dot{u} + \theta_u(\mathbf{x}, t).$$

Первое уравнение описывает релаксацию компонент параметра порядка с коэффициентом релаксации  $\lambda_0$ . Второе уравнение описывает перенос энергии в результате диффузии, где  $\kappa$ -температурная проводимость. Последнее уравнение следует из стандартного уравнения движения звуковых волн. Величины  $\theta_i, \theta_s, \theta_u$  играют роль случайных сил. Средние значения этих сил равны нулю, а для корреляторов выполняются соотношения

$$\begin{aligned}\langle \theta_{S_i}(\mathbf{x}, t) \theta_{S_j}(\mathbf{x}', t') \rangle &= 2\lambda_0 \delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t') \delta_{ij}, \\ \langle \theta_s(\mathbf{x}, t) \theta_s(\mathbf{x}', t') \rangle &= -2\kappa \nabla^2 \delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'), \\ \langle \theta_u(\mathbf{x}, t) \theta_u(\mathbf{x}', t') \rangle &= 2DM \nabla^4 \delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t').\end{aligned}$$

Можно показать, что эта стохастическая модель полностью эквивалентна квантовополевой модели с удвоенным числом полей, а именно:  $S_i, \tilde{S}_i$  ( $i=1,2$ ),  $s, \tilde{s}, u, \tilde{u}$ . Функционал действия такой модели записывается следующим образом

$$S = \iint d^d \mathbf{x} dt \left\{ \tilde{S}_1(\mathbf{x}, t) \lambda_0 \tilde{S}_1(\mathbf{x}, t) + \tilde{S}_2(\mathbf{x}, t) \lambda_0 \tilde{S}_2(\mathbf{x}, t) - \tilde{S}_1 \left[ \frac{\partial}{\partial t} S_1 - \lambda_0 \frac{\delta S^{st}}{\delta S_1} \right] - \tilde{S}_2 \left[ \frac{\partial}{\partial t} S_2 - \lambda_0 \frac{\delta S^{st}}{\delta S_2} \right] + \tilde{u} DM \nabla^4 \tilde{u} - \tilde{u} \left[ M \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \Delta \frac{\delta S^{st}}{\delta u} - DM \Delta \frac{\partial u}{\partial t} \right] - \tilde{s} \kappa \Delta \tilde{s} - \tilde{s} \left[ \frac{\partial}{\partial t} S + \kappa \Delta \frac{\delta S^{st}}{\delta s} \right] \right\}. \quad (1)$$

В однопетлевом приближении найден фононный отклик системы, определяемый как  $\langle u(\mathbf{x}, t_x) \tilde{u}(\mathbf{y}, t_y) \rangle$ . В этом определении  $\langle \rangle$  означают усреднение с плотностью вероятности в конфигурационном пространстве равной  $\exp S$ , где  $S$ -действие, приведенное выше. Его собственно-энергетическая часть пропорциональна ренормированной величине

$I_R = \frac{r\lambda}{2^3 (2\pi)^2} [\ln r - \ln 4\pi] \frac{\Gamma(2)}{(\lambda p^2 - i\omega)^2} \exp\left(\frac{-p^2 \lambda^2 r}{(\lambda p^2 - i\omega)}\right)$ . Она представляет собой в однопетлевом приближении среднее спиновых переменных  $\langle \tilde{S}_i(\mathbf{x}, t) S_i(\mathbf{x}, t) S_j(\mathbf{y}, t') S_j(\mathbf{y}, t') \rangle$ , где  $\tilde{S}_i(\mathbf{x}, t)$ -дополнительные спиновые переменные при переходе к квантовополевому описанию.

Продольные колебания решетки при исследовании магнитного фазового перехода несущественны. Поэтому дальнейшее исследование критического поведения различных функций необходимо проводить на основе базового действия, получаемого из (1) путем исключения переменных  $u, \tilde{u}$ , замены затравочной температуры перехода на истинную, величины  $\lambda_0$  – на ее ренормированное значение  $\lambda$ , а также заменой неренормированных параметров взаимодействия на их базовые значения, которые связаны ренормированными параметрами с помощью затравочной массы  $\mu$ .

Найдем критическое поведение функции  $\langle \tilde{S}_i(\mathbf{x}, t) S_i(\mathbf{x}, t) S_j(\mathbf{y}, t') S_j(\mathbf{y}, t') \rangle$ . Формально исследуется поведение этой функции, когда спиновые индексы одинаковы и равны, например, индексу  $i=1$ . Наличие других компонент учитывается симметричными множителями. Исследуем ренормгрупповое уравнение для этого коррелятора. Введем связанную ренормированную функцию Грина  $W_R^{(\tilde{M}\tilde{M}\tilde{N}\tilde{N})}(p, \omega, g_1, g_2, r, \lambda, \mu)$ . В этой функции имеется  $\tilde{M}$  вставок типа  $\tilde{S}S$ ,  $M$  вставок типа  $SS$ ,  $\tilde{N}$  сомножителей  $\tilde{S}$  и  $N$  сомножителей  $S$ . Величины  $g_1, g_2, r, \lambda$  являются ренормированными. Тогда ренормгрупповое уравнение для  $W_R^{(\tilde{M}\tilde{M}\tilde{N}\tilde{N})}$  в критической точке имеет вид

$$\left[ p\partial_p + \Delta_\omega \omega \partial_\omega + \Delta_r r \partial_r - N\Delta_S - \tilde{N}\Delta_{\tilde{S}} + M\Delta_{SS} + \tilde{M}\Delta_{(\tilde{S}S)} \right] W_R^{(\tilde{M}\tilde{M}\tilde{N}\tilde{N})}(p, \omega, g_1^*, g_2^*, r, \lambda, \mu) = 0,$$

где  $\Delta_i$  ( $i = r, S, \tilde{S}, SS, \tilde{S}S$ ) – критические размерности величин, приведенных в скобках.

Решение этого уравнения удобно записать через безразмерные переменные  $p/\mu = \zeta, r/\mu^2 = z, \omega/\lambda\mu^2 = q$ . На основе этого решения в пределе  $T \rightarrow T_c$  найдем коррелятор

$$I_R(\zeta, z, q) = I_R \left( 1, \frac{p}{\mu} \left( \frac{r}{\mu^2} \right)^{-\nu}, \frac{\omega}{\lambda\mu^2} \left( \frac{r}{\mu^2} \right)^{-\nu\Delta_\omega} \right) \left( \frac{r}{\mu^2} \right)^{-\nu(2d-2/\nu+\Delta_\omega)},$$

где  $1/\nu$  – критическая размерность величины  $g$ .

Дисперсионное уравнение звуковых волн определяется полюсом функции фононного отклика. Аналитическое решение этого уравнения найти не представляется возможным. Поэтому пренебрежем вкладом энтропии в это уравнение. Тогда отклонение квадрата частоты  $\delta\omega^2$  упругой волны от квадрата частоты в адиабатическом приближении равно

$$\delta\omega^2 = -8\lambda_0 \gamma_{u0}^2 \omega_0^2 \text{Re} I_R \left( 1, \frac{p}{\mu} \left( \frac{r}{\mu^2} \right)^{-\nu}, \frac{\omega}{\lambda\mu^2} \left( \frac{r}{\mu^2} \right)^{-\nu\Delta_\omega} \right) \left( \frac{r}{\mu^2} \right)^{-\nu(2d-2/\nu+\Delta_\omega)}.$$

Изменение квадрата частоты, прямо пропорциональна квадрату константы  $\gamma_{u0}$ , определяющей величину связи между магнитной подсистемой и решеткой. Величина этой константы определяется обменной стрикцией. В дигерманиде железа кристаллическое поле снимает вырождение 3d уровня так, что наивысшей энергией обладает уровень  $b_{1g}$  с базисной функцией  $d_{x^2-y^2}$ . Электроны с такой базисной функцией наиболее сильно удалены от ядра и имеют, следовательно, наибольшее перекрытие с такими же волновыми функциями соседних атомов железа, расположение которых отличается на целую трансляцию вдоль осей x или y от исходного атома Fe. Поэтому эти атомы имеют наибольший обменный интеграл, а, следовательно, и обменную стрикцию, что приводит к наиболее сильному изменению скорости продольного звука, распространяющегося вдоль оси x. Ниже по энергии идут уровни  $b_{2g}$  с волновой функцией  $d_{xy}$  и  $a_{1g}$  - с волновой функцией  $d_{z^2}$ . Поэтому обменострикция при распространении вдоль направления [001] оказывается наименьшей.

В критической области температур адиабатическую скорость звука  $c_0$  можно брать как линейную экстраполяцию изменения скорости звука при температурах значительно выше, чем  $T_c$ .

$$\frac{\delta c}{c_0} \sim \gamma_{u0} \left[ 8\lambda_0 ReI_R \left( 1, \frac{p}{\mu} \left( \frac{r}{\mu^2} \right)^{-\nu}, \frac{\omega}{\lambda\mu^2} \left( \frac{r}{\mu^2} \right)^{-\nu\Delta\omega} \right) \right]^{1/2} \left( \frac{r}{\mu^2} \right)^{-\nu(d-1/\nu+\Delta\omega/2)}$$

Здесь  $\delta c$  - изменение скорости звука вблизи критической точки. Модуль показателя степени в последнем сомножителе в правой части равен 1,69.  $c^2 - c_0^2 = \delta c^2 \sim -(\delta c)^2$ .

## Выводы.

Установлено, что в критической области вблизи температуры перехода второго рода в несоизмеримую магнитную структуру изменение скорости упругой волны относительно адиабатической скорости этой волны имеет степенной характер вида  $(T - T_c)^{-\nu(d-1/\nu+\Delta\omega/2)}$ . Изменение квадрата частоты упругой волны с температурой также имеет степенной характер с показателем степени, удвоенным по сравнению с написанным выше. Изменение скорости звука в критической области коррелирует с температурным поведением функции  $|r|(\ln|r| - \ln 4\pi)$ . Различная величина изменения скорости продольного звука в направлениях [100], [110], [001] связана с тем, что константы обменострикции при распространении звука в этих направлениях не совпадают между собой. Работа выполнена по теме «Квант» Г.р.№ АААА-А18-118020190095-4.

[1] О.В. Ковалев, Неприводимые индуцированные представления и копредставления федоровских групп. Наука, М. (1986). 367 с.

[2] В.В. Меньшенин, ЖЭТФ, **160**, 95(2021)

**Фазовая стабильность, магнитные и электронные свойства магнитных МАХ фаз**

В.С. Жандун<sup>1</sup>, Н.Г. Замкова<sup>1,2</sup>, О.Н. Драганюк<sup>1</sup>, А. С. Шинкоренко<sup>1</sup>, У. Видвальд<sup>3</sup>,  
С.Г. Овчинников<sup>1,2</sup>, М. Фарле<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Институт физики им. Л.В. Киренского “Федеральный исследовательский центр “КНЦ СО РАН”, Красноярск, Россия

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

<sup>3</sup> Физический факультет Университета Дуйсбург-Эссена, Дуйсбург, Германия

МАХ фазы  $M_2AX$ , где М - переходный металл, А - элемент А-группы, а Х - углерод или азот [1, 2] представляют собой гексагональные слоистые трехкомпонентные сплавы, демонстрирующие свойства, как металлических, так и керамических материалов [3]. Структура МАХ фазы представляет собой чередующиеся в направлении оси с слои  $M_2X$ , разделенные одиночными атомными слоями элемента А. Такая слоистая структура предлагает уникальное сочетание физических, химических, электрических и механических свойств [3]. В последнее время особый интерес вызывают магнитные МАХ-фазы, содержащие атомы хрома, марганца или железа в качестве элемента М. Сочетание слоистой структуры, присущей МАХ фазам, и таких характеристик, как высокая стабильность, высокая износостойкость и сильные анизотропные свойства, с магнитными степенями свободы, потенциально может привести к появлению новых функциональных материалов для различных приложений спинтроники. К настоящему времени успешно синтезированы несколько магнитных МАХ-фаз, однако проблема поиска подходящих термодинамически стабильных кандидатов и, следовательно, предсказания стабильной магнитной МАХ-фазы все еще остается открытой.

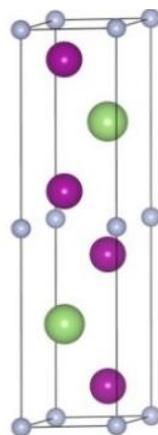


Рис.1. Структура МАХ фазы. Фиолетовый, зеленый и серый шары соответствуют атомам в М-, А-, и Х-позициях, соответственно

В данной работе в рамках первопринципного подхода, основанного на теории функционала плотности и реализованного в пакете VASP [4], теоретически изучено влияние состава и давления на магнитные, электронные и упругие свойства, а также на фазовую стабильность магнитных  $M_2AX$ -фаз ( $M=Mn, Fe$ ;  $A=Al, Ga, Si, Ge$ ;  $X=C, N$ ) на основе Mn и Fe. Исследование основного магнитного состояния показало, что все изученные соединения, кроме ферромагнетика  $Mn_2AlC$ , являются антиферромагнитными. В большинстве МАХ фаз, за исключением  $Mn_2GaC$ ,  $Mn_2GeN$ ,  $Fe_2AlN$  и  $Fe_2GaN$ , наименьшей энергией обладает антиферромагнитная конфигурация, реализуемая в рамках элементарной ячейки. В  $Mn_2GaC$  энергии нескольких магнитных фаз очень близки: разница между ними составляет 0,008 мэВ ( $\sim 88$  К). Такое вырождение указывает на конкуренцию между ферро- и антиферромагнитными обменными взаимодействиями, что приводит к экспериментально наблюдаемой неколлинеарной скошенной антиферромагнитной структуре при низких

температурах [5]. Исследование фазовой стабильности  $M_2AX$  фаз выполнено путем сравнения полной энергии МАХ фаз с энергией набора конкурирующих фаз для расчета энтальпии фазообразования [6,7]. Подобный метод является надежным инструментом, который можно использовать в качестве руководства для поиска новых МАХ-фаз до того, как будут предприняты трудоемкие и дорогостоящие экспериментальные исследования. В результате такого подхода мы обнаружили одно стабильное соединение ( $Mn_2GaC$ ) и семь метастабильных соединений ( $Mn_2AlC$ ,  $Fe_2GaC$ ,  $Mn_2GeC$ ,  $Mn_2GeN$ ,  $Mn_2SiC$ ,  $Mn_2GaN$ ) с небольшой положительной энтальпией формирования (Рис. 2а). Для всех МАХ-фаз максимальная стабильность достигается для составов, содержащих атом Ga в качестве А-элемента (Рис. 2а). Кроме того, нами было установлено, что МАХ-фазы на основе Fe менее стабильны, чем соединения на основе Mn.

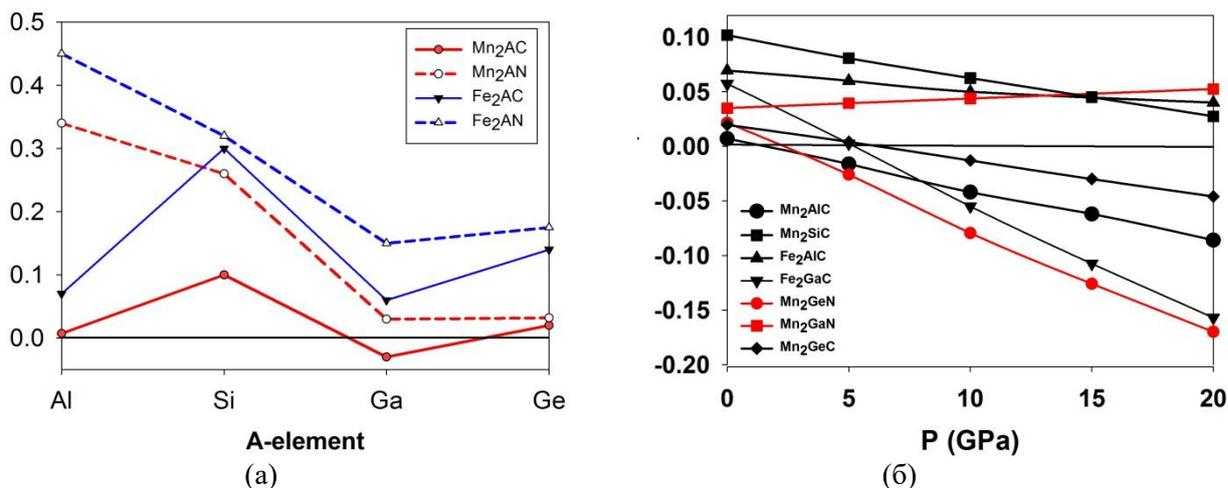


Рис.2. а) Зависимость энтальпии фазообразования от состава; б) Влияние давления на энтальпию формирования МАХ фаз. Отрицательное значение энтальпии соответствует стабильным МАХ фазам

Показано (Рис. 2б), что ряд соединений из предсказанных метастабильных МАХ-фаз ( $Mn_2AlC$ ,  $Fe_2GaC$ ,  $Mn_2GeC$  и  $Mn_2GeN$ ) можно стабилизировать с помощью небольшого приложенного давления (2–10 ГПа). Такое давление можно реализовать путем роста пленок МАХ-фаз на соответствующей подложке. В этом случае соединения будут испытывать сжатие или растяжение в зависимости от материала подложки, и приложенное давление может стабилизировать эти соединения. Для предсказанных метастабильных МАХ-фаз были рассчитаны и проанализированы электронная структура и упругие свойства. Все соединения характеризуются большим модулем объемной упругости и малым модулем сдвига. Мы также обнаружили наличие зонного магнетизма и доминирующий характер металлической связи для всех соединений. Результаты работы опубликованы в [8]

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках исследовательского проекта № 20-42-240004: «Влияние состава, давления и размеров на магнитные, электронные и магнитные поля. оптические и упругие свойства магнитных  $Mn + 1AX_n$  ( $M = Cr, Mn; Fe, A = Al, Ga, Si, Ge, P, In; X = C, N; n = 1-3$ ) МАХ-фаз » и Правительством Российской Федерации (договор № 075-15-2019-1886). Расчеты выполнены на компьютерных ресурсах «Комплексного моделирования и обработки данных исследовательских установок мегакласса» НИЦ «Курчатовский институт» (<http://ckp.urcki.ru>).

## Литература:

1. V. H. Nowotny, Strukturchemie einiger Verbindungen der Übergangsmetalle mit den elementen C, Si, Ge, Sn // *Progress Solid State Chemistry*, 1971, V. 5, pp. 27-70.
2. M. W. Barsoum, The  $M_{N+1}AX_N$  Phases: A New Class of Solids: Thermodynamically Stable Nanolaminates // *Progress Solid State Chemistry*, 2000, V. 28, pp. 201-281.
3. M. W. Barsoum, T. El-Raghy, The MAX Phases: Unique New Carbide and Nitride Materials // *American Scientist*, 2001, V. 89, pp. 334-343.
4. G. Kresse and J. Furthmüller, Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // *Physical Review B*, 1996, V. 54, 11169.
5. Iuliia P. Novoselova, Andrejs Petruhins, Ulf Wiedwald et al, Large uniaxial magnetostriction with sign inversion at the first order phase transition in the nanolaminated  $Mn_2GaC$  MAX phase // *Scientific Reports*, 2018, V. 8, 2637.
6. M. Dahlqvist, B. Alling, J. Rosén, Stability trends of MAX phases from first principles // *Physical Review B*, 2010, V. 81, 220102(R).
7. V. J. Keast, S. Harris, and D. K. Smith, Prediction of the stability of the  $M_{n+1}AX_n$  phases from first principles // *Physical Review B*, 2009, V. 80, 214113.
8. Vyacheslav S. Zhandun, Natalia G. Zamkova, Oksana N. Draganyuk et al, The effect of the composition and pressure on the phase stability and electronic, magnetic, and elastic properties of  $M_2AX$  (M=Mn, Fe; A=Al, Ga, Si, Ge; X=C, N) phases // *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2021, **23**, 26376 – 26384.

### Чётные и нечётные поля на ионах $Fe^{2+}$ , связь электронов с деформацией и магнитоэлектрическая связь в $FeCr_2O_4$

К.В. Васин, М.В. Еремин

Институт физики, Казанский федеральный университет, Казань, Россия

Проведено комплексное теоретическое исследование [1] электронной структуры ферримагнетика  $FeCr_2O_4$ . Энергетическая схема низколежащих состояний  $Fe^{2+}$  довольно сложна и практически не изучена, так как ситуация осложняется наличием кооперативного эффекта Яна-Теллера, механизмы которого неясны, конкурирующего со спин-орбитальным взаимодействием [2]. Кристалл и родственные соединения с ионами железа в тетраэдрических позициях привлекают внимание благодаря сильным магнитоэлектрическим эффектам, пока ещё не вполне ясного происхождения [3,4,5].

Для начального приближения мы провели расчеты параметров оператора кристаллического поля. Найдена связь микро- и макро- деформаций внутри ячейки при переходе в орбитально-упорядоченную фазу с учетом сдвигов подрешеток ионов кислорода путем сопоставления данных измеренных кристаллографических структур [2,6]

$$Q_\alpha = e_{\alpha\beta} R_0(l, s)_\beta + w(s)_\alpha, \quad \#(1)$$

где  $Q$  – нормальные координаты комплекса  $FeO_4$ ,  $e$  – тензор деформации, определяемый по изменениям постоянных решетки, а  $w$  – сдвиги подрешеток линейно связанные с  $e$ . В таком расчете для орбитально-упорядоченной фазы в представлении  $\Gamma_3$  получается  $Q_{\theta,\varepsilon} = \alpha(R_0 2\sqrt{2}/3)e_{\theta,\varepsilon}$ , где  $\alpha$  – усиливающий множитель, включающий в себя эффект от  $w$ . Оценки показали  $\alpha \sim 3$ , что свидетельствует о важности учета сдвига подрешеток.

С использованием этих данных определены ключевые вклады в четные и нечетные компоненты кристаллического поля, действующего на позициях  $Fe^{2+}$  ( $3d^6$ ,  $S=2$ ). При расчете учтено влияние дальних лигандов, а также электростатическая поправка, учитывающая взаимное проникновение зарядовой плотности металла и лиганда (поправка Клейнера). Это можно проиллюстрировать вторым множителем в разложении электростатического потенциала (2)

$$V(r) = \frac{Z|e|}{r} + \frac{|e|}{r} \sum_k p_k e^{-r_k r^2} \quad \#(2)$$

В значительной степени это сказывается на константе ян-теллеровской связи: ослабление на 50% [1] – таблица 1.

Таблица 1 Оцененные параметры оператора кристаллического поля для  $FeO_4$ .

Параметры оператора кристаллического поля	
$iB_2^{(3)}$	$39902 cm^{-1}$
$B_0^{(4)}$	$-6992 cm^{-1}$
$B_4^{(4)}$	$-4179 cm^{-1}$
Константа ян-теллеровской связи	
$V$	$-1705 cm^{-1}/A$
без учета $w$ и поправки Клейнера	
$V$	$-3500 cm^{-1}/A$

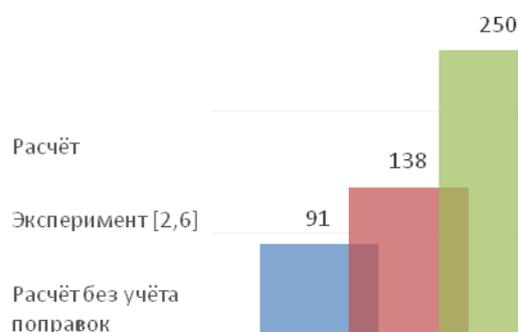


Рис. 1 Сравнение рассчитанных критических температур (К) перехода в орбитально-упорядоченное состояние

Так как одним из механизмов упорядочения выявлен – взаимодействие центров железа через поле деформации [1], в качестве контроля была оценена критическая температура перехода в орбитально-упорядоченное состояние центров  $\text{FeO}_4$  – рисунок 1. Подтверждением корректности рассчитанных уровней энергии служат также сопоставление параметров градиента электрического поля, измеряемые в эффекте Мёссбауэра – рисунок 2.

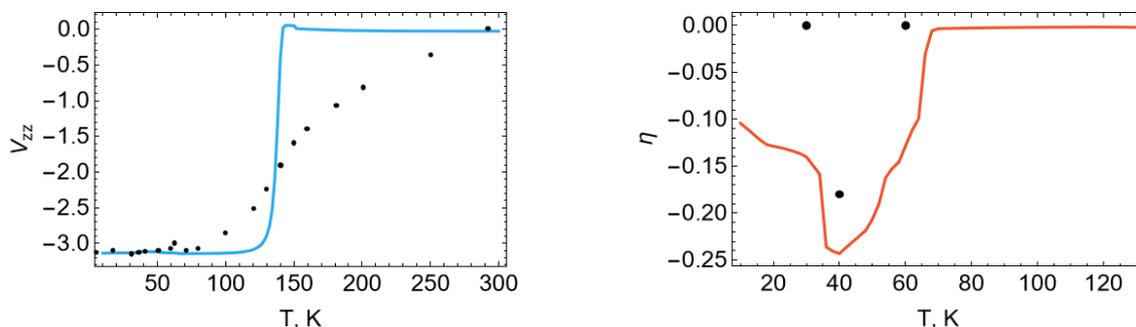


Рис 2. Рассчитанные параметры ГЭП. Точками отмечены измерения из работы [7]

Предложен микроскопический механизм магнитоэлектрической связи спинов  $\text{Fe}^{2+}$  с электрическим полем. Ключевую роль в нем играют нечетные компоненты кристаллического поля, которые примешивают состояния конфигурации противоположной четности. Кроме того, при учете эффектов переноса заряда, если рассмотреть отдельные пары лиганд-металл – каждая пара не имеет центра инверсии, что локально снимает запрет на существование дипольного момента. В общем виде оператор обычно записывается в виде

$$H_E = \sum_{p \tau} \{E^{(1)} U^{(k)}\}_\tau^{(p)} \times d^{(1k)p}(R_j) (-1)^\tau C_{-\tau}^{(p)}(\theta_j, \phi_j) \quad \#(3)$$

где параметры  $d$ , обычно подбираются из эксперимента, однако в нашей работе они рассчитаны явно  $d^{(12)3} \simeq -0.497|e|A$ ,  $d^{(14)3} \simeq +0.691|e|A$ , используя микроскопическую теорию, описанную выше. С помощью полученных волновых функций и оператора (3) был описан спектр оптической проводимости – рисунок 3.

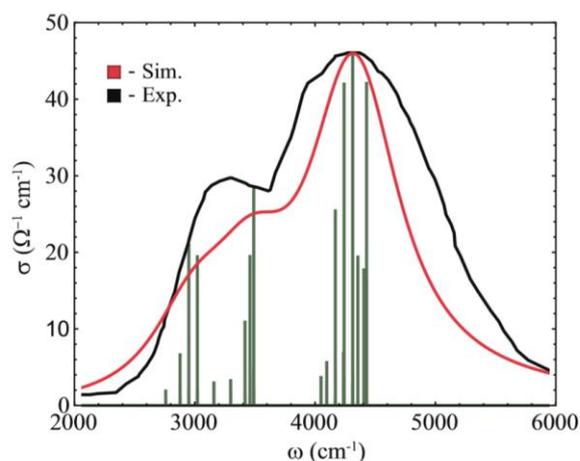


Рис. 3. Рассчитанный спектр оптической проводимости (красный), сопоставляемый с работой [8]. Зеленым отмечена тонкая структура уширенного спектра.

Связь спина с электрическим полем реализуется уже при комбинации со спин-орбитальным взаимодействием оператора (3) в третьем порядке теории возмущений

$$H_{ME1} = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{7}{2}} d^{(12)3} \frac{\lambda^2}{\Delta} E_z (S_x S_y + S_y S_x). \#(4)$$

Кроме того, вовлекая обменное взаимодействие со спинами ионов хрома, получается второй механизм уже пропорциональный векторному произведению спинов Fe и Cr

$$H_{ME2} = C(S_x S_y + S_y S_x) E_z + B J_{FeCr} \{ [S \times S_{Cr}]_x E_x - [S \times S_{Cr}]_y E_y \} \#(5)$$

Проведенные оценки спонтанной электрической поляризации показывают, что оба предложенных механизма могут объяснить величину поляризации по порядку величины – таблица 2.

Таблица 2. Оцененные компоненты электрической поляризации в расчете на единицу объема. Направление спина согласовано с данными измерений в эффекте Мёссбауэра [10]. Измеренные значения – работа [5]. Синяя стрелка обозначает направление спина Fe относительно кристаллографической системы координат.

T	70K		62K		60K		51K		40K	
$\langle S_x \rangle$	0.		0.5		0.67		0.99		1.23	
$\langle S_y \rangle$	0.		-0.35		-0.17		-0.15		0.	
$\langle P_x \rangle, \mu C/m^2$	<b>0</b>		<b>28</b>		<b>13</b>		<b>12</b>		<b>0</b>	
$\langle P_y \rangle$	<b>0</b>		<b>-40</b>		<b>-53</b>		<b>-79</b>		<b>-92</b>	
$\langle P_z \rangle$	<b>0</b>		<b>73</b>		<b>46</b>		<b>61</b>		<b>-1</b>	
P (изм.)	21.8		27.3		28.6		32.0		33.7	

Так как спиновая структура, разрешающая магнитоэлектрическую связь, до сих пор неизвестна, было сделано несколько предположений. Угол между направлениями спинов Fe и Cr для оценки полагался равным  $111^\circ$ , как в родственном соединении  $FeV_2O_4$  между спинами Fe и V [9]. Спины внутри подрешёток Cr и Fe полагались коллинеарными, а направление спинов Fe полагалось сонаправленным магнитному полю на ядрах  $^{57}Fe$  [10].

Из таблицы 2 видно, проведенные оценки электрической поляризации по порядку величины соответствуют имеющимся экспериментальным данным [5], полученных на поликристаллических образцах.

Работа поддержана Российским научным фондом (проект № 19-12-00244).

### Литература:

1. Vasin K. V., Eremin M. V. // J. of Phys. Cond. Mat. 2021. Vol. 33.
2. Ohtani S., Watanabe Y. et al. // J. of Phys. Cond. Mat. 2010. Vol. 22
3. Lin L., Zhu H.X., et al. // Sci. Rep. 2014. Vol. 4.
4. Yazhong W., Gheorghe L. // Scientific Reports. 2015. Vol. 5.
5. Singh K., Maignan A., et al. // Appl. Phys. Lett. 2011. Vol. 99.
6. Tsuda K., Morikawa D., et al. // Phys. Rev. B 2010. Vol. 81.
7. Hartmann-Boutron F., Imbert P. // Journal of Applied Physics 1968. Vol. 39.
8. Ohgushi K., Okimoto Y., et al. // J. of Phys. Soc. of Jp. 2008. Vol. 77.
9. Nakamura S., Kobayash Y., et al. // Physica B: Cond. Matt. 2018. Vol. 536.
10. Nakamura S., Fuwa A. // Physics Procedia 2015. Vol. 75.