

Научный руководитель – д.ф.-м.н., чл.-кор. РАН Стрельцов
Сергей Владимирович

Специальность 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Тема работы – Исследование взаимосвязи между спин-орбитальным и вибронным взаимодействиями в 4d-5d соединениях переходных металлов

Задача текущего года

Обзор литературы по теме диссертации. Решение $t \otimes T$ задачи Яна–Теллера для произвольной силы спин-орбитального взаимодействия и для различного числа электронов. Анализ полученных результатов.

Результаты, полученные в текущем году

В результате решения $t \otimes T$ задачи показано, что влияние спин-орбитального взаимодействия на эффект Яна-Теллера существенно зависит от числа электронов на t_{2g} уровне: возможно как частичное или полное подавление ЯТ, так и его усиление. Результаты расчётов опубликованы в журнале *Physical Review B*.

Апробация работы

Статьи

Streltsov, S.V., **Temnikov, F.V.**, Kugel, K.I., Khomskii, D.I. (2022). Interplay of the Jahn-Teller effect and spin-orbit coupling: The case of trigonal vibrations. Physical Review B (105, 205142).

Кандидатские экзамены

Экзамен по иностранному языку

Сдан на «Отлично»

Участие в грантах

1. Проект РФФ 20-62-46047 «Влияние спин-орбитального взаимодействия на орбитальные, спиновые и решеточные степени свободы в соединениях переходных металлов.»

Руководитель – Стрельцов С.В., д.ф.-м.н.

Степень участия – исполнитель

2. Проект РФФ 22-22-00023 «Установление квантовых основных состояний фрустрированных медь-свинцовых магнетиков пониженной размерности»

Руководитель – Васильев А.Н., д.ф.-м.н.

Степень участия – исполнитель

Аспирант 1 года обучения Темников Фёдор Владимирович
лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем

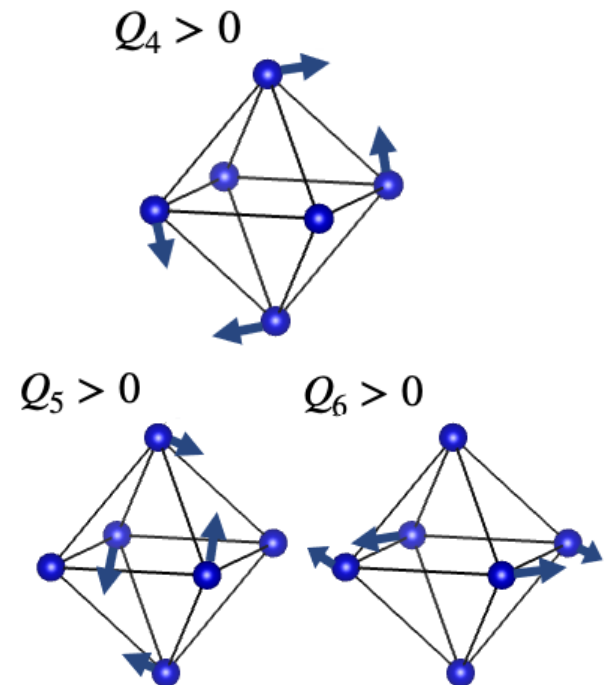
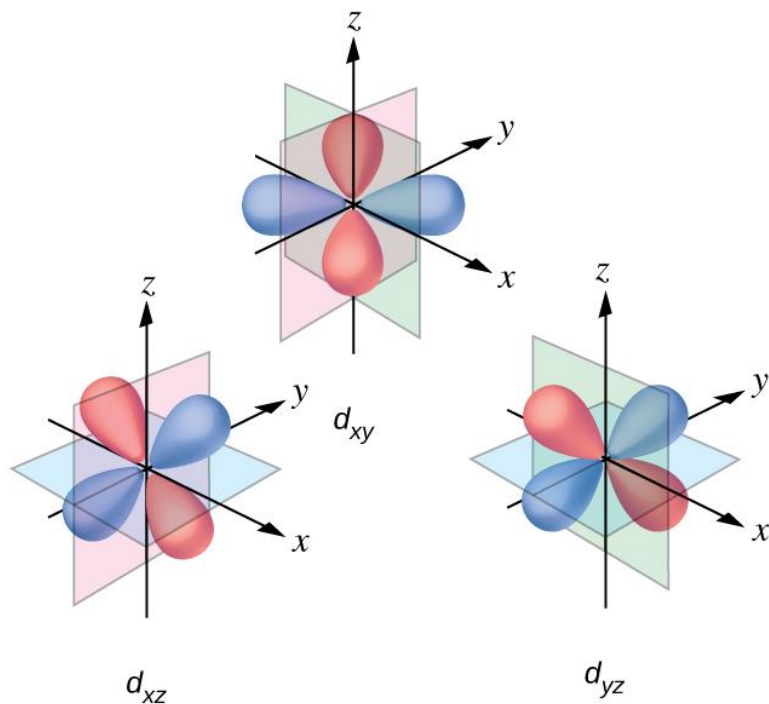
4

Таблица показателей

Показатель	Баллы	Кол-во	Сумма
публикации в изданиях ВАК (вышедшие из печати)	20	1	20
публикации в изданиях ВАК (принятые в печать)	5	0	0
свидетельство о программах для ЭВМ, зарегистрированных в установленном порядке	20	0	0
патент	20	0	0
соавторство в монографии	5	0	0
оформленное ноу-хау	5	0	0
публикации в других изданиях (не тезисы)	2	0	0
тезисы доклада на международной конференции	5	0	0
тезисы доклада на российской конференции	3	0	0
участие в конференции с устным докладом	2	0	0
участие в конференции со стендовым докладом	1	0	0
сданный на «отлично» кандидатский экзамен	20	1	20
сданный на «хорошо» кандидатский экзамен	15	0	0
сданный на «удовлетворительно» кандидатский экзамен	10	0	0
участие в грантах в качестве: исполнителя	5	2	10
участие в грантах в качестве: руководителя	10	0	0
Общая сумма			50

Исследование взаимосвязи между спин-орбитальным и вибронным взаимодействиями в 4d-5d соединениях переходных металлов.

$t \otimes T$
задача Яна–Теллера



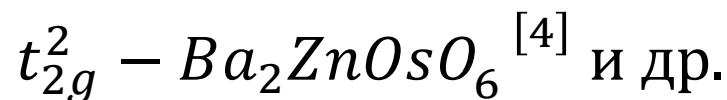
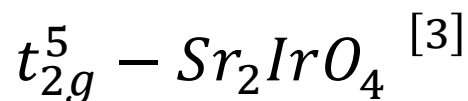
Имеющиеся работы по влиянию спин-орбитального взаимодействия на эффект Яна-Теллера

Теория возмущений ^[1,2]

$$\lambda \ll E_{JT}$$

$$\lambda \gg E_{JT}$$

Модели для конкретных
соединений



[1] Öpik U. et al. // *Proc. R. Soc. Lond.*
1957. – Т. 238. – №. 1215. – С. 425-447.

[2] K. D. Warren, *Complex Chemistry.*
Structure and Bonding. (1982), vol. 57, p. 119.

[3] Plotnikova E. M. et al. PRL – 2016. – Т. 116. – №. 10.

[4] Paramekanti A. et al. PRB. – 2020. – Т. 101. – №. 5

Модельный гамильтониан

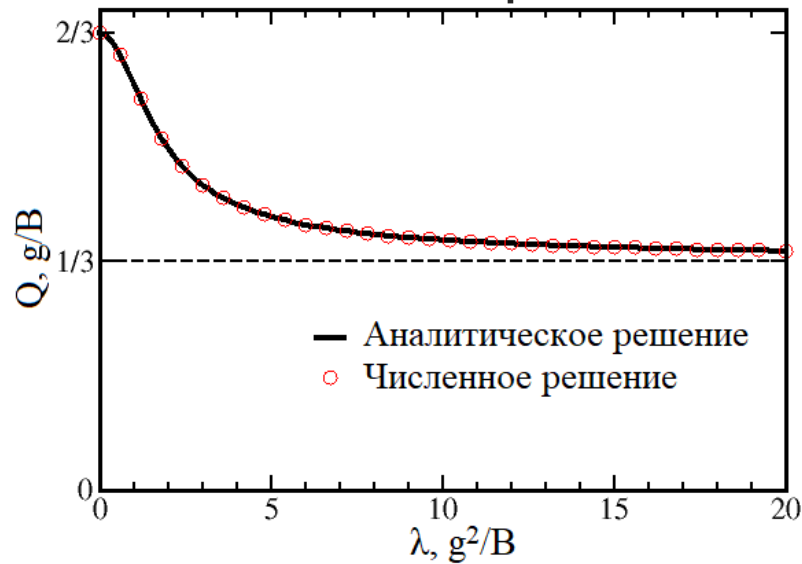
$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\lambda \sum_i \hat{l}_i \hat{s}_i + \frac{B}{2} (Q_4^2 + Q_5^2 + Q_6^2) \hat{I} - \\ & -g \sum_i (\hat{V}_{4,i} Q_4 + \hat{V}_{5,i} Q_5 + \hat{V}_{6,i} Q_6) + \\ & + \left[(U - 3J_H) \frac{\hat{N}(\hat{N}-1)}{2} - 2J_H \hat{S}^2 - \frac{J_H}{2} \hat{L}^2 + \frac{5}{2} \hat{N}^2 \right]^* \end{aligned}$$

* Georges A. et al. Annu. Rev. Cond. Mat. Phys. – 2013. – T. 4. – №. 1. – С. 137

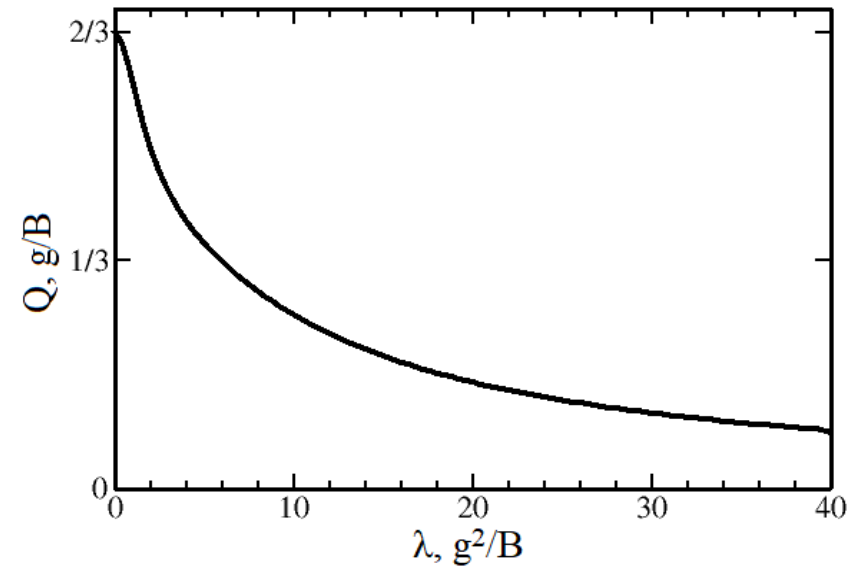
Результаты расчётов

8

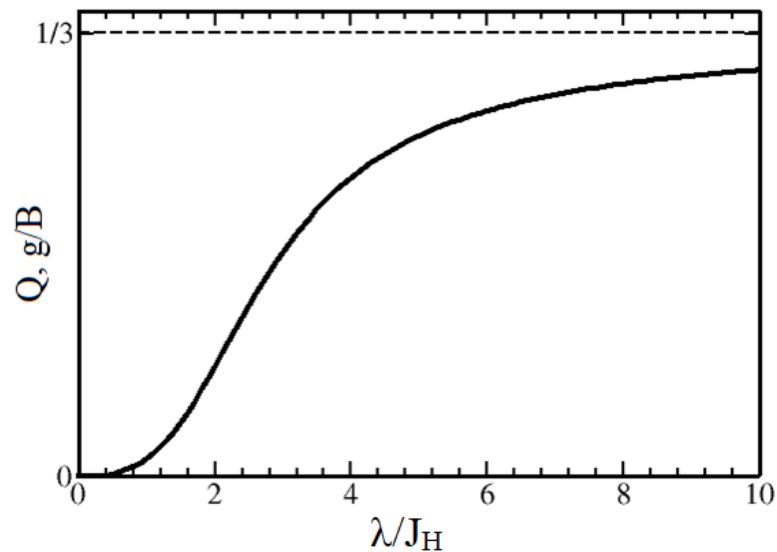
1 электрон



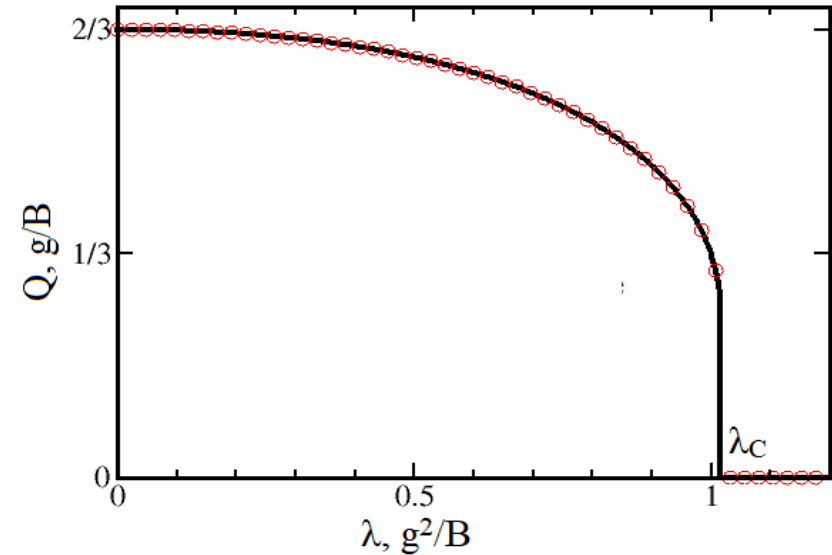
2 электрона



3 электрона



4 и 5 электронов



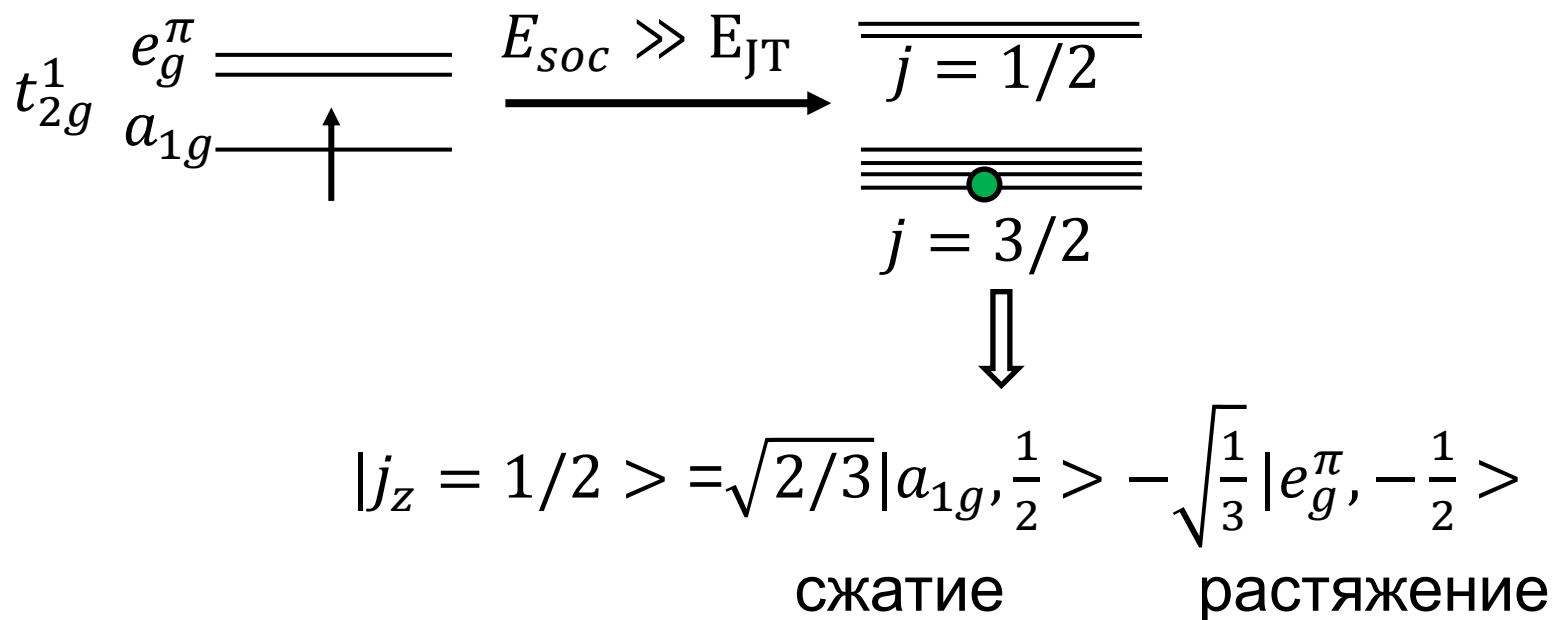
Сравнение с экспериментами⁹ по 5d соединениям ПМ

- Случаи 2, 4 и 5 электронов – полное подавление ЯТ деформаций:
 t_{2g}^2 – двойные перовскиты $Ba_2M\mathbf{O}so_6$ ($M = Zn, Mg, Ca$)
 t_{2g}^4 – иридат $Ba_3Zn\mathbf{Ir}_2O_9$ ($J = 0$)
 t_{2g}^5 – иридаты $Ba_2Ce\mathbf{Ir}O_6$, $Sr_2Ce\mathbf{Ir}O_6$ и др. ($j = 1/2$)
- Случай 1 электрона:
Сохранение ЯТ деформаций в хлоридах тантала:
 $M_2\mathbf{Ta}Cl_6$ ($M = K, Pb, Cs$)
- Случай 3 электронов – ???

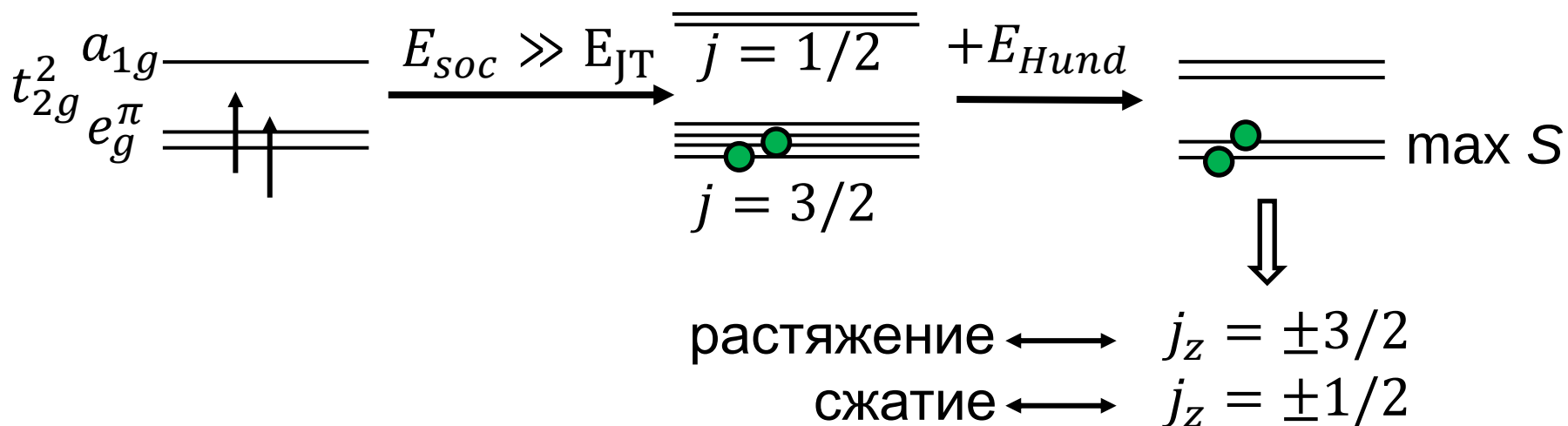
Спасибо за внимание!

1 электрон на t_{2g} уровне

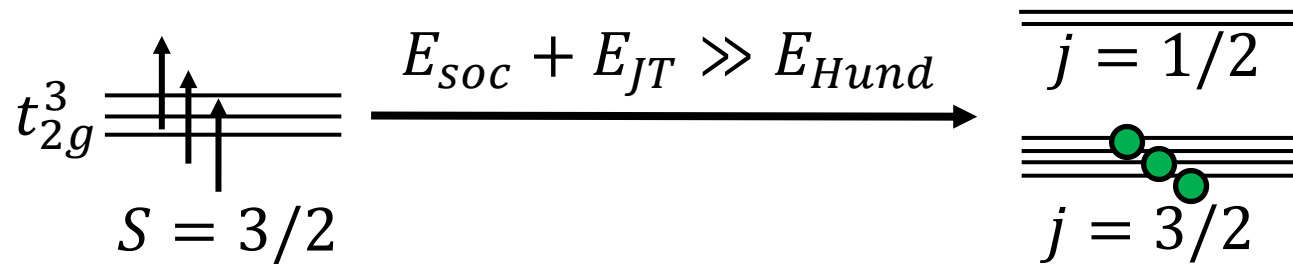
11



2 электрона на t_{2g} уровне 12

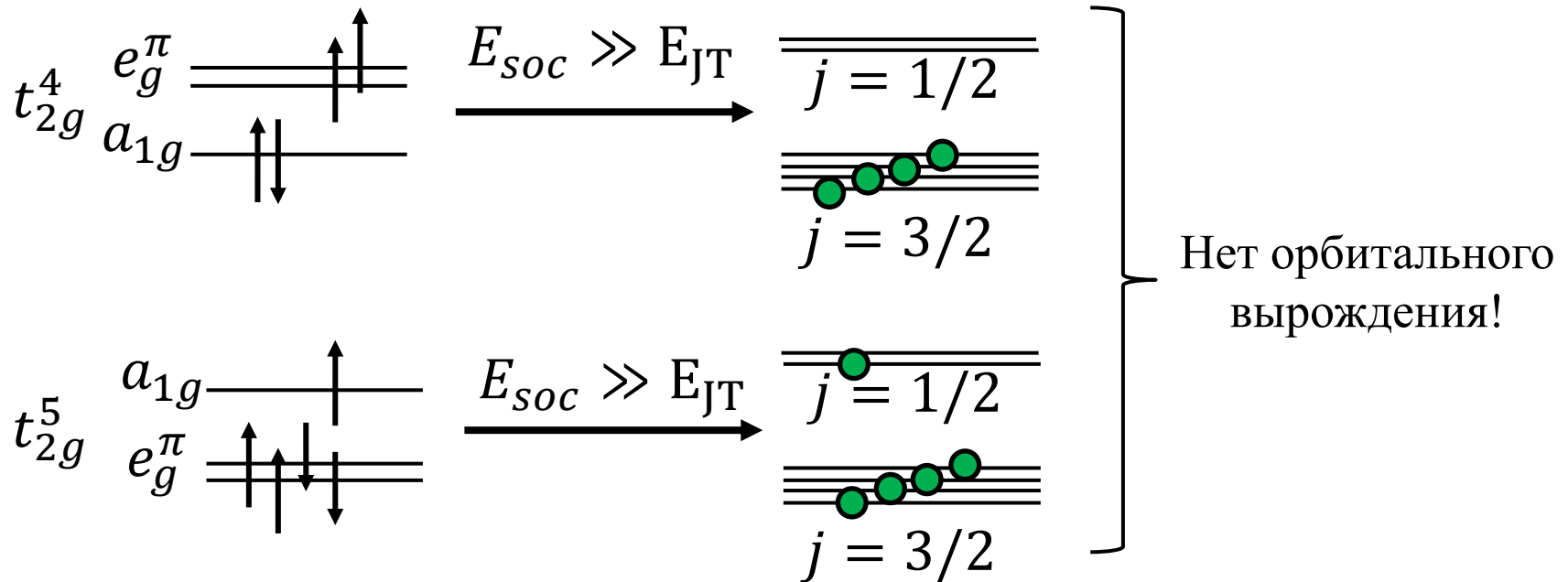


3 электрона на t_{2g} уровне

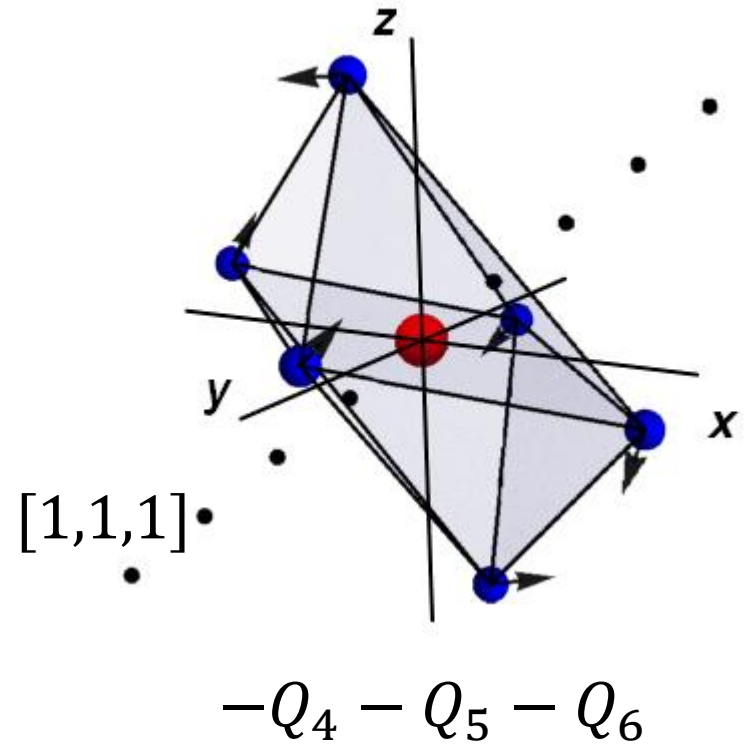
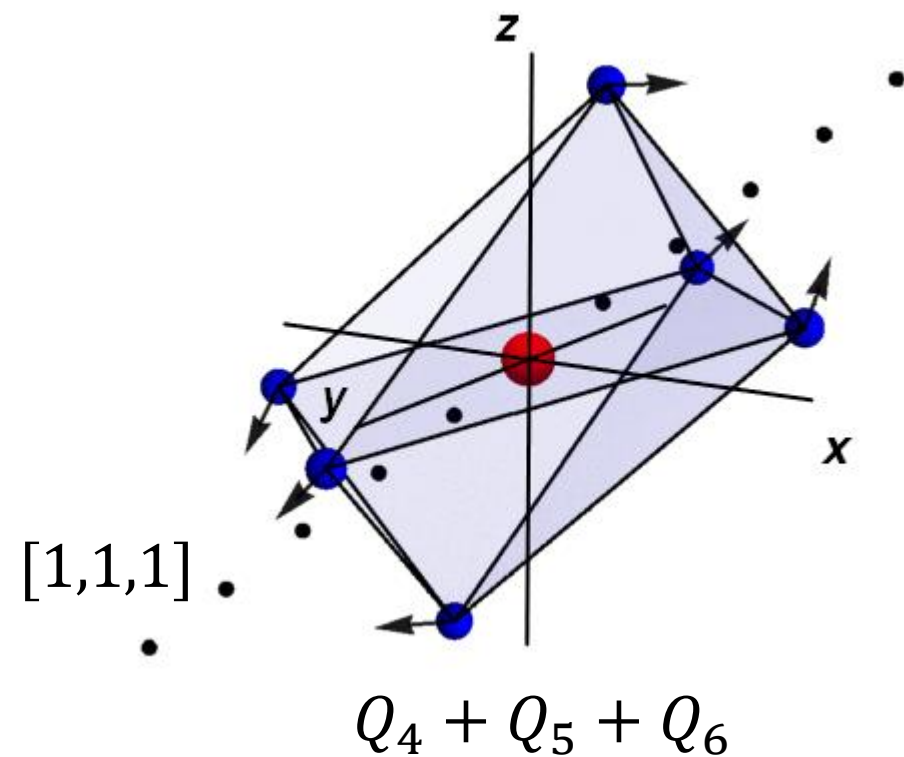


Есть вырождение $\Rightarrow$ ЯТ
Но $S < 3/2$

4 и 5 электронов на t_{2g} уровне



Тригональные деформации₁₅



Расщепление t_{2g} уровня

16

