

Аспирант 2 года обучения Темников Федор Владимирович
лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем

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

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Тема работы – расчёт параметров обменного взаимодействия и анализ магнитных свойств халдейновской системы $\text{Gd}_2\text{BaNiO}_5$

Задачи текущего года – определение электронной структуры халдейновского магнетика $\text{Gd}_2\text{BaNiO}_5$ из первопринципных расчётов и вычисление величин его обменных параметров между магнитными ионами. Определение одноионной анизотропии на узлах никеля.

Результаты, полученные в текущем году – были получены обменные параметры между магнитными ионами и значение одноионной анизотропии на никеле.

Результаты подготовлены для публикации. Ожидаются результаты от экспериментальной группы.

Аспирант 2 года обучения Темников Федор Владимирович
лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем

Апробация работы

Выступления на конференциях

Сделано докладов на российских конференциях: 2

1. XXIII Всероссийская школа - семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества СПФКС-22 (устный)
2. XX Конференция “Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления” (стендовый)

Тезисы докладов на конференциях

1) **Ф.В.Темников.** Взаимосвязь эффекта Яна-Теллера и спин-орбитального взаимодействия для t_{2g} орбиталей и тригональных колебаний / Ф.В.Темников, С.В.Стрельцов, К.И.Кугель, Д.И.Хомский // XXII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-22) памяти М.И. Куркина, Екатеринбург, 24 ноября – 1 декабря, 2022: Тезисы докладов, г. Екатеринбург: ИФМ УрО РАН, 2022. – 281 с.

2) **F.V. Temnikov.** Interplay of the Jahn–Teller effect and spin-orbit coupling: The case of trigonal vibrations / F.V. Temnikov, S.V. Streltsov, K.I. Kugel, D.I. Khomskii // XX Конференция “Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления”, Москва, 25 мая, 2023 г.: Сборник тезисов, ФИАН г. Москва, 2023. – 118 с.

**Аспирант 2 года обучения Темников Федор Владимирович
лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем**

Экзамены

Экзамен по истории и философии науки

Сдан – «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.

Грант завершён в 2022 году.

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

3) Проект РФФ 23-42-00069 «Синтез под высоким давлением полуметаллических ферромагнетиков с выдающимися характеристиками и связанные с ними физические механизмы» Руководитель – Ирхин В.Ю., д.ф.-м.н.

Степень участия – исполнитель

Аспирант 2 года обучения Темников Федор Владимирович
лаборатории теории низкоразмерных спиновых систем
Таблица показателей

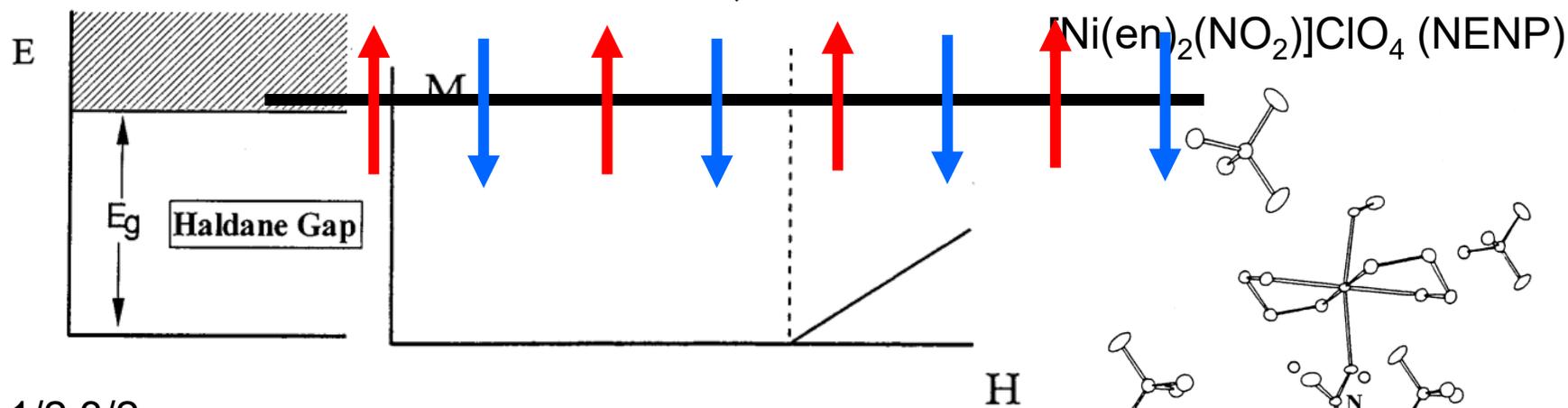
Показатель	Баллы	Показатели 1 года, шт.	Баллы за 1 год	Показатели 2 года, шт.	Баллы за 2 год	Итого баллов
публикации в изданиях ВАК (вышедшие из печати)	20	1	20	0	0	20
публикации в изданиях ВАК (принятые в печать)	5	0	0	0	0	0
Свид. о прог., зарегис-ых в устан-ом порядке	20	0	0	0	0	0
патент	20	0	0	0	0	0
соавторство в монографии	5	0	0	0	0	0
оформленное ноу-хау	5	0	0	0	0	0
публикации в других изданиях (не тезисы)	2	0	0	0	0	0
тезисы доклада на международной конференции	5	0	0	0	0	30
тезисы доклада на российской конференции	3	0	0	2	6	6
участие в конференции с устным докладом	2	0	0	1	2	2
участие в конференции со стендовым докладом	1	0	0	1	1	1
сданный на «отлично» кандидатский экзамен	20	1	20	1	20	40
сданный на «хорошо» кандидатский экзамен	15	0	0	0	0	0
сданный на «удовлетворительно» кандидатский экзамен	10	0	0	0	0	0
участие в грантах в качестве: исполнителя	5	2	10	3	15	25
участие в грантах в качестве: руководителя	10	0	0	0	0	0
Общая сумма баллов			50		44	94

Халдейновские цепочки

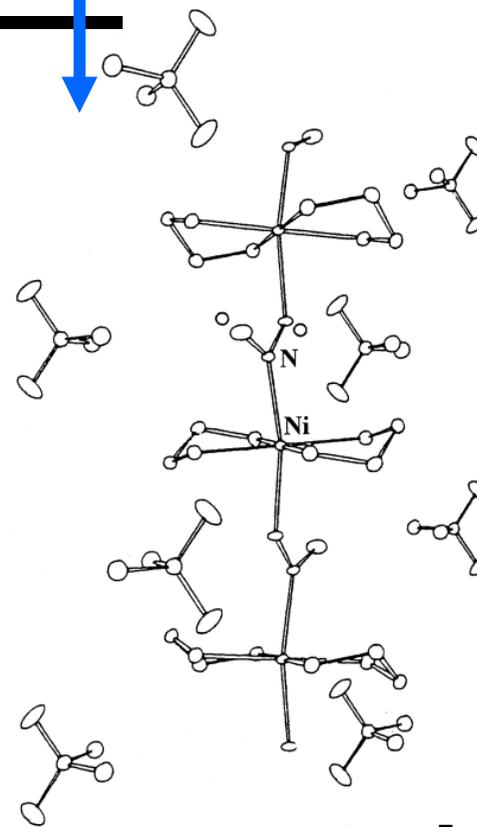
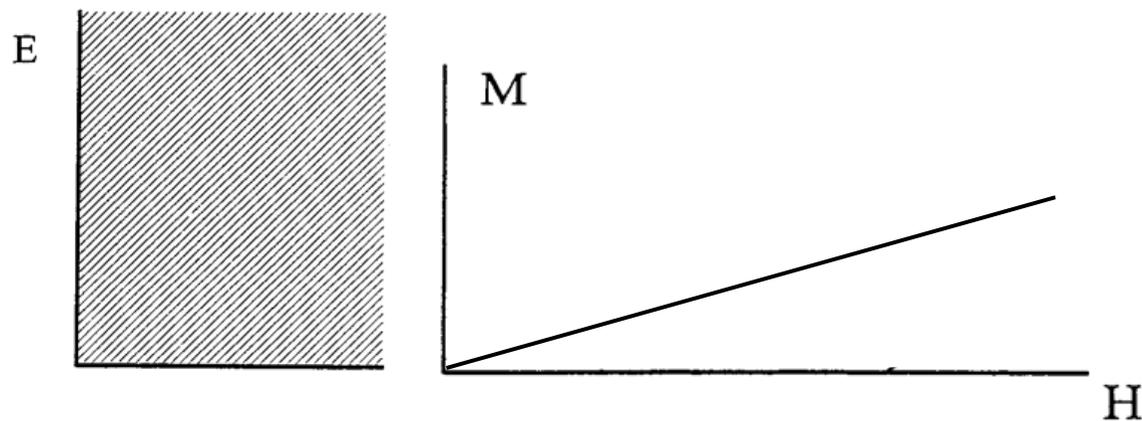
$$H = J \sum S_i S_{i+1}$$

$$S = 1, 2, \dots$$

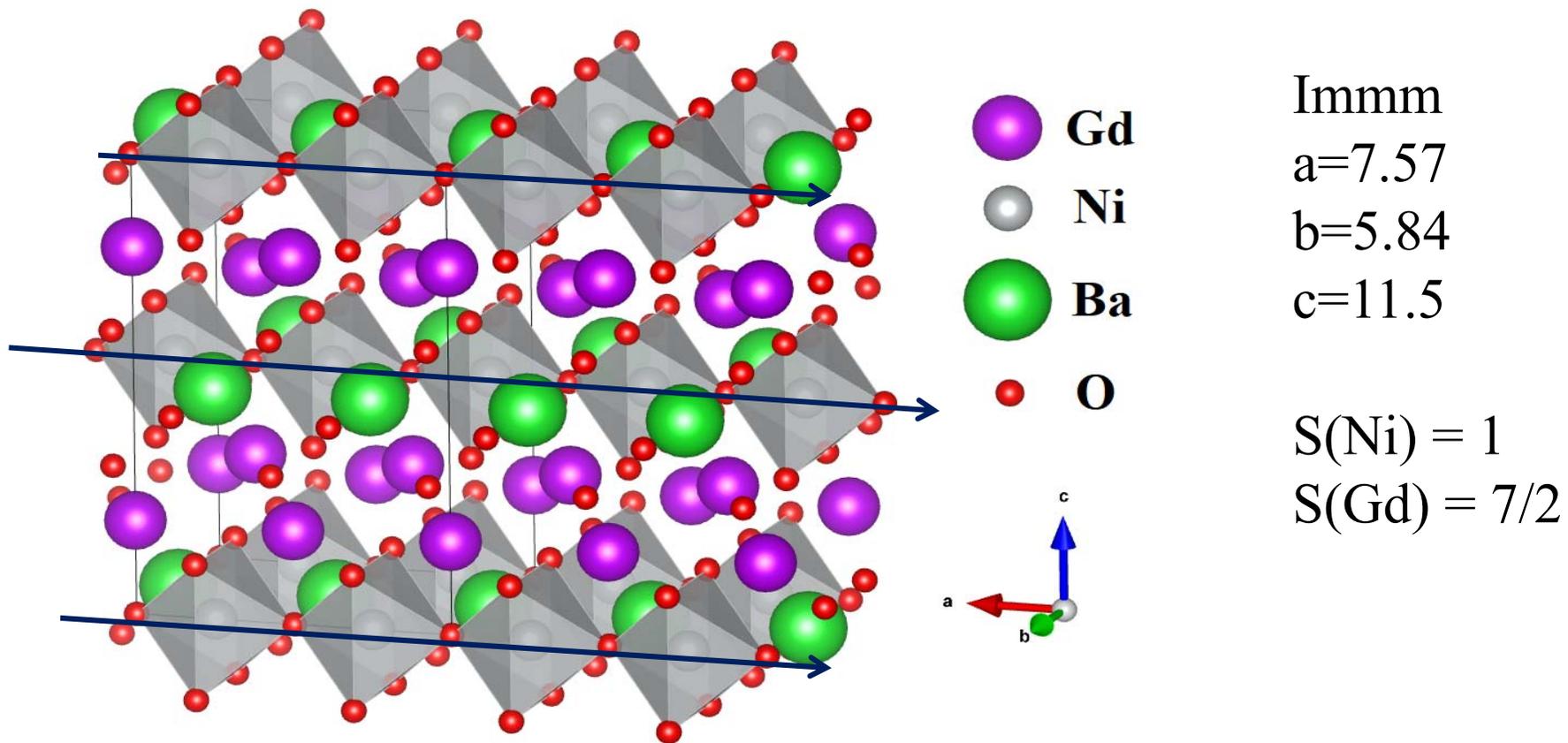
$S=1,2,\dots$



$S=1/2, 3/2, \dots$

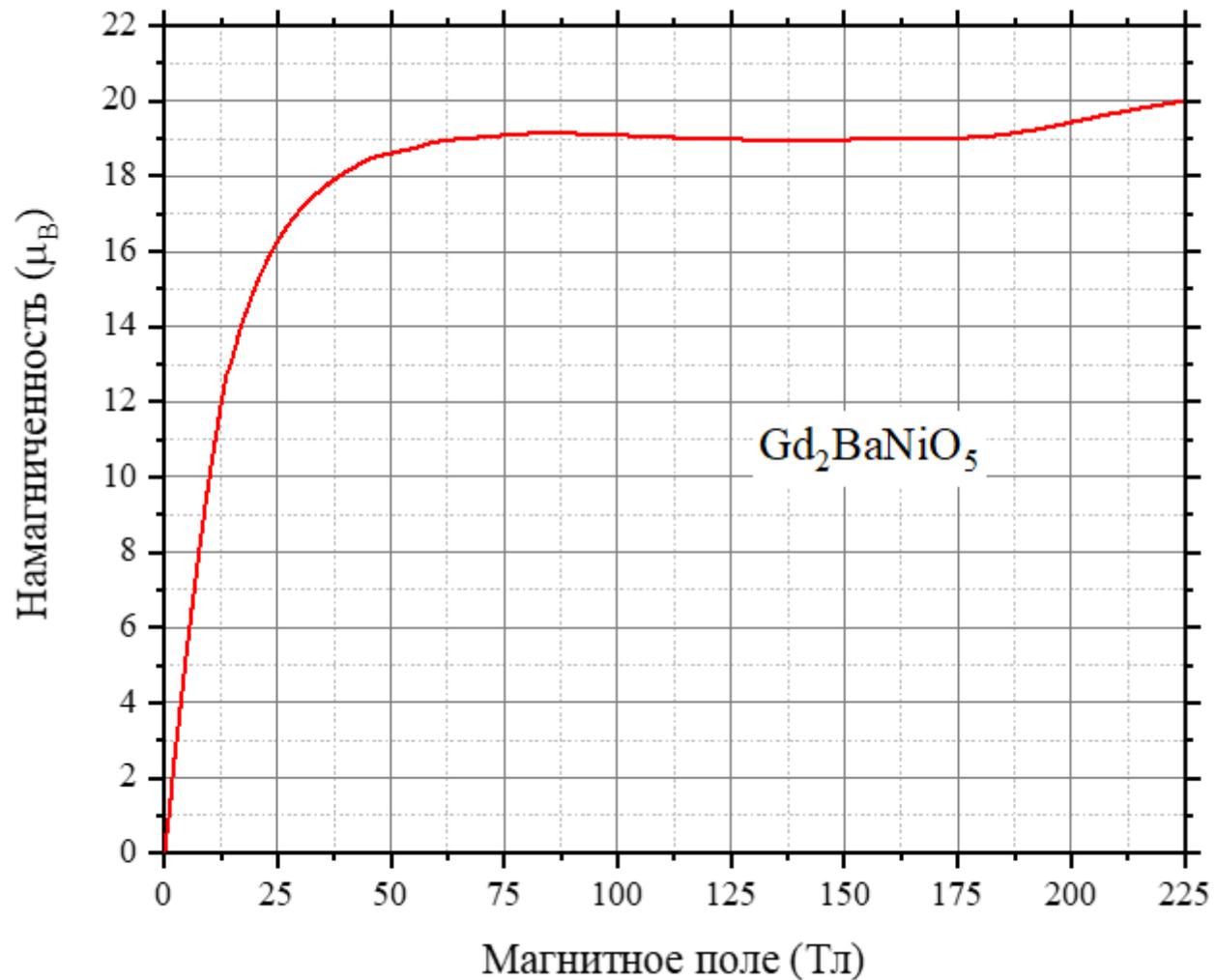


Кристаллическая структура $\text{Gd}_2\text{BaNiO}_5$



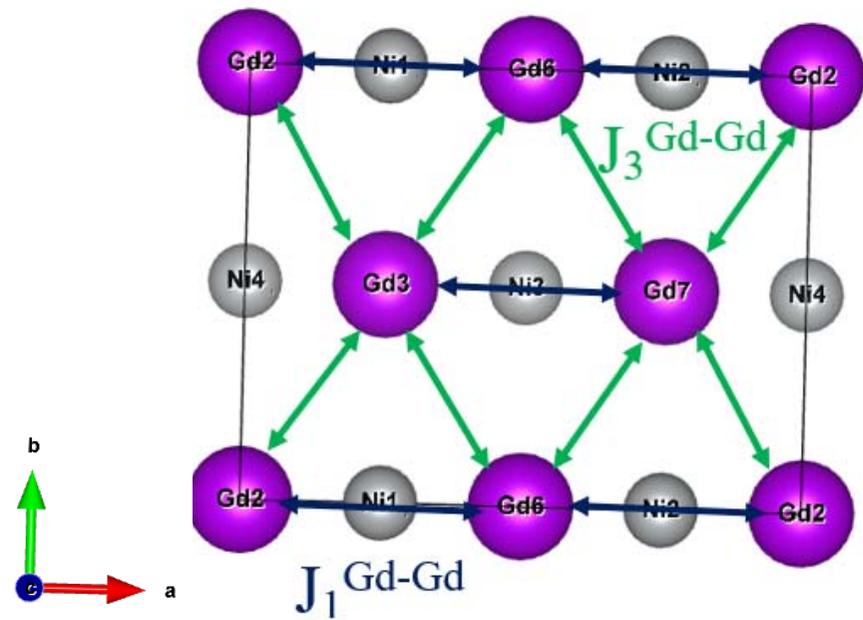
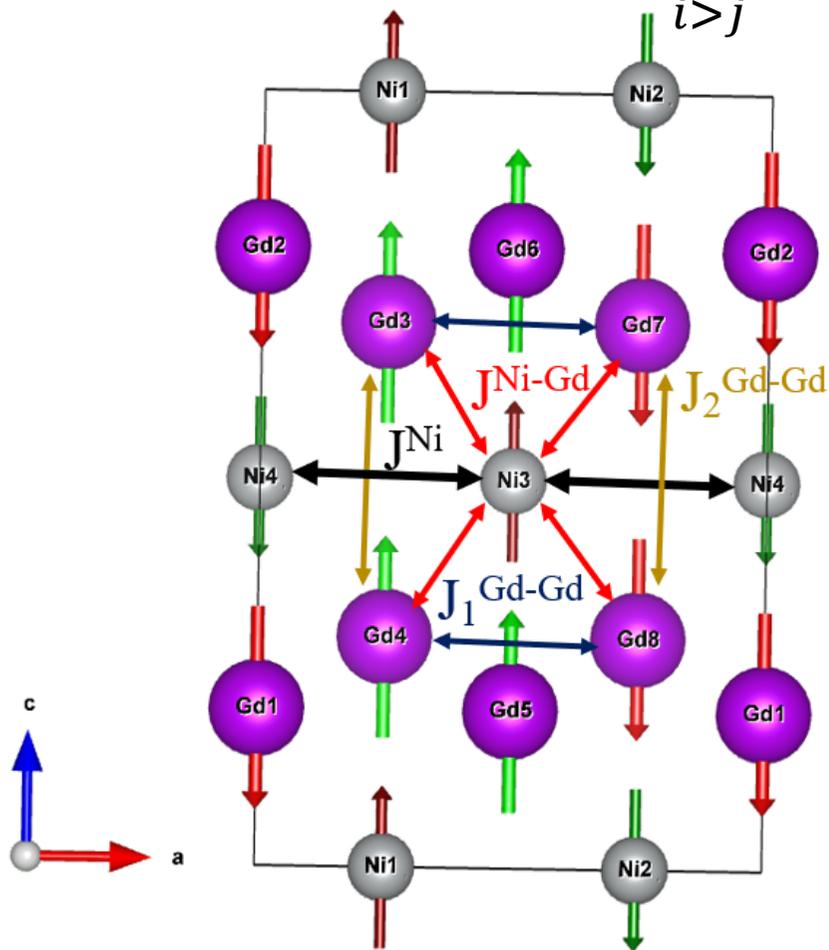
Экспериментальные данные

Измерение намагниченности $\text{Gd}_2\text{BaNiO}_5$ в сильном магнитном поле
Эксперимент на генераторе МК-1 проведён группой Кудасова Ю.Б.



Обменные параметры $\text{Gd}_2\text{BaNiO}_5$

$$H = \sum_{i>j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j + D \sum_{i(\text{Ni})} S_{z i}^2$$



Результаты расчёта

Рассчитанные величины обменных параметров:

- $J^{Ni} = 367 \text{ K}$
- $J^{Ni-Gd} = -39,7 \text{ K}$
- $J_1^{Gd-Gd} = 4,5 \text{ K}$, $J_2^{Gd-Gd} = -3,4 \text{ K}$, $J_3^{Gd-Gd} = 4,3 \text{ K}$

Для соединения Y_2BaNiO_5 $J^{Ni} = 255 \text{ K}$, $\Delta_{\text{Haldane}} = 74 \div 138 \text{ Тл}$

=> Для Gd_2BaNiO_5 $\Delta_{\text{Haldane}} = 175 \div 320 \text{ Тл}$ (+подмагничивание за счёт J^{Ni-Gd} ?)

Рассчитанная одноионная анизотропия

- $D^{Ni} = -2,8 \text{ K}$, $\frac{D}{J^{Ni}} \ll 1$, лёгкая ось намагничивания c
- Проводится дальнейший теоретический анализ магнитной структуры и ожидаются улучшенные результаты эксперимента. Планируется публикация результатов.

Спасибо за внимание!