

Аннотационная справка

о выполнении работ по теме 01-3-1137-2019/2023

«Теория сложных систем и перспективных материалов»

За отчетный период решены все запланированные задачи, включенные в ПТП ОИЯИ. По результатам исследований опубликовано 268 статей в рецензируемых журналах, 3 монографии и 6 глав в монографиях, 3 обзорных статьи, 56 статей в научных сборниках, представлено более 35 докладов на различных международных и российских конференциях, организован и проведен ряд международных совещаний. Среди наиболее важных результатов отметим следующие.

Изучена многодолинная зонная структура однослойных дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ), порождающая как внутрислоиные, так и междолинные экситоны. Идентифицируя экситоны неприводимыми представлениями их точечной группы симметрии, найдено экситон-экситонное взаимодействие, зависящее от симметрии взаимодействующих экситонов. Это взаимодействие является в общем отталкивающим, за исключением случая экситонов из разных долин, которые притягиваются, образуя при этом междолинный биэкситон. Установлена полуаналитическая зависимость энергии связи биэкситона от массы экситона и диэлектрических характеристик материала и окружающей среды. Данная теоретическая модель охватывает свойства взаимодействия экситонов и позволяет всесторонне изучать структуру и энергетические характеристики междолинного биэкситона в однослойных ДПМ.

Предложен механизм, позволяющий преодолеть известную дихотомию между долгоживущей спиновой поляризацией и быстрым переворотом спина в заданный момент времени. Рассмотрен образец подсоединенный к электрической цепи, создающей поле обратной связи, действующее на спины. Включая и выключая переменный квадратичный эффект Зеемана, можно реализовывать перевороты спинов с желаемым временем задержки. Предлагаемая техника регулирования переворотов спина может быть использована в квантовой обработке информации и спинтронике.

Теоретически исследовано малоугловое рассеяние (МУР) рентгеновских лучей, нейтронов и световых волн на ансамблях детерминированных фрактальных структур. Их положения в пространстве и ориентации предполагаются случайными. Стандартная методика обработки данных МУР позволяет извлечь только три характерных параметра системы: размер фрактала и нижний и верхний пределы фрактального диапазона. Показано, что самоподобие детерминированных фрактальных структур позволяет получить их дополнительные характеристики в реальном пространстве. Предложены и рассмотрены точно решаемые модели, описывающие МУР на таких системах. Разработанные модели позволяют понять, как извлечь дополнительную информацию о структуре фрактала и аналитически описать интенсивности МУР, а так же предлагают эффективные вычислительные алгоритмы. Изучены различия данных МУР для детерминированных и случайных фрактальных структур. Обсуждаются пределы применимости предложенных моделей и перспективы будущих исследований детерминированных фрактальных структур.

Выполнен численный расчёт для ряда материалов, используемых при радиационных исследованиях на имеющихся в ЛЯР и ЛНФ установках. Получены параметры аннигиляции

позитронов, позволяющие характеризовать структурные изменения вызванные облучением. Рассмотрены карбид бора B_4C и W_2B .

Характеристики структурного и связанного с ним магнитного фазового перехода в металлическом тербии, измеренные в условиях сильного внешнего давления группой Д.П. Козленко (ЛНФ ОИЯИ) получили количественное объяснение с применением методов теории функционала плотности.

В рамках кластерной теории возмущения рассчитаны спектральные свойства слабодопированной t - J модели для купратов. Показано, что возникновение квантовых осцилляций в плотности электронных состояний можно объяснить с помощью появления эффективно замкнутых электронных орбит в импульсном пространстве, возникающих за счет Брэгговского отражения электронов на волнах зарядовой плотности. Этот сценарий позволил полностью объяснить возможность возникновения квантовых осцилляций в системах сильно коррелированных электронов в псевдощелевой фазе.

Показано, что нарушение симметрии относительно обращения времени в $2d$ системе сильно коррелированных электронов приводит к возникновению топологического эффекта Холла — целочисленного квантового эффекта Холла в отсутствие внешнего магнитного поля.

Проведено теоретическое исследование поведения теплопроводности и электропроводности в перспективном материале – поликристаллическом графене. Показано, что роль границ зёрен в подавлении теплового и электрического транспорта может существенно возрастать в широкой области температур с уменьшением их размера. Также было обнаружено, что границы зёрен могут заметно подавлять тепловой и электрический транспорт даже при комнатной температуре в случае, если имеются сбои в углах разориентировки границ зёрен.

В рамках стохастического молекулярно-динамического моделирования развит метод генерации фторированных графеновых структур с настраиваемым типом распределения фтора. Электронные транспортные свойства фторированного графена исследованы в широком интервале степени фторирования и способа упорядочения. Обнаружена заметная корреляция между степенью иррегулярности в распределении графена и транспортными свойствами. В частности, предложенное рассмотрение позволило воспроизвести два свойства, наблюдаемые ранее экспериментально: электрон-дырочную асимметрию и пик в проводимости в районе 10% концентрации фтора.

Изучено влияние фактора поперечного размера туннельных наноконтактов на величину магнитосопротивления. Обнаружено резкое изменение туннельного магнитосопротивления в контактах с несовпадающим сечением, что объясняется особенностями пространственного распределения плотности электронов, которая различна для состояний основного и неосновного направления спинов. Полученные результаты имеют важные приложения для создания наноустройств, функционирующих на основе явления туннельного магнитного сопротивления.

Исследован переворот намагниченности ферромагнетика импульсами электрического тока в джозефсоновских контактах сверхпроводник/ферромагнитный изолятор/сверхпроводник на поверхности топологического изолятора. Показано, что такая система является перспективной для низкодиссипативной спинтроники из-за наличия жесткой связи между импульсом и спином квазичастицы в поверхностных состояниях топологического изолятора. Это свойство обеспечивает идеально сильную связь между орбитальными и

спиновыми степенями свободы, давая возможность переворота магнитного момента ферромагнетика импульсами электрического тока с амплитудой ниже критического джозефсоновского тока, что сильно снижает диссипацию энергии в системе. Предложен способ одновременного электрического детектирования переворота.

Показана возможность непрямого захвата магнитной прецессии в SFS переходе джозефсоновскими осцилляциями под действием внешнего периодического сигнала, что выражается возникновением ступенек синхронизации на зависимости намагниченности от тока через переход. Положение ступеньки определяется частотой излучения и формой резонансной кривой. В переходах с сильной спин-орбитальной связью на вольт-амперной характеристике появляются состояния с отрицательным дифференциальным сопротивлением, что приводит к дополнительной ступеньке синхронизации. Обнаружено, что соответствующие осцилляции имеют ту же частоту, что и осцилляции на первой ступени, но имеют другую амплитуду и другую зависимость от частоты излучения. Это позволяет управлять не только частотой, но и амплитудой магнитной прецессии в области захвата

Получены точные плотности стягиваемых и нестягиваемых петель в модели $O(1)$ на полосе квадратной решетки, свернутой в бесконечный цилиндр с конечным четным периметром основания $L=2N$. Они также равны плотностям критических перколяционных кластеров на повернутой на 45 градусов квадратной решетке, свёрнутой в цилиндр, которые не охватывают и охватывают цилиндр, соответственно. Результаты представлены как явные рациональные функции N , принимающие рациональные значения при любом N . Их асимптотические разложения в пределе больших N имеют иррациональные коэффициенты, воспроизводящие в ведущих порядках полученные ранее результаты. Данный результат даёт уникальный пример точного вычисления наблюдаемой в ограниченной системе, которая становится критической в пределе бесконечного размера.

Рассмотрена модель димера на прямоугольнике со свободными граничными условиями. Получены точные выражения для коэффициентов в асимптотическом разложении свободной энергии по объему до 22-го порядка. Показано, что соотношение коэффициентов для открытой полосы и квадрата стремится к $1/2$. Кроме того, предсказано, что коэффициенты в разложении свободной энергии для произвольных прямоугольников связаны с коэффициентами для квадрата. Также получено простое точное выражение для свободной энергии открытой полосы произвольной ширины. В рамках конформной теории поля показано, что угловой вклад в свободную энергию для модели димера на прямоугольных решетках со свободными граничными условиями равен нулю.

Описана статистика лавинных потоков в модели «Raise and peel». Построены функции больших уклонений, описывающие динамику этих потоков в пределе большого времени. Явно вычислены их первые кумулянты, такие как среднее, дисперсия и т.д. Описан фазовый переход, происходящий в модели при отклонениях среднего по времени потока от его наиболее вероятной величины

Описано семейство состояний типа Шрёдингерской кошки в виде суперпозиций когерентных состояний гармонического осциллятора с коэффициентами, определяемыми квадратичными суммами Гаусса. Эти состояния возникают как собственные функции понижающих операторов, возникающих в результате канонических преобразований алгебры Гейзенберга-Вейля, ассоциированных с обычным и дробным преобразованием Фурье. Первый член этого семейства задается хорошо известным когерентным состоянием Юрке-Столера.

Методом ренормгруппы и эpsilon-разложения рассчитан динамический критический индекс z , определяющий скорость релаксации параметра порядка ферромагнетика в окрестности точки фазового перехода (критическое замедление). Вычисления выполнены в пятом порядке эpsilon-разложения. Полученное в результате пересуммирования значение этого индекса находится в хорошем согласии как с результатами компьютерного моделирования, так и эксперимента.

Руководитель темы

В.А. Осипов