

Пироксены на основе кобальта: новый объект для исследования эффектов Китаевской физики

П.А. Максимов¹, А.В. Ушаков, А.Ф. Губкин, Г.Дж. Редхаммер², С.М. Винтер³, А.И. Колесников⁴, А.М. дос Сантос⁴, Ж. Гэй⁴, М.А. Макгир⁴, А. Подлесняк⁴, С.В. Стрельцов

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

¹Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия

²Университет Зальцбурга, г. Зальцбург, Австрия

³Университет Уэйк Форест, г. Нью Йорк, США

⁴Национальная лаборатория Ок-Ридж, г. Ок-Ридж, США

Проведено комплексное исследование магнитных свойств пироксена на основе кобальта $\text{SrCoGe}_2\text{O}_6$ при помощи измерений магнитных и тепловых свойств, неупругого рассеяния нейтронов, а также первопринципных расчетов и теоретического моделирования в рамках линейной спин-волновой теории. Измерения теплоемкости и неупругое рассеяние тепловых нейтронов подтвердили, что магнитные свойства данного соединения определяются дублетным основным состоянием с псевдоспином $J_{\text{eff}}=1/2$, что является необходимым условием для реализации модели Китаева. Эксперимент по неупругому рассеянию холодных нейтронов продемонстрировал наличие щели в спектре магнитных возбуждений $\text{SrCoGe}_2\text{O}_6$ при том, что спектр возбуждений одномерного гейзенберговского антиферромагнетика должен быть бесщелевым. Первопринципные расчеты и моделирование в рамках линейной спин-волновой теории показали, что спектр магнитных возбуждений $\text{SrCoGe}_2\text{O}_6$ может быть описан в рамках модели Китаева-Гейзенберга. Энергия Китаевского обмена оказалась сравнимой с энергией гейзенберговского обмена $K/|J|=0.96$ и, следовательно, семейство пироксенов на основе кобальта является новым перспективным объектом для изучения эффектов Китаевской физики.

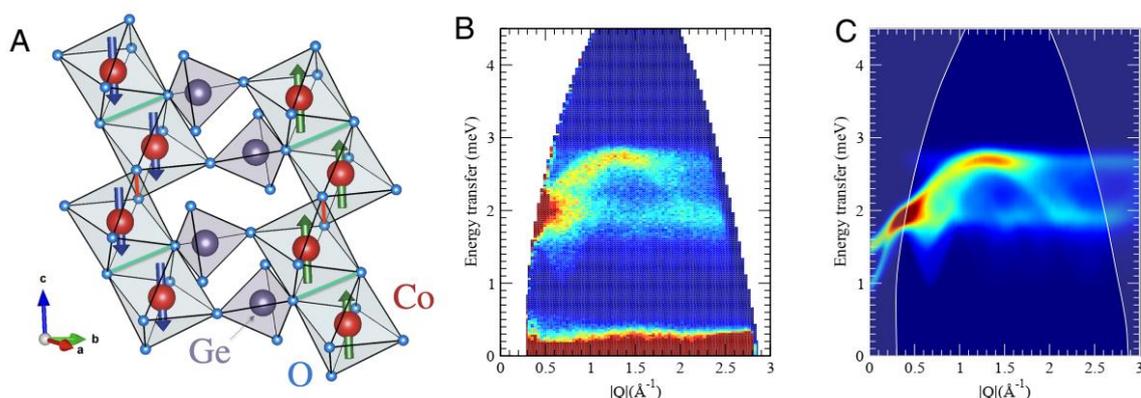


Рисунок 1 – (А) Кристаллическая и магнитная структура $\text{SrCoGe}_2\text{O}_6$, (В) данные неупругого рассеяния нейтронов на порошковом образце $\text{SrCoGe}_2\text{O}_6$, (С) результат моделирование спектра магнитных возбуждений соединения $\text{SrCoGe}_2\text{O}_6$ в рамках спин-волновой теории.

Публикация:

1. [Cobalt-based pyroxenes: A new playground for Kitaev physics](#) / P.A. Maksimov, A.V. Ushakov, A.F. Gubkin, G.J. Redhammer, S.M. Winter, A.I. Kolesnikov, A.M. dos Santos, Z. Gai, M.A. McGuire, A. Podlesnyak, S.V. Streltsov – Текст: непосредственный // PNAS. — 2024. — V. 121. — P. e2409154121.

Работа выполнена по теме шифр «Поток» и по проекту РНФ 23-12-00159.

Актуальность исследования: Материалы с Китаевскими взаимодействиями являются одним из наиболее горячих направлений в современной физике конденсированного состояния, поскольку в таких материалах могут наблюдаться магнитные состояния типа «квантовая спиновая жидкость» и экзотические квазичастицы известные, как «майорановские фермионы». Квантовые вычислительные системы, основанные на «майорановских фермионах» могут быть устойчивы к явлению квантовой декогеренции и, следовательно, экспериментальное воплощение подобных систем открывает путь к реализации предсказанных А. Китаевым «топологически защищенных» квантовых вычислений.

Цель нашего исследования: Провести экспериментальное и теоретическое исследование спектра возбуждений в магнитной подсистеме соединения $\text{SrCoGe}_2\text{O}_6$ и проверить гипотезу о реализации в данном соединении модели Китаева.

Задачи исследования:

- 1) Синтезировать и аттестовать порошковый образец $\text{SrCoGe}_2\text{O}_6$; 2) Провести магнитные измерения и измерения тепловых свойств; 3) провести экспериментальное и теоретическое исследование схемы расщепления кристаллическим полем мультиплетта иона Co^{2+} ($L=3$, $S=3/2$); 4) провести экспериментальное и теоретическое исследование спектра возбуждений в магнитной подсистеме $\text{SrCoGe}_2\text{O}_6$

Объект исследования: порошковый образец пироксена на основе кобальта $\text{SrCoGe}_2\text{O}_6$.

Методы исследования: рентгеновская дифракция, магнитные измерения, измерения теплоемкости, неупругое рассеяние тепловых нейтронов., неупругое рассеяние холодных нейтронов, первопринципные расчеты, теоретическое моделирование в рамках линейной спин-волновой теории.

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

1. Проведены измерения магнитных и тепловых свойств на порошковом образце $\text{SrCoGe}_2\text{O}_6$, построена магнитная фазовая диаграмма, проведена оценка магнитной энтропии, показано, что основное состояние является дублетным с псевдоспином $J_{\text{eff}}=1/2$

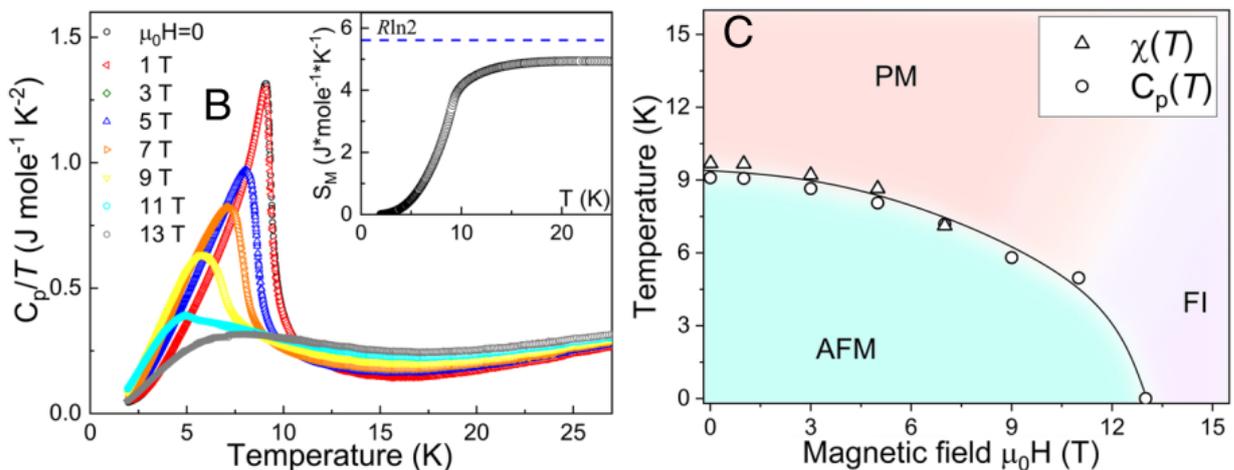


Рисунок – 1 температурные зависимости теплоемкости для соединения $\text{SrCoGe}_2\text{O}_6$ измеренные в приложенных магнитных полях до 13Т, магнитная фазовая диаграмма $\text{SrCoGe}_2\text{O}_6$, построенная по данным теплоемкости и магнитной восприимчивости.

2. Проведено экспериментальное исследование схемы расщепления кристаллическим полем мультиплета иона Co^{2+} ($L=3, S=3/2$).

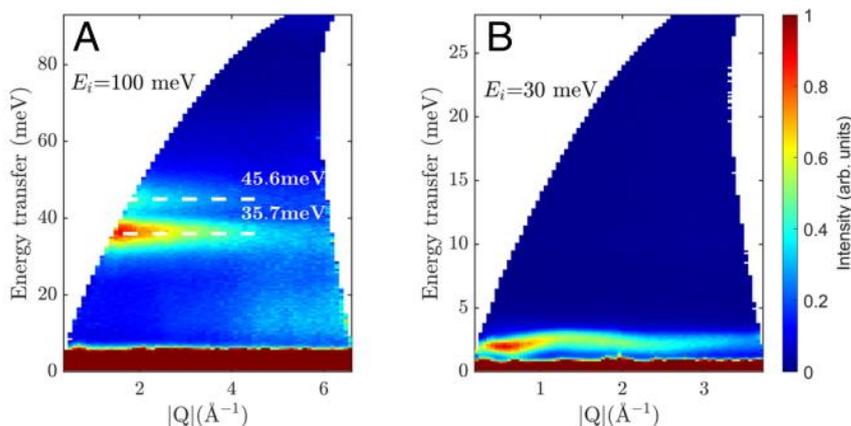


Рисунок - 2 Спектры неупругого рассеяния тепловых нейтронов для порошкового образца $\text{SrCoGe}_2\text{O}_6$

Экспериментальные данные неупругого рассеяния нейтронов демонстрируют два уровня кристаллического поля с энергиями 35.7 мэВ и 45.6 мэВ, которые хорошо изолированы от дублетного основного состояния иона Co^{2+} в октаэдрическом окружении.

3. Проведено экспериментальное и теоретическое исследование спектра возбуждений в магнитной подсистеме $\text{SrCoGe}_2\text{O}_6$

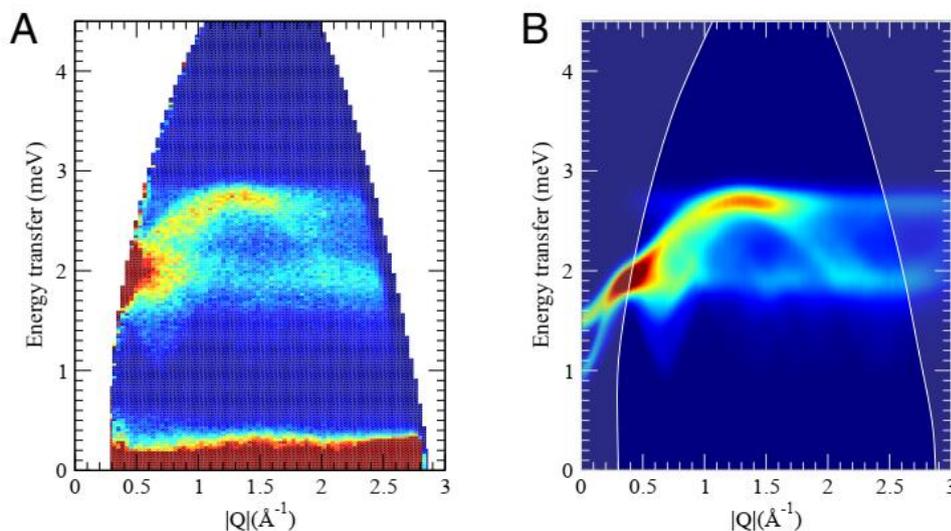


Рисунок – 3 (А) Спектр неупругого рассеяния холодных нейтронов для порошкового образца $\text{SrCoGe}_2\text{O}_6$, (В) модельный спектр, полученный в рамках линейной спин-волновой теории.

Первопринципные расчеты и теоретическое моделирование данных неупругого рассеяния нейтронов в рамках линейной спин-волновой теории с использованием модели Китаева-Гейзенберга позволили воспроизвести экспериментальные результаты со следующими параметрами обменных взаимодействий:

Method	J	K	$ K/J $	Γ	Γ'	J_1	J_2
GGA+U+SOC	-1.20	1.12	0.93	-	-	0.74	1.06
LSWT	-0.87	0.83	0.96	0.43	-0.26	0.40	0.60

Выводы:

Комплексное экспериментальное и теоретическое исследование магнитных свойств пироксена на основе кобальта $\text{SrCoGe}_2\text{O}_6$ показало, что данный класс соединений является перспективной платформой для изучения эффектов Китаевской физики. Энергия Китаевского обмена в данном соединения сравнима с энергией гейзенберговского обмена. Похожие результаты были ранее получены для соединения RuCl_3 , которое является референтным китаевским материалом.