

# Резонансная мода в валентно-нестабильных системах

К.С.Немковский, П.А.Алексеев

Лаборатория нейтронных и синхротронных исследований,  
Институт сверхпроводимости и физики твердого тела,  
РНЦ "Курчатовский институт"

## **Работа выполнена в сотрудничестве с:**

**РНЦ «КИ»:**

В.Н.Лазуков

Е.В.Нефедова

И.Т.Садиков

А.В.Рыбина

**LLB, ILL, RAL:**

J.-M.Mignot

A.Ivanov

R.Bewley,

R.Eccleston

**ИПМ НАНУ,  
Hiroshima University,  
Tohoku University,**

**ФТИ им. Иоффе:**

Н.Ю.Шицевалова,

**Ю.Б.Падерно,**

F.Iga,

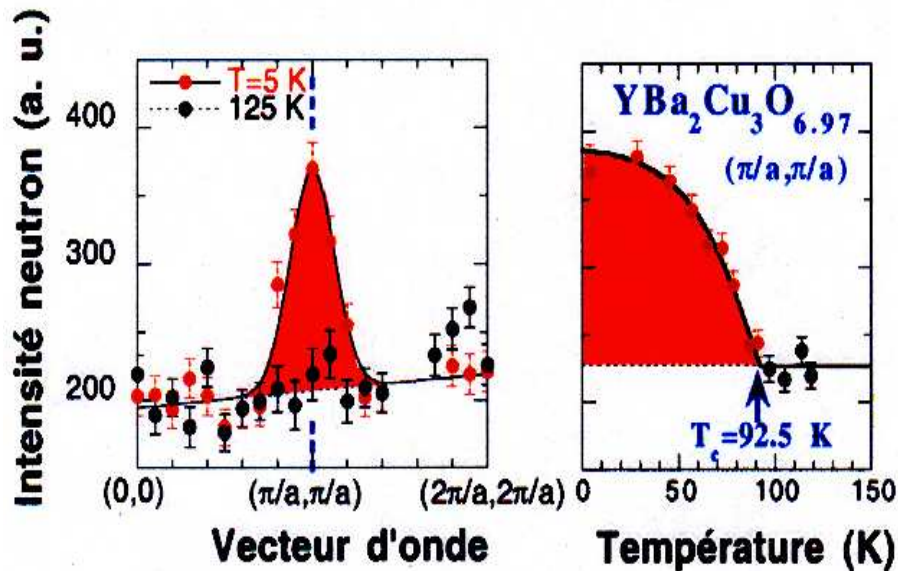
T.Takabatake

А.В.Голубков

# "Resonant mode" in HTSC magnetic excitation spectra

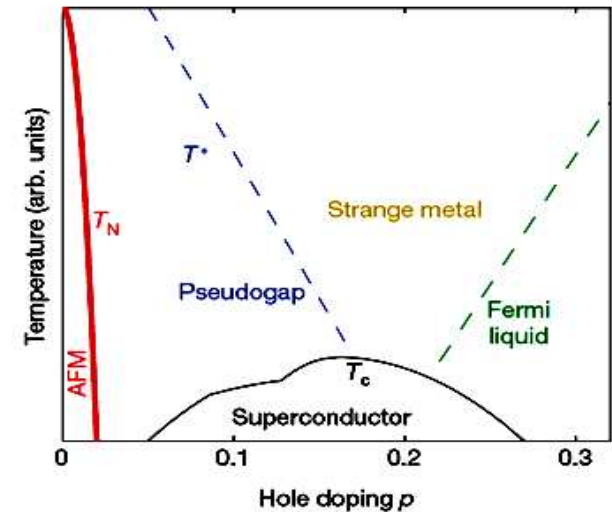
## YBCO

Q- and T- dependence of magnetic intensity at **40 meV** in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.97}$



J. Rossat-Mignod, L.P. Regnault, C. Vettier, P. Bourges, P. Burlet, J. Rossy, J.Y. Henry, G. Lapertot, Physica C 185-189, 86 (1991)  
 Y. Sidis, S. Pailhes, B. Keimer, P. Bourges, C. Ulrich, L.P. Regnault, Phys. Stat. Sol.(b) 241, 6, 1204-1210 (2004)

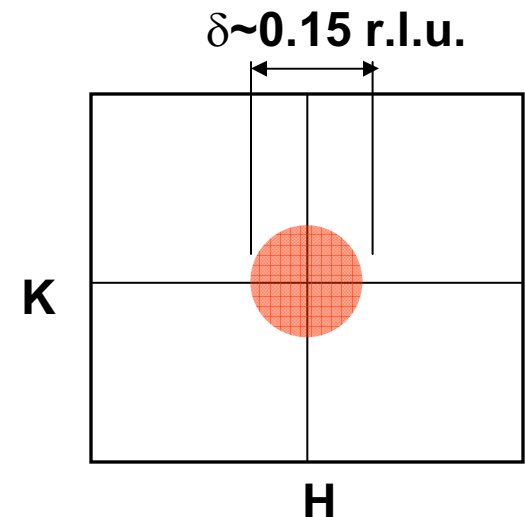
Generalized phase diagram of HTSC

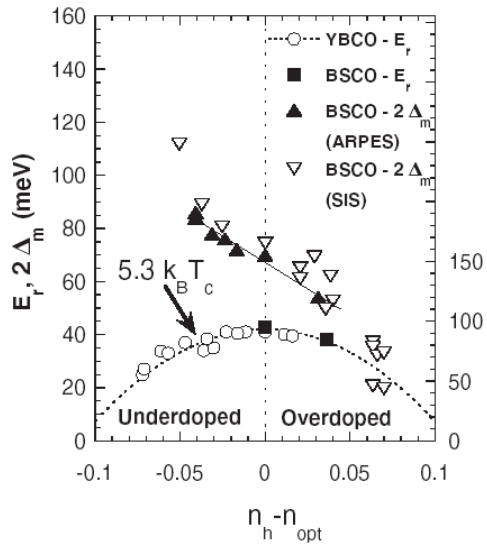


Optimally doped superconductor

Suppressed without energy shift

Localization in Q-space near  $(\pi/a, \pi/a)$ , two dimensional





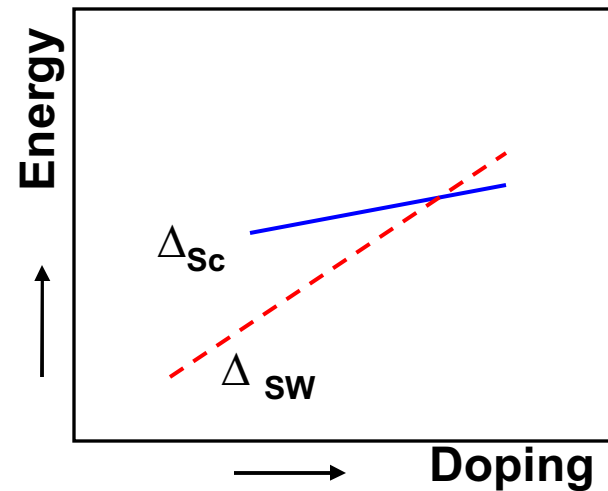
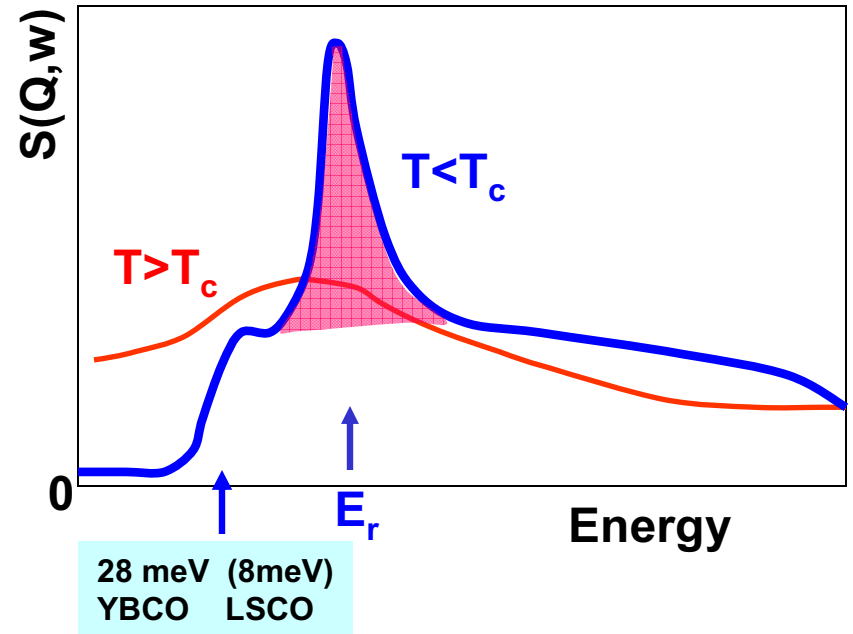
**Correlation of  $E_r$  and hole density ( $T_c$ )**

**Transformation from spin-fluctuative to gap like spectrum due to SC state formation**

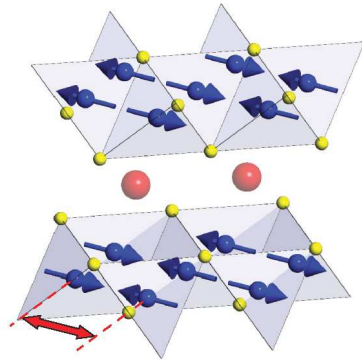
1. [D.K.Morr, D.Pines, Phys. Rev. Lett. 81 \(5\) 1086 \(1998\)](#)  
[Ar. Abanov, A.V.Chubukov, Phys. Rev. Lett. 83 \(8\) 1652 \(1999\)](#)  
[I.Sega, P.Prelovsek, J.Bonca, Phys.Rev.B 68 054524 \(2003\)](#)

The resonance mode is considered as related to  $S=1$  exciton-like spin-state, precursor of spin-wave in AFM state of YBCO with energy  $\sim \xi^{-1}$ , inversed correlation length.

Its damping is defined by both gaps: SC ( $T_c$ ) and pseudogap ( $T^*$ )

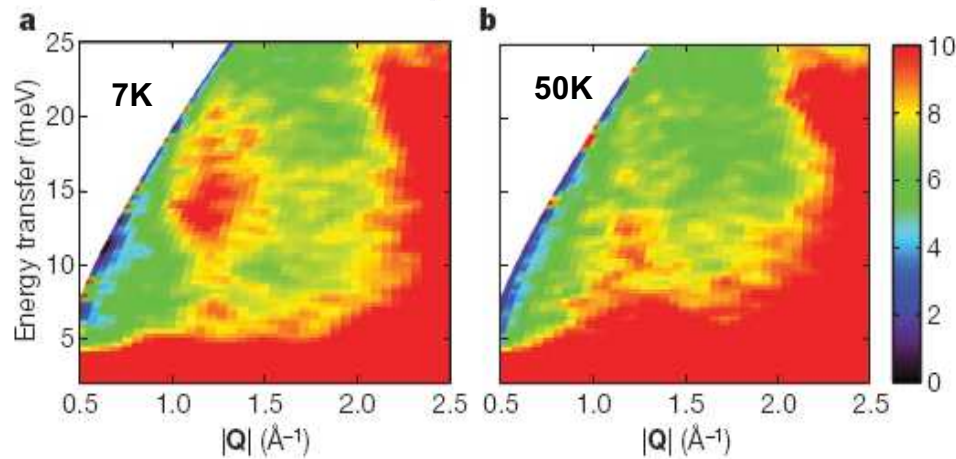


# Ba<sub>0.6</sub>K<sub>0.4</sub>Fe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>, T<sub>c</sub>=38K

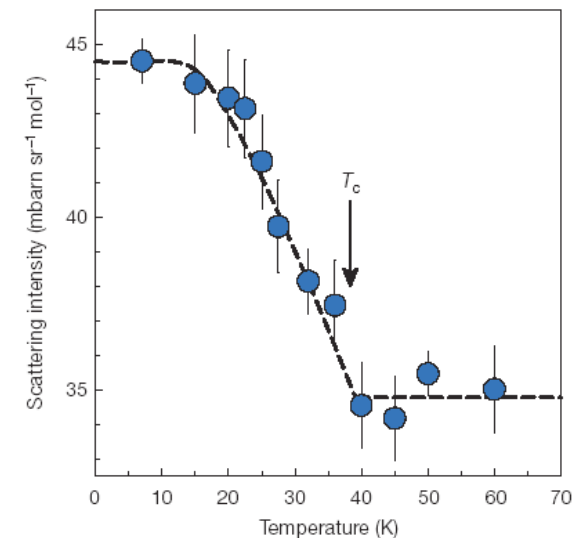


BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> is antiferromagnetically ordered with Q<sub>AF</sub> = 1.15 Å<sup>-1</sup>

**Figure 1 | The crystal structure of Ba<sub>0.6</sub>K<sub>0.4</sub>Fe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>.** The unit cell of Ba<sub>0.6</sub>K<sub>0.4</sub>Fe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> contains two layers of Fe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> tetrahedra (Fe, blue spheres; As, yellow spheres), separated by planes of barium or potassium atoms (red spheres). The blue arrows show the ordering of the iron spins observed in the undoped parent compound BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> (ref. 19). The atomic distance of 2.77 Å that characterizes both the antiferromagnetic modulation and the newly observed resonant excitation is indicated by the red double-headed arrow.



**Figure 2 | Resonant spin excitation in Ba<sub>0.6</sub>K<sub>0.4</sub>Fe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>.** Inelastic neutron scattering, measured using an incident neutron energy of 60 meV at temperatures below (a, 7 K) and above (b, 50 K) T<sub>c</sub>, shows the development of a magnetic excitation in the superconducting phase at an energy transfer of 14 meV and a momentum transfer of 1.15 Å<sup>-1</sup>. The strong scattering at low energy transfers arises from the tail of strong elastic nuclear scattering, and the strong increase in scattering at higher values of Q is due to inelastic phonon scattering. The colour scale indicates scattering intensity in units of millibarns per steradian per millielectronvolt per mole.



**Figure 4 | Temperature dependence of the resonant spin excitation.** The inelastic neutron scattering intensity from Ba<sub>0.6</sub>K<sub>0.4</sub>Fe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> integrated over Q in the range 1.0–1.3 Å<sup>-1</sup> and over ω in the range 12.5–17.5 meV. The integration range corresponds to the region of maximum intensity of the resonant excitation observed below T<sub>c</sub> (Fig. 2). The error bars are derived from the square root of the raw detector counts. The dashed line is a guide to the eye below T<sub>c</sub> and shows the average value of the integrals above T<sub>c</sub>.

A. D. Christianson<sup>1</sup>, E. A. Goremychkin<sup>2,3</sup>, R. Osborn<sup>2</sup>, S. Rosenkranz<sup>2</sup>, M. D. Lumsden<sup>1</sup>, C. D. Malliakas<sup>2,4</sup>, I. S. Todorov<sup>2</sup>, H. Claus<sup>2</sup>, D. Y. Chung<sup>2</sup>, M. G. Kanatzidis<sup>2,4</sup>, R. I. Bewley<sup>3</sup> & T. Guidi<sup>3</sup>

## ВТСП ↔ Системы с валентной нестабильностью

Аналогичные “резонансной моде” возбуждения были обнаружены и детально исследованы в ряде систем с нестабильной валентностью на основе РЗ элементов (*Yb, Sm, Eu, Ce*).

Наиболее ярко характерные особенности этих возбуждений проявляются в промежуточно-валентных полупроводниках (т.н. кондо-изоляторах).

## Данная работа

Детальное исследование классического кондо-изолятора  $YbV_{12}$  и двух кондо-изоляторов с "сильной" промежуточной валентностью -  $SmB_6$  и  $Sm_{1-x}Y_xS$ .

Исследования магнитной (спиновой) динамики на сериях поли- и монокристаллических образцов. Измерения в широком энергетическом интервале, от квазиупругого рассеяния до межмультиплетных переходов.

TOF и TAS спектрометры, эксперименты с анализом поляризации нейтронов.

# Что такое кондо-изоляторы

CeNiSn, Ce<sub>3</sub>Bi<sub>4</sub>Pt<sub>3</sub>,  
Ce<sub>3</sub>Sb<sub>4</sub>Pt<sub>3</sub>, CeRhSb, ...  
YbB<sub>12</sub> !  
SmB<sub>6</sub>, (SmS)  
U<sub>3</sub>Sb<sub>4</sub>Pt<sub>3</sub>, UNiSn, ...

“Высокотемпературный” предел:

плохой металл с локализованными магнитными моментами на *R3* ионах и сильными спиновыми флуктуациями

“Низкотемпературный” предел (основное состояние) :

полупроводник (щель  $\sim 100$  К) с нулевым магнитным моментом

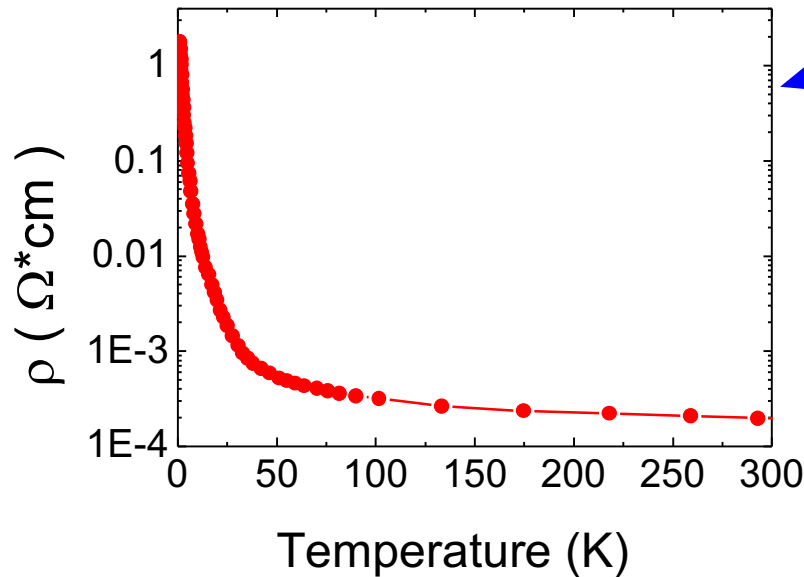
Большинство систем – с нецелочисленной заселенностью *f*-оболочки (промежуточно-валентное состояние)

Специфические свойства определяются динамическими эффектами :

нейтронная спектроскопия – эффективный инструмент!

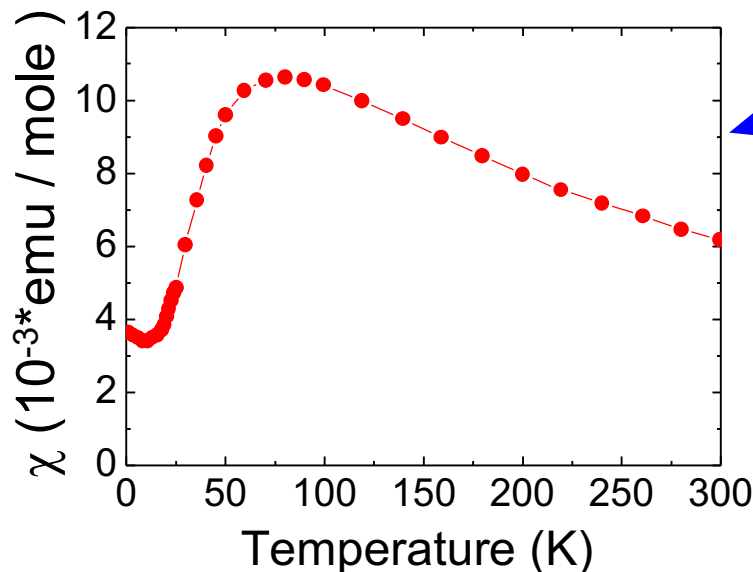


## Режим кондо-изолятора в $YbV_{12}$ : переход металл-полупроводник и парамагнетик-немагнетик



▲ Электросопротивление,  
Takabatake et.al., 1998

ниже  $T^* \sim 50\text{-}80\text{K}$  формируется щель  
сопротивление демонстрирует  
активационное поведение,  $2\Delta_p = 12 \text{ meV}$



▲ Магнитная восприимчивость,  
Iga et.al., 1999

ниже  $T^* \sim 80\text{K}$   $\chi(T)$  отклоняется от  
зависимости типа Кюри-Вейсса,  
резко уменьшается и выходит  
на константу

## Детальные исследования спиновой динамики (спектров магнитных возбуждений) в $YbV_{12}$

Образцы:  $Yb_{1-x}(Lu,Er)_x^{11}B_{12}$  (99.5%  $^{11}B$ )

$YbV_{12}$ ,  $Yb_{0.8}Lu_{0.2}B_{12}$  - монокристаллы (Hiroshima University, Japan)

$YbV_{12}$ ,  $Yb_{0.9}Er_{0.1}B_{12}$ ,  $Yb_{1-x}Lu_xB_{12}$  - поликристаллы

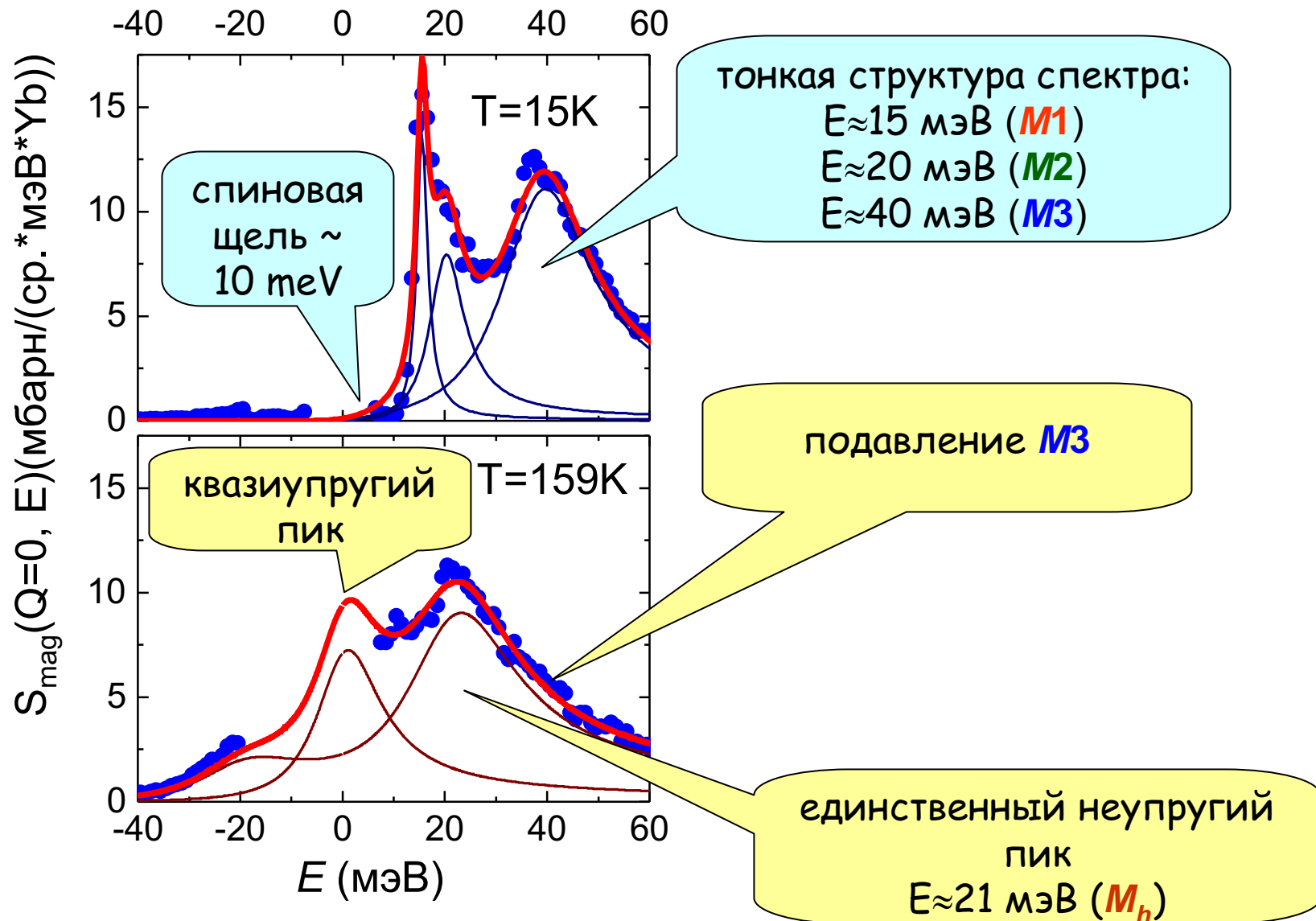
( $x=0.25, 0.75, 0.9$ )

(ИПТМ НАНУ, Киев, Украина)

### Методика: неупругое рассеяние нейтронов

- спектрометр по времени пролета HET (ISIS, RAL, UK)  
 $E = -40-65$  мэВ,  $T = 15-250$  К
- трехосный спектрометр 2T (LLB, France)  
 $E = 5-35$  мэВ,  $T = 15-80$  К
- трехосный спектрометр с поляризационным анализом IN20 (ILL, France):  
 $E = 10-60$  мэВ,  $T = 5-125$  К

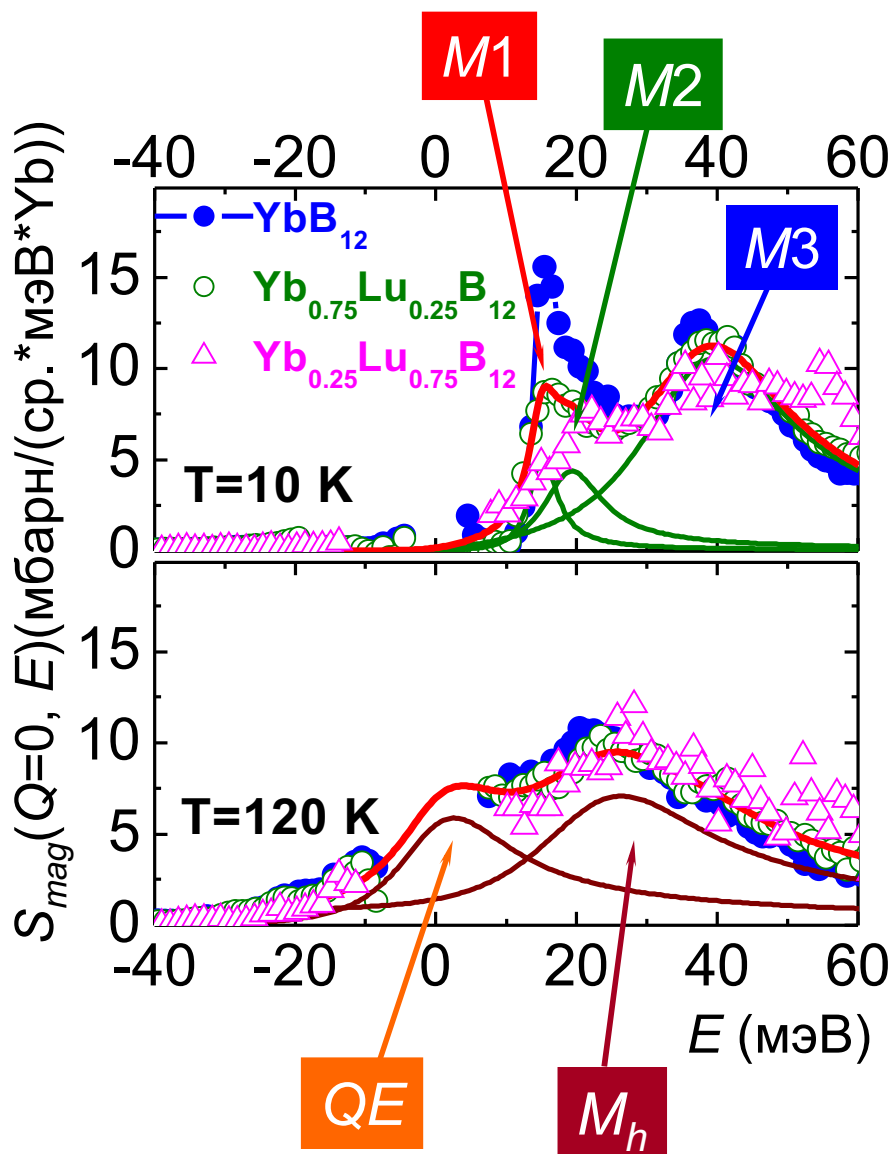
# Спектр магнитных возбуждений в $YbV_{12}$



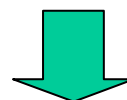
Вопросы к спектрам магнитных возбуждений  
поликристаллического  $\text{YbV}_{12}$ :

- Какова природа и свойства тонкой структуры спектра вблизи края щели, а также собственно спиновой щели?
- Как и почему эта структура исчезает при повышении температуры?

## Влияние нарушения регулярности РЗ подрешетки на спектр $YbV_{12}$ (поликристаллические образцы)



➔ Нарушение регулярности РЗ подрешетки приводит к демпфированию  $M1$ , но не влияет на спиновую щель и возбуждения  $M2$  и  $M3$ .



✂ Формирование спиновой щели и возбуждений  $M2$  и  $M3$  обусловлено одноузельными эффектами.  
 $M1$  является кооперативным.

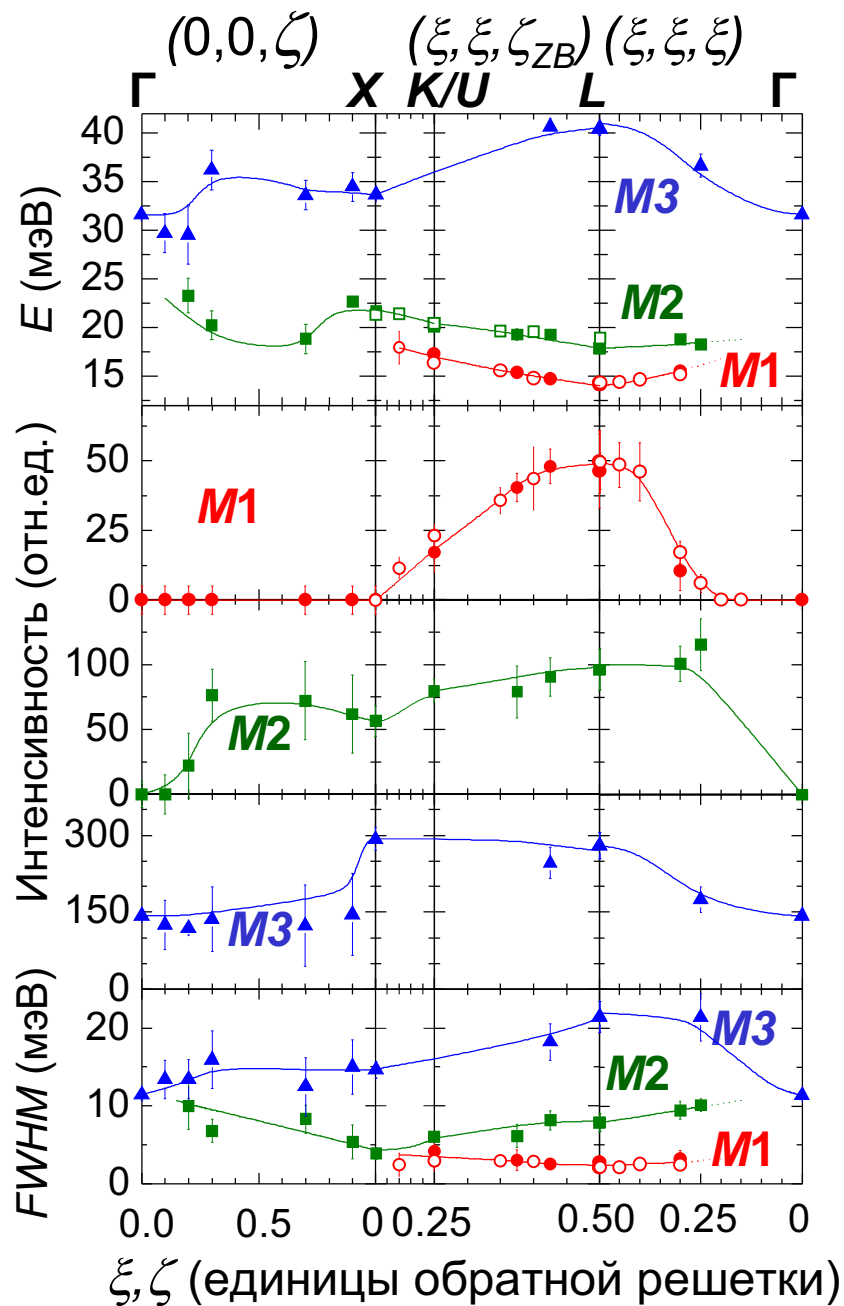
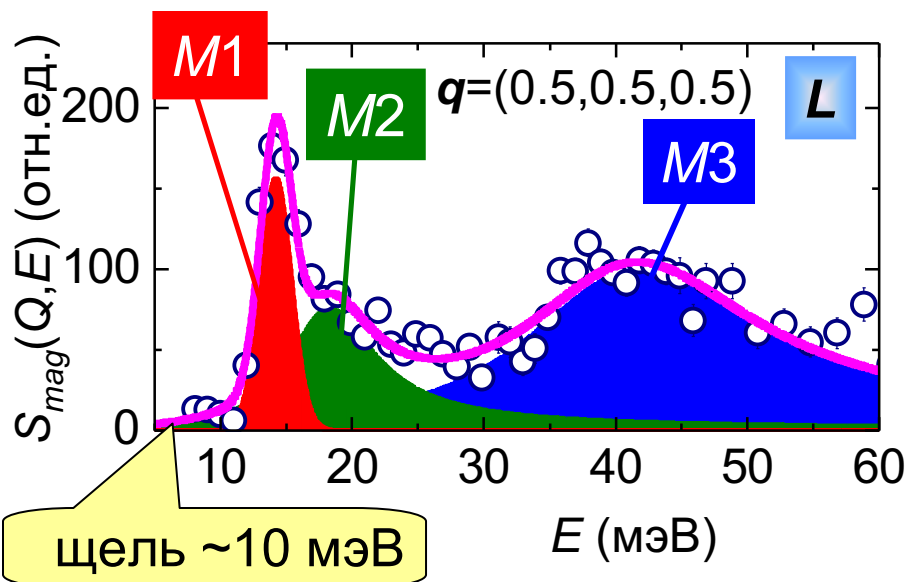
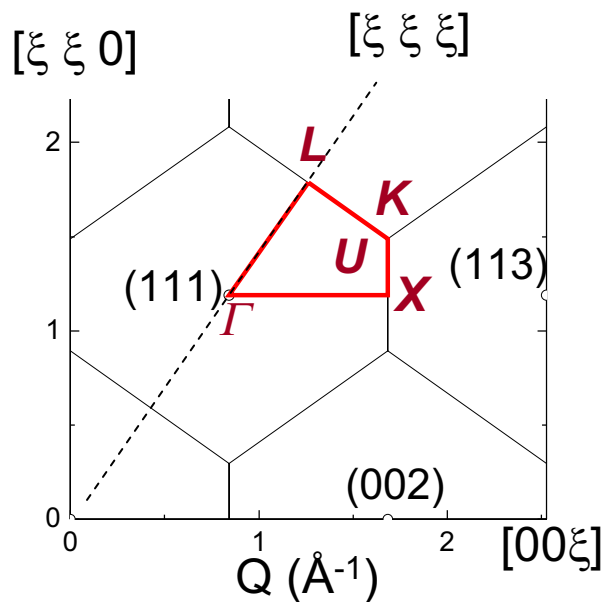
Высокотемпературный режим является чисто одноузельным (спиновые флуктуации).

Из спектров поликристаллического  $UvB_{12}$   
мы узнали:

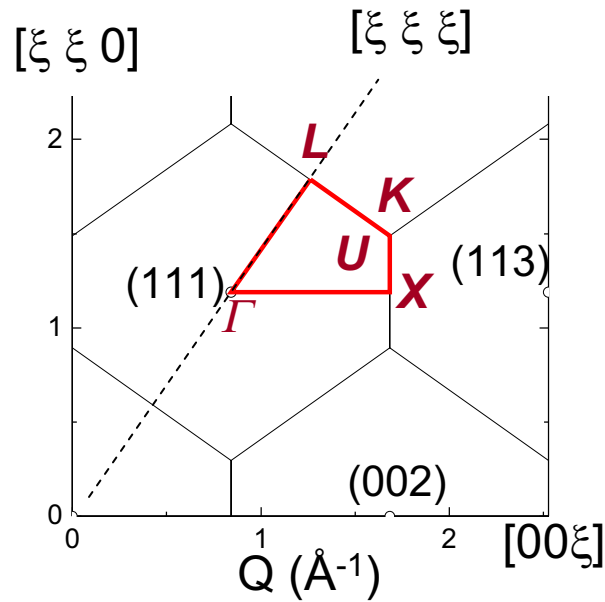
- Тонкая структура спектра вблизи края щели имеет сложную комплексную природу и, по крайней мере, частично, связана с кооперативными эффектами.

- При увеличении температуры (выше 50...100К) происходит переход в одноузельный режим с быстрыми ( $T_{sf} \sim 100K$ ) спиновыми флуктуациями.

# Дисперсия магнитных возбуждений в $YbV_{12}$ при $T=5K$



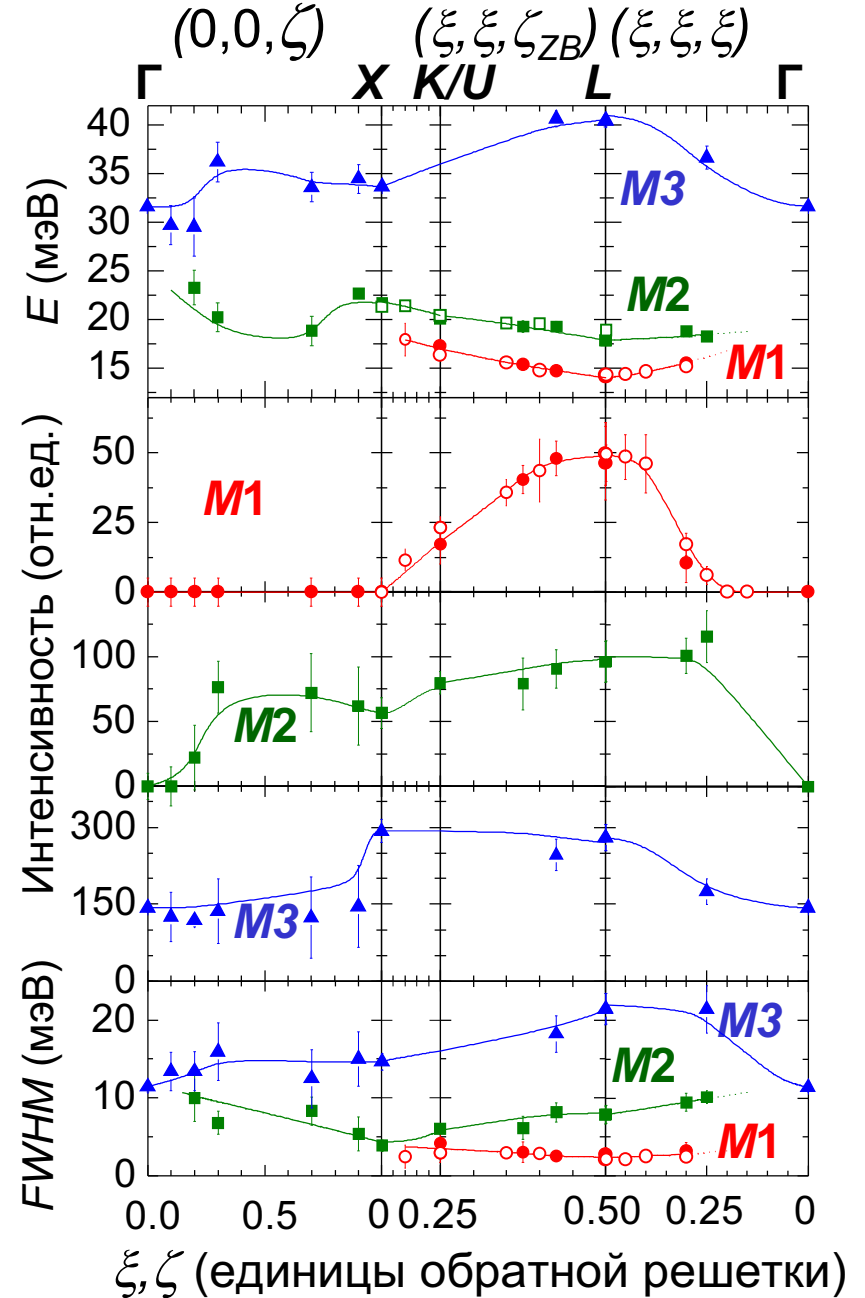
# Дисперсия магнитных возбуждений в $YbV_{12}$ при $T=5K$



**M1** имеет минимум энергии и максимум интенсивности в  $L$ -точке (АФМ характер).

**M2** и **M3** распределены по зоне Бриллюэна более равномерно

Ширина **M1** определяется приборным разрешением

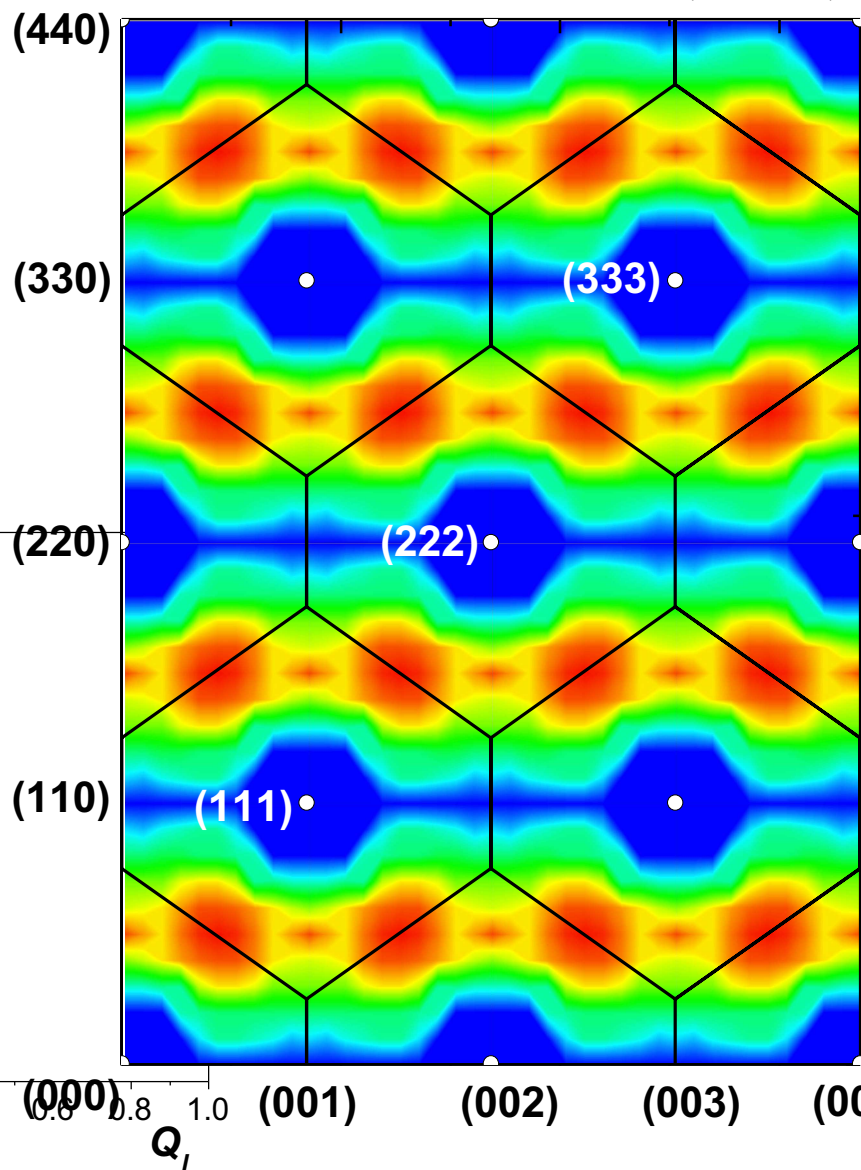




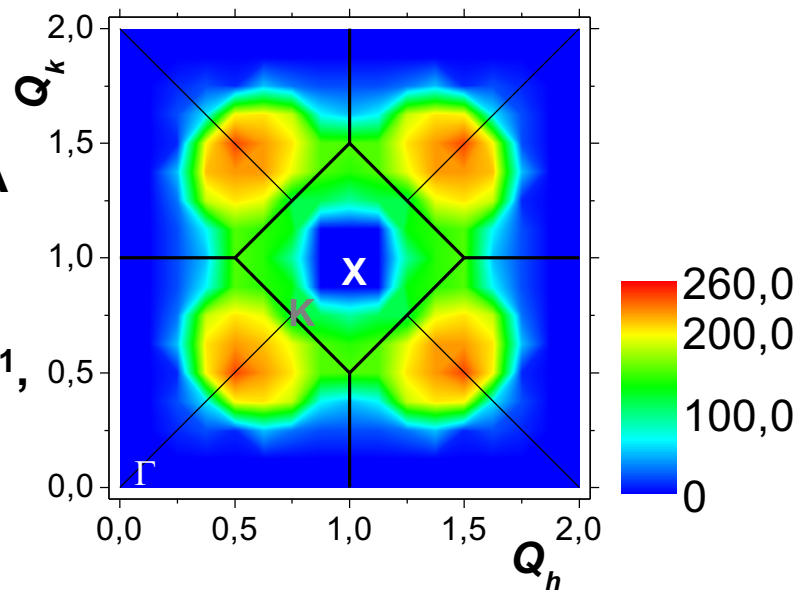
# Интерполяция распределения интенсивности для M1 ( $E \sim 15$ мэВ)

$a = 7.47 \text{ \AA}$   
 $d_1 = 5.28 \text{ \AA}$   
 $d_{\text{interplane}} = 3.73 \text{ \AA}$

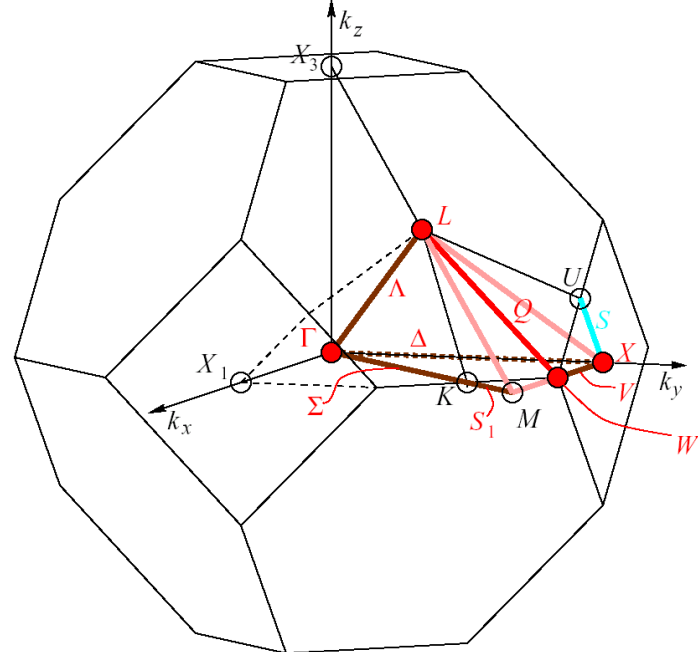
$\Gamma_{\parallel} = 0.58 \text{ \AA}^{-1}$ ,  $\xi_{\parallel} = 3.4 \text{ \AA}$



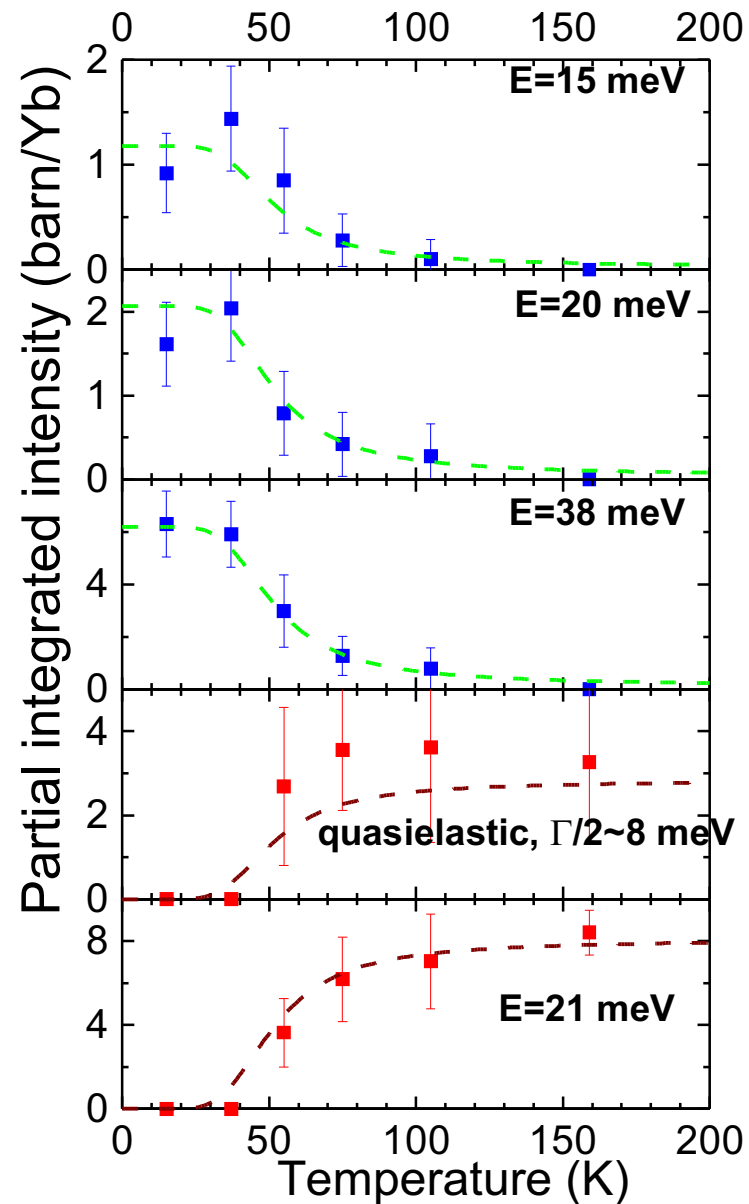
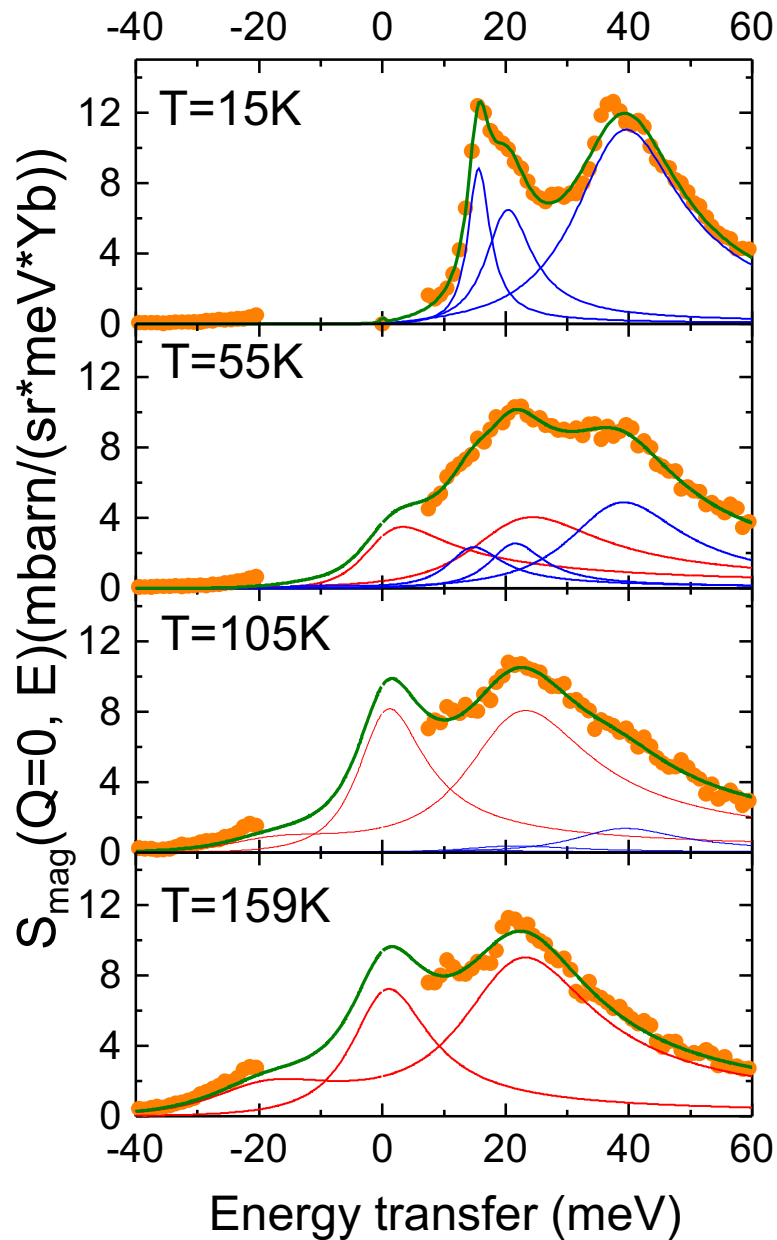
$\Gamma_{\perp} = 0.37 \text{ \AA}^{-1}$ ,  
 $\xi_{\perp} = 5.6 \text{ \AA}$



Brillouin zone

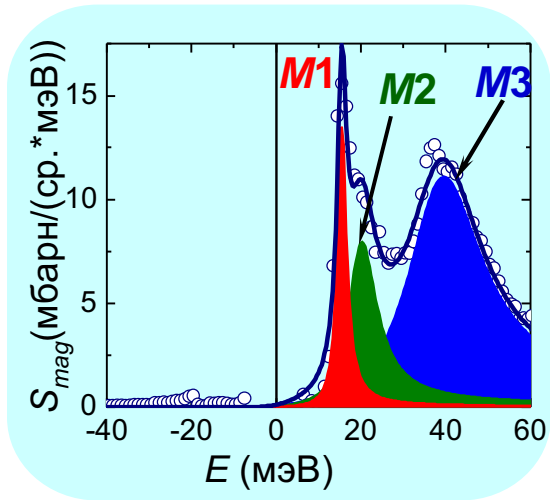


# YbB<sub>12</sub> dynamical magnetic response: temperature evolution of spectral components

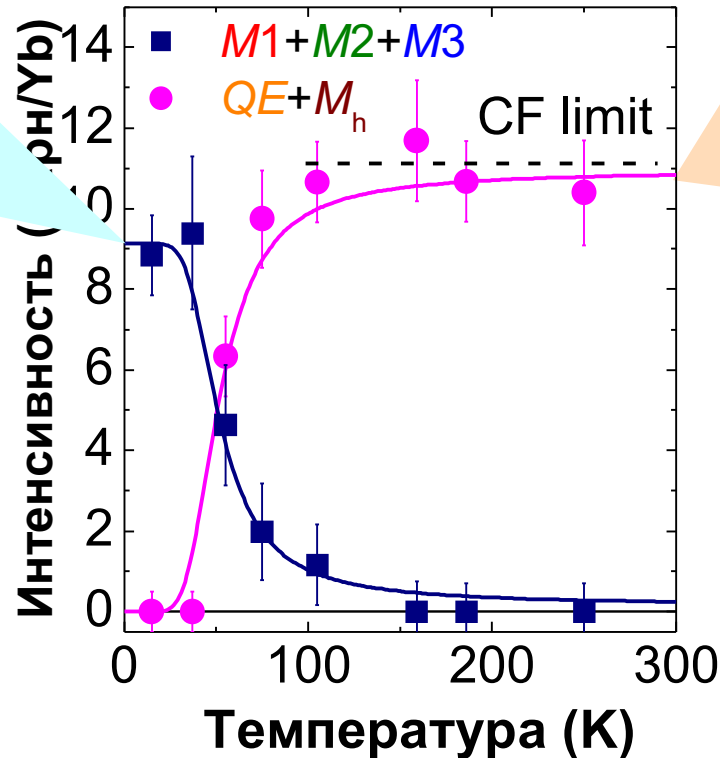


Magnetic Cross-sect.	
qe	el
3	1.5
ie	8.1
tot	12.6

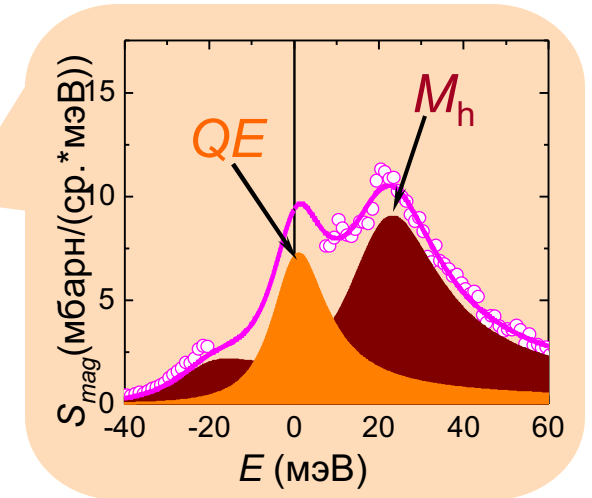
# Температурная эволюция магнитных возбуждений в $\text{YbV}_{12}$



щелевой спектр с кооперативными возбуждениями



“фазовый переход”?!



спин-флуктуационный режим с эффектами кристаллического электрического поля (КЭП)

При  $T > 100\text{K}$  спектры одинаковы для всех  $q$  и содержат две спектральные компоненты: неупругий пик  $M_h$  и широкий квазиупругий пик  $QE$ , соответствующие одноузельным спиновым флуктуациям

Переход из низкотемпературного режима в высокотемпературный ( $T^* \sim 50\text{K}$ ) происходит путем перекачки интенсивности из  $M1$ ,  $M2$  и  $M3$  в  $M_h$  и  $QE$ .

## Информация о магнитных возбуждениях в $YbV_{12}$ , полученная в экспериментах на монокристалле

Высокотемпературный спектр  $YbV_{12}$  (одноузельный режим со спиновыми флуктуациями) при понижении температуры замещается (в интервале 50...80К) щелевым спектром с кооперативными возбуждениями

Все спектральные особенности в низкотемпературном магнитном отклике зависят от волнового вектора, что означает наличие динамических магнитных корреляций.

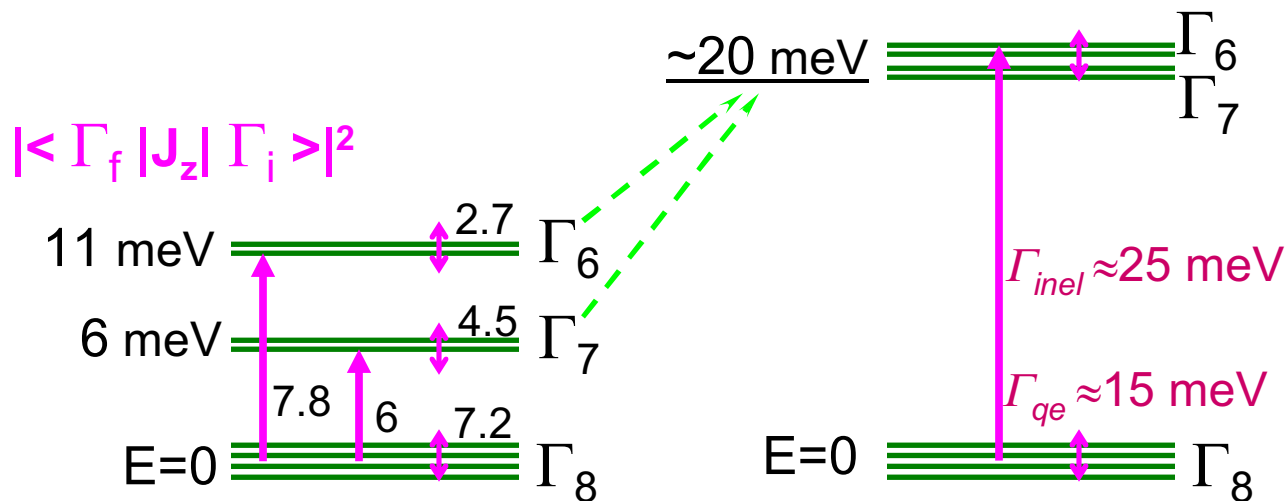
Для  **$M1$**  наблюдается сокращение размерности корреляций (2d). Энергетическая ширина  **$M1$**  в спектре НРН ограничена приборным разрешением (“резонансная мода”).

**Что можно предложить для объяснения структуры спектра магнитных возбуждений  $U_V_{12}$  и его температурной эволюции?**

**Комбинация эффектов КЭП, гибридизации и межзонного обменного взаимодействия...?**

# Интерпретация результатов: высокая температура ( $T \geq 100\text{K}$ )

## f-d гибридизация

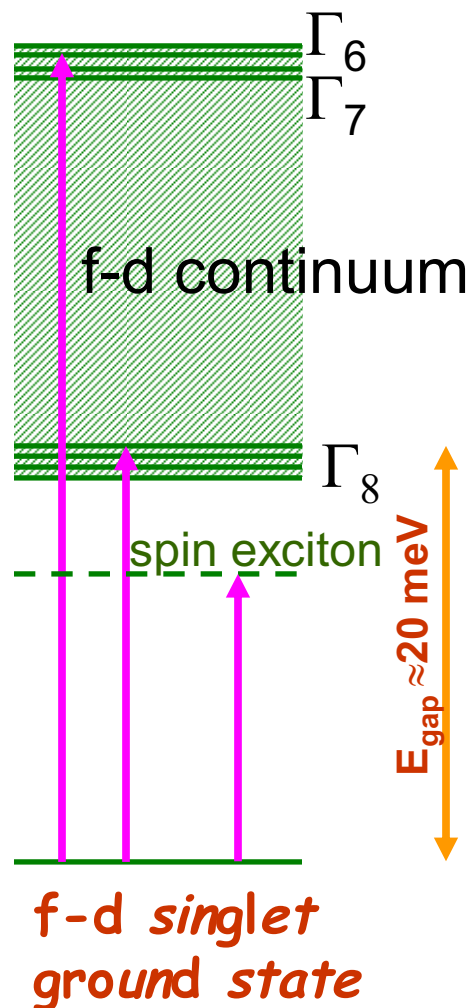


ожидаемая схема уровней  
КЭП для Yb<sup>3+</sup> в YbV<sub>12</sub>  
(экспериментальная оценка  
по примесной метке Er<sup>3+</sup>)

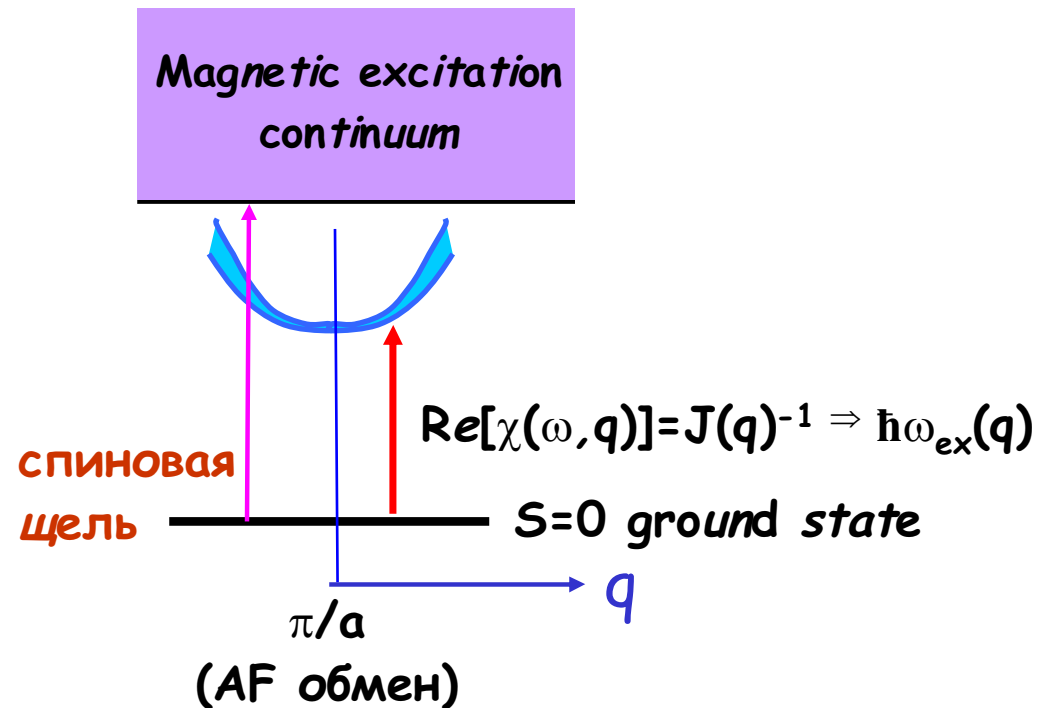
Наблюдаемое  
расщепление при  
 $T > 100\text{K}$

# Интерпретация результатов: низкая температура ( $T \sim 10\text{K}$ )

локальная щель \*



M1 ( $E \approx 15\text{ мэВ}$ ): спиновый экситон \*\*



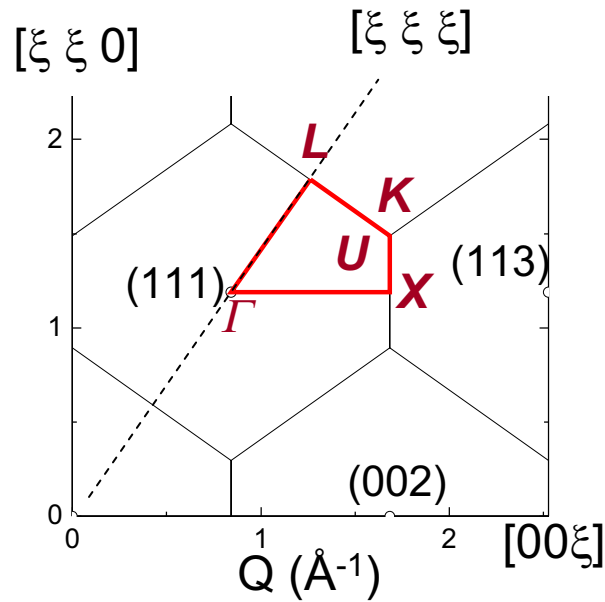
характерные особенности:

- максимум интенсивности в АФМ-точке
- дисперсия повторяет дисперсию щели с дополнительным “провалом” в АФМ-точке
- большое время жизни (низкая энергетическая ширина)

\*S.H.Liu, PRB 63, 115108 (2001)

\*\*P.S.Riseborough, JMM 226-230, 127 (2001)

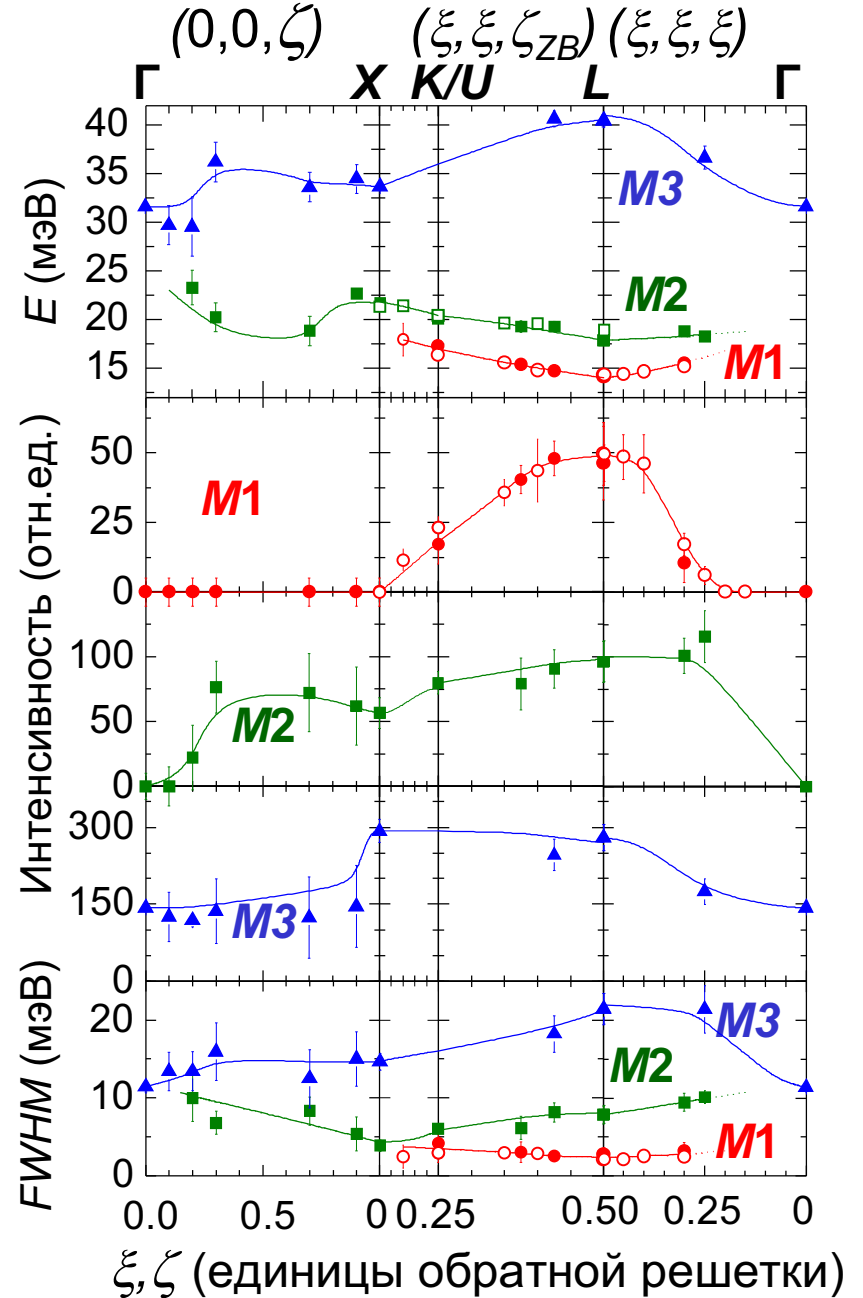
# Дисперсия магнитных возбуждений в $YbV_{12}$ при $T=5K$



**M1** имеет минимум энергии и максимум интенсивности в  $L$ -точке (АФМ характер).

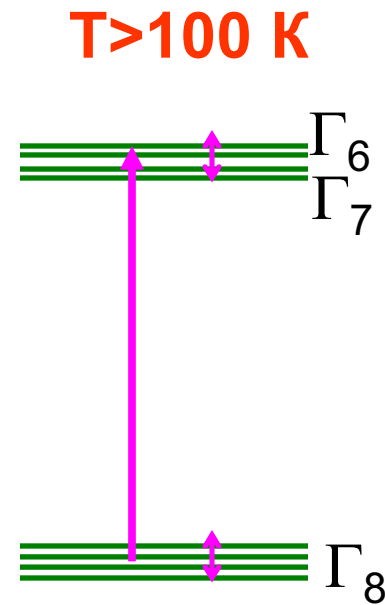
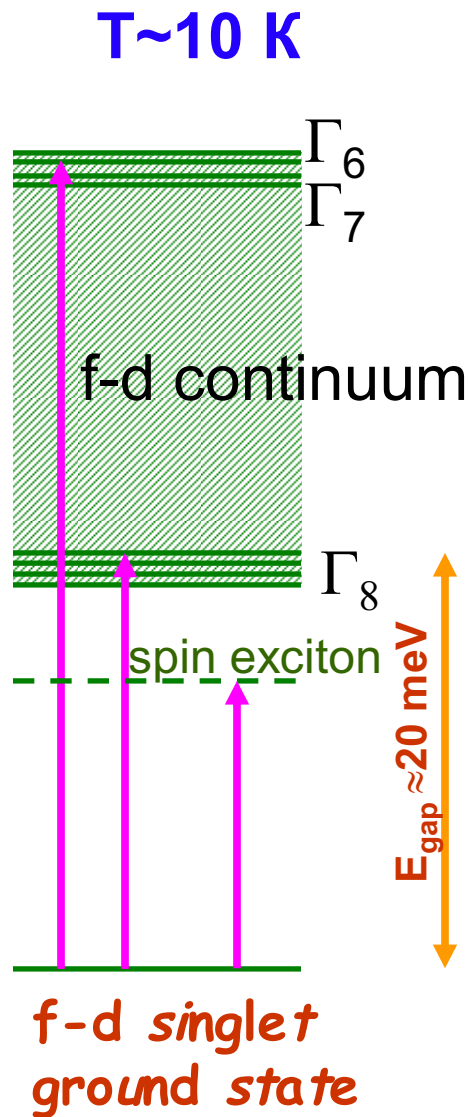
**M2** и **M3** распределены по зоне Бриллюэна более равномерно

Ширина **M1** определяется приборным разрешением





# Интерпретация результатов: температурная эволюция

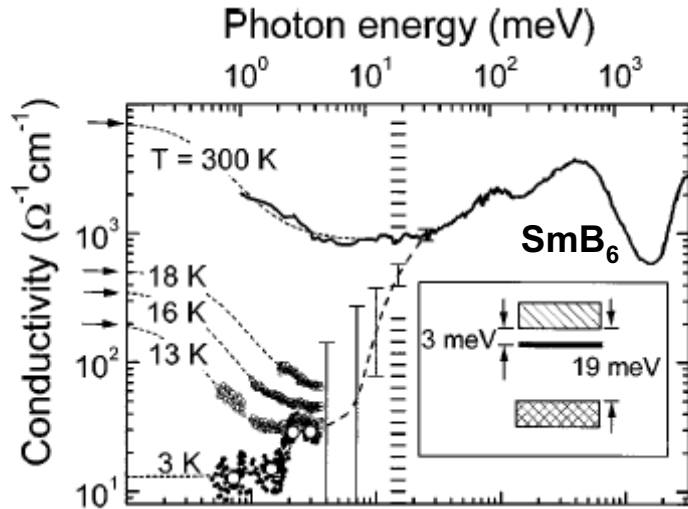


$$p_{\text{singlet}} = \frac{1}{1 + g_{loc}^f * g_{band}^d * \exp\left(-\frac{\Delta_{gap}}{kT}\right)}$$

$$g_{loc}^f = 8$$

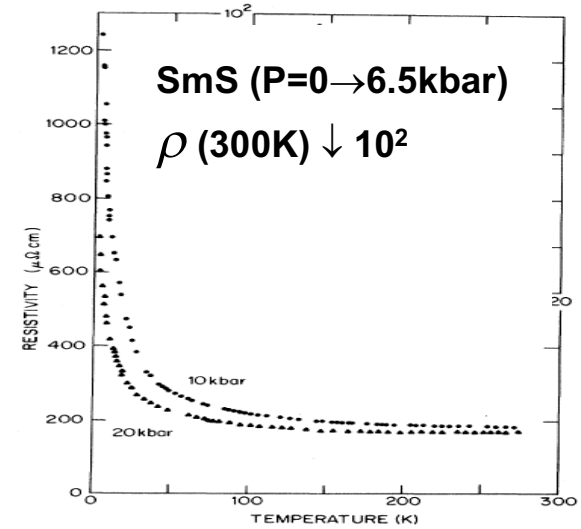
$$g_{band}^d = (2s + 1)(2l + 1) = 10$$

# $SmB_6$ и $SmS^*$ : промежуточно-валентные полупроводники

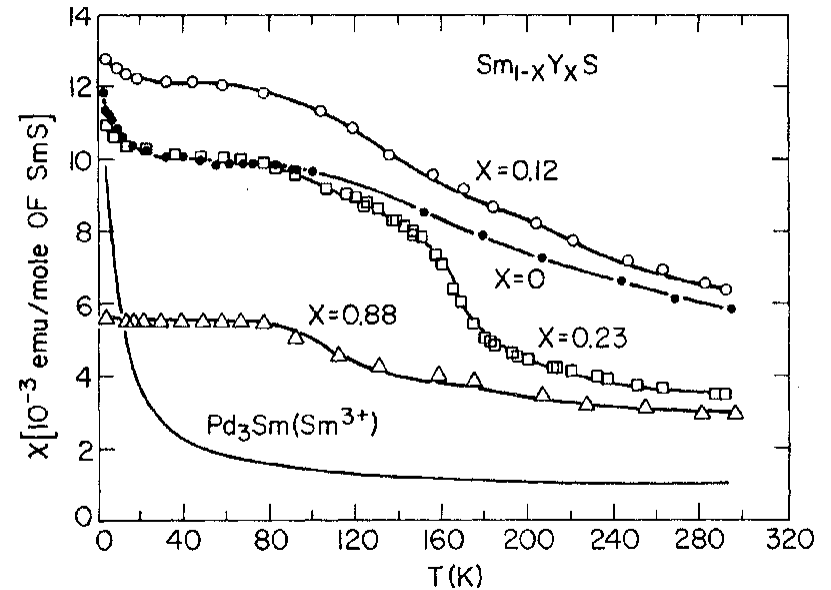
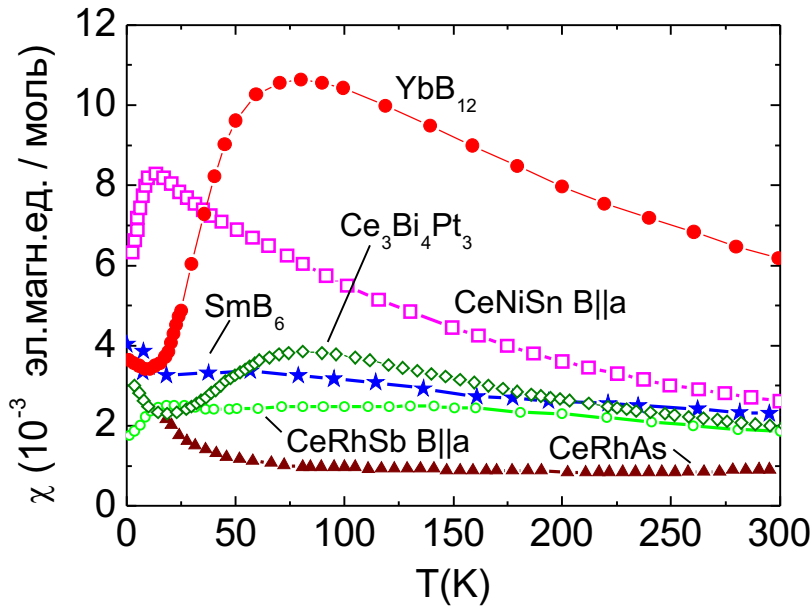


B. Gorchunov, N.Sluchanko et.al., PRB 59 (1999)

## Resistivity of SmS



D. Bader, N.Fillips, D.B.McWhan, PRB 7 (1973)



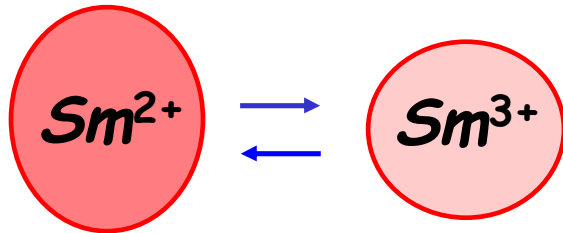
L.J.Tao, F. Holtzberg, PRB 11(10), 1975

# Полупроводники с "сильной" промежуточной валентностью

$SmB_6$ ,  $SmS$  "классические" примеры  $ПВ$

$f^6$

$f^5$  + электрон в зоне проводимости



Какова структура спектра магнитных возбуждений и его эволюция при изменении температуры и валентности  $Sm$ ?

Можно ожидать (по крайней мере):

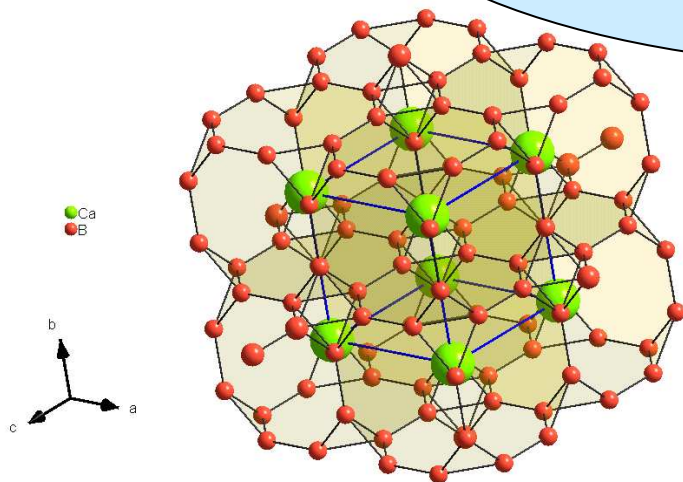
спин-орбитальные переходы конфигураций  $f^6$  и  $f^5$ .

# Промежуточно-валентная система $\text{SmB}_6$

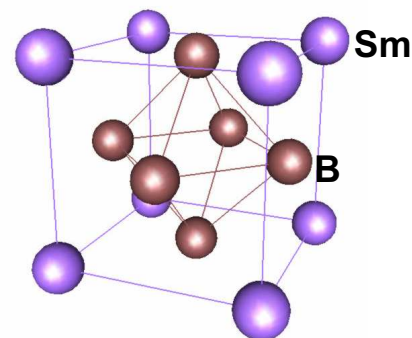
TOF, TAS : спектры магнитных возбуждений, динамика решетки, магнитный форм-фактор

Поли- и монокристаллы  $\text{Sm}_{1-x}\text{M}_x\text{B}_6$   $\text{M}=(\text{La}, \text{Ca}, \text{Ba})$  с изотопически чистыми  $^{154}\text{Sm}$  и  $^{11}\text{B}$

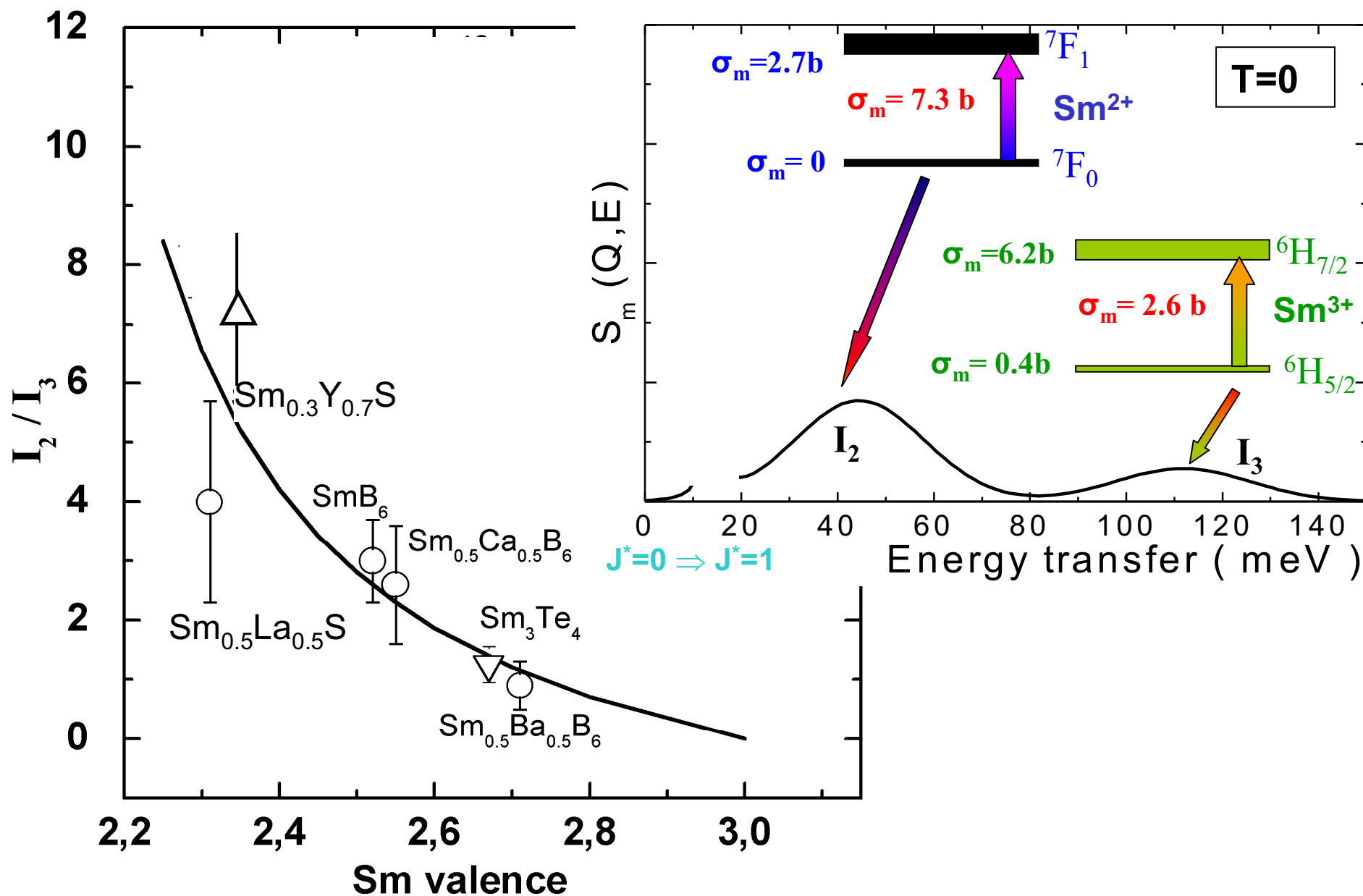
$\text{SmB}_6$  valence=2.5  
 $\text{Sm}_{1-x}\text{La}_x\text{B}_6$  valence  $\rightarrow$  2.0  
 $\text{Sm}_{1-x}(\text{Ca}, \text{Ba})_x\text{B}_6$  valence  $\rightarrow$  3.0



$\text{SmB}_6$   
простая  
кубическая  
структура  
 $a=4.13 \text{ \AA}$

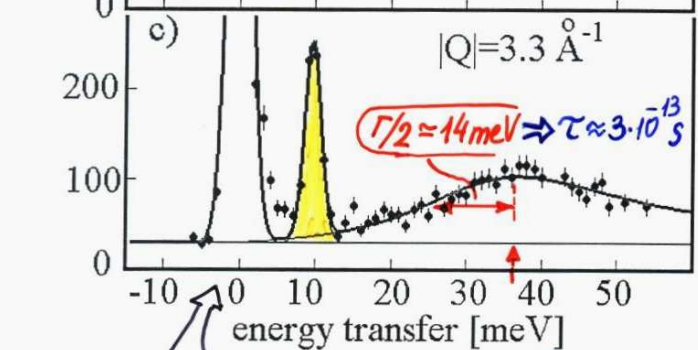
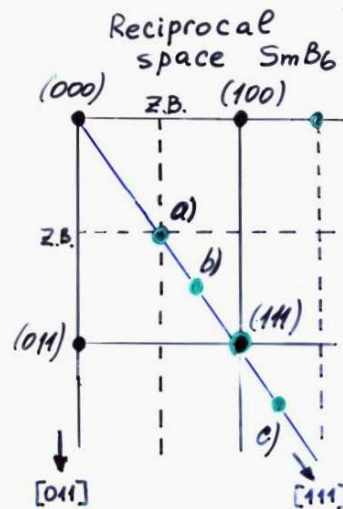
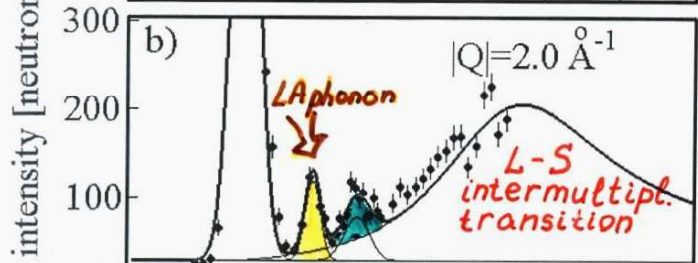
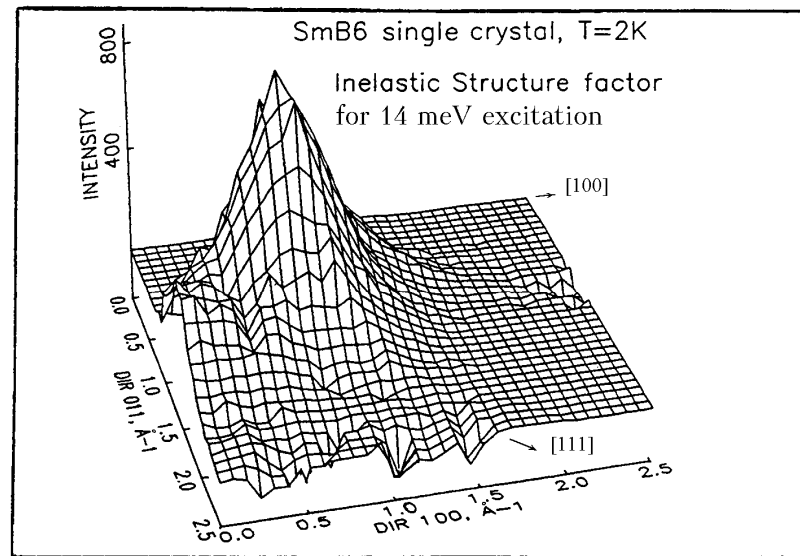
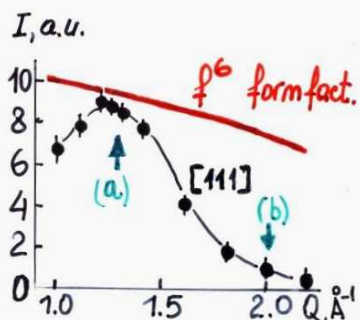
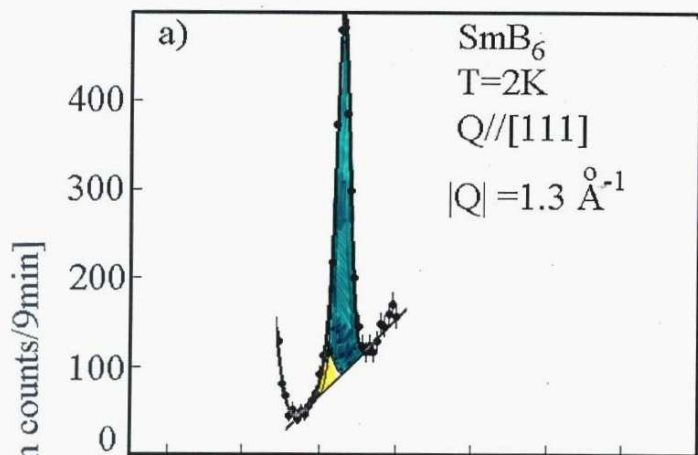


# Межмультиплетные (спин-орбитальные) возбуждения



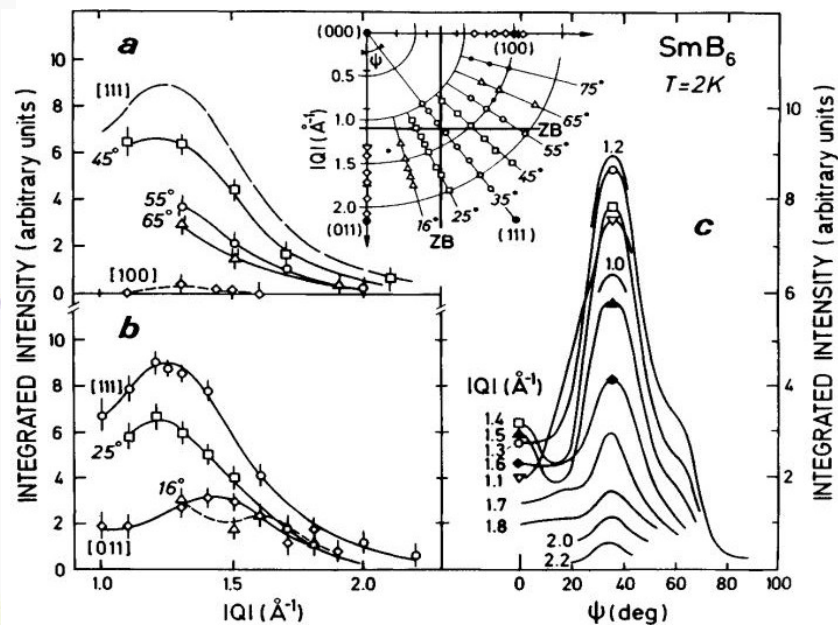
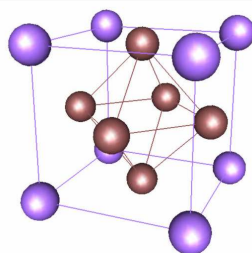
# Низкоэнергетическая ("резонансная") мода в $SmB_6$

$^{154}Sm$   $B_6$  single crystal

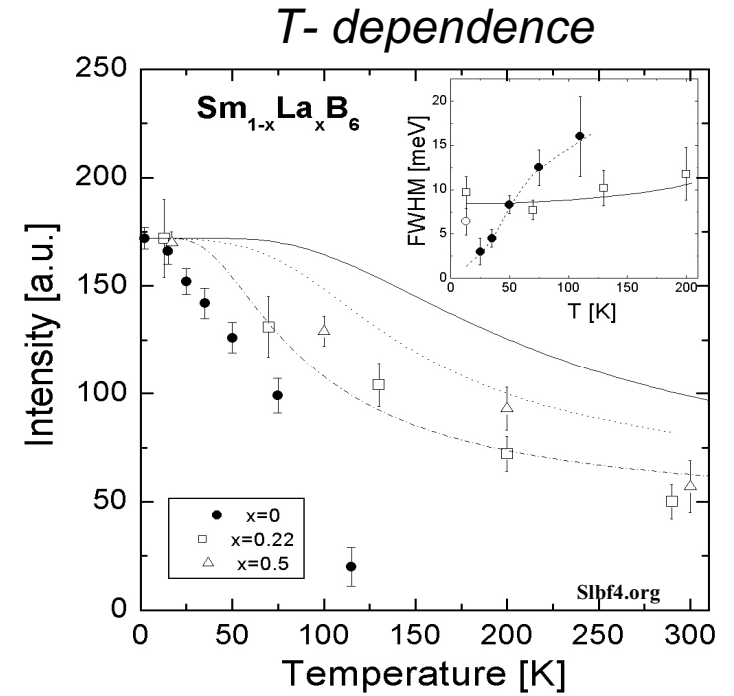
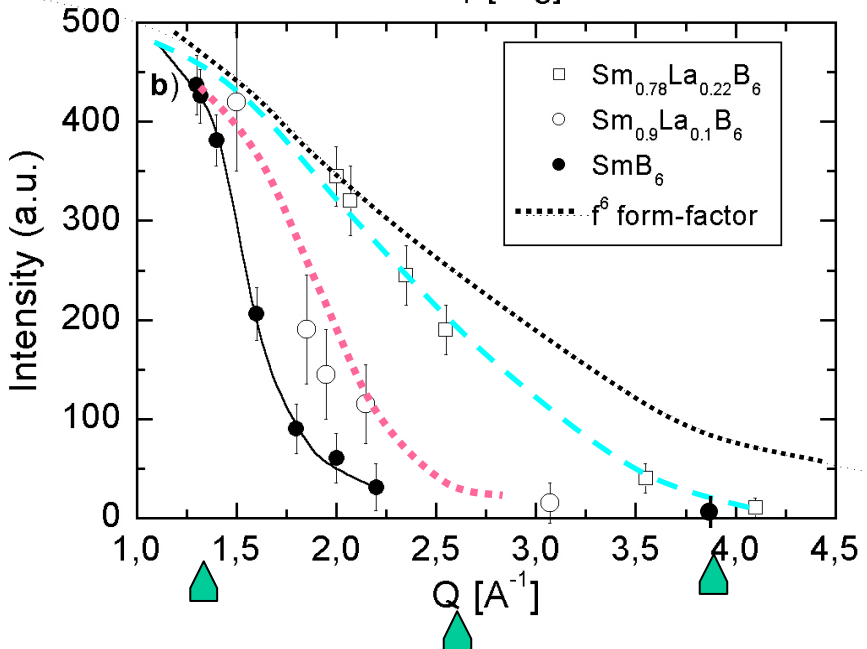
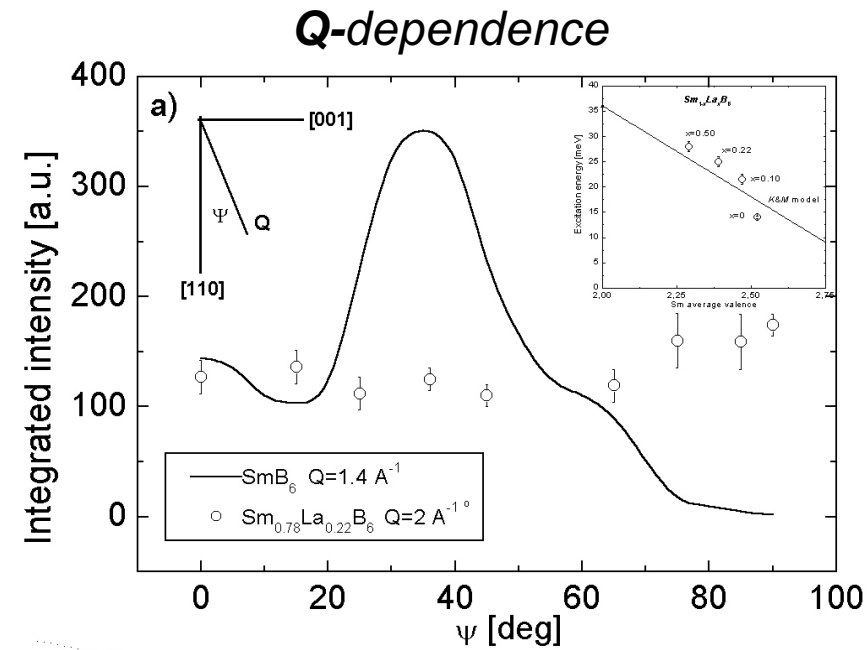


elastic nuclear scattering peak

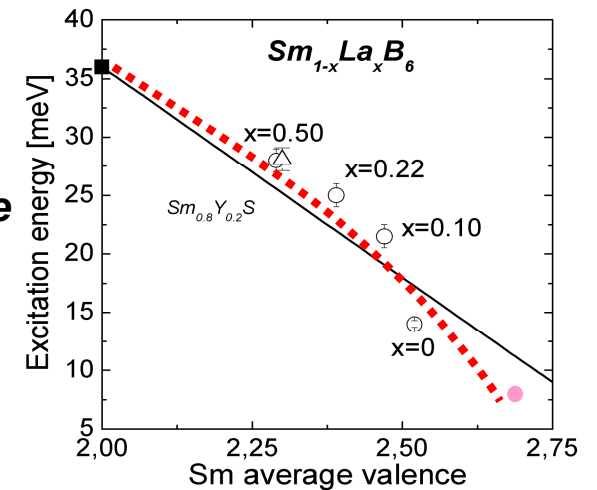
$Sm^{2+}: J=0 \rightarrow J=1$



# Низкоэнергетическая (“резонансная”) мода в $Sm(La)B_6$



**Energy-valence correlation**

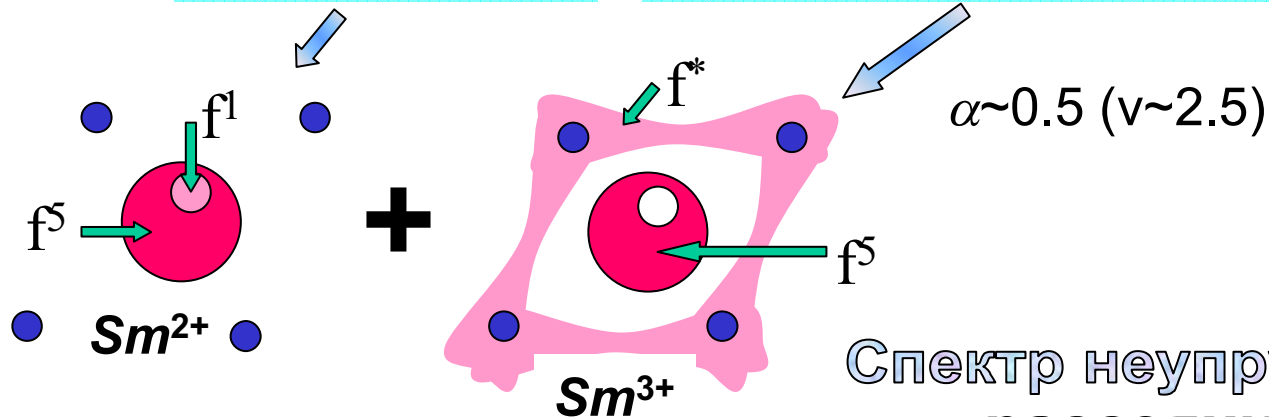




# SmV<sub>6</sub>- ПВ состояние экситонного типа

(K.W.H.Stevens, K.A.Кикоин, А.С.Мищенко)

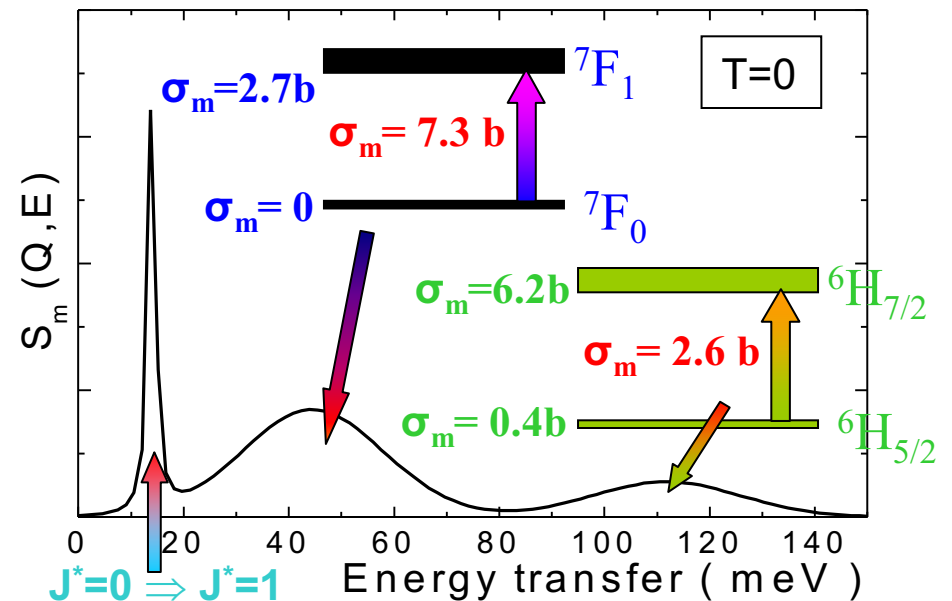
$$\Psi_{J^*=0}^g = \alpha^{1/2} |f^6, {}^7F_0\rangle + (1-\alpha)^{1/2} |f^5 B^{(f)}, {}^7F_0\rangle \quad \leftarrow \text{ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ}$$



Спектр неупругого магнитного рассеяния нейтронов

возбуждение с переориентацией спина

$$\Psi_{J^*=1}^{ex} = \alpha^{1/2} |f^6, {}^7F_1\rangle + (1-\alpha)^{1/2} |f^5 B^{(f)}, {}^7F_1\rangle$$



$$E_{SO}^* = \alpha \cdot E_{SO} = (3-v) \cdot E_{SO}$$



## Резюме по исследованиям $SmB_6$

- В спектрах НРН на монокристалле  $SmB_6$  при низких температурах наблюдается узкий пик (ширина определяется разрешением), или “резонансная мода” с энергией 14 мэВ. Она локализована в обратном пространстве вследствие анизотропии и резкой Q-зависимости форм-фактора.
- Она может быть интерпретирована (в отличие от наблюдаемых при высоких энергиях “широких” спин-орбитальных возбуждений, соответствующих конфигурациям  $Sm^{2+}(f^6)$  и  $Sm^{3+}(f^5)$ ) как возбуждение, отвечающее истинному основному состоянию ПВ иона  $Sm$ . Ее Q-зависимость является следствием анизотропии и заметной пространственной протяженности электронной (спиновой) плотности вблизи иона  $Sm$ .
- Изменение валентности  $Sm$  приводит к существенному энергетическому сдвигу и изменению Q-зависимости для резонансной моды.
- Эти эффекты могут быть описаны в рамках “экситонной модели” [Кикоин, Мищенко] для однородного промежуточно-валентного состояния на каждом ионе  $Sm$ .

**Гибридизация между  $f$ -электроном  $Sm$  и  $p$ -электронами ближайших к  $Sm$  атомов  $B$  приводит к формированию “зарядового” экситона промежуточного радиуса.**

**Как изменятся его свойства при наличии межионного обменного взаимодействия  $Sm-Sm$ ?!**

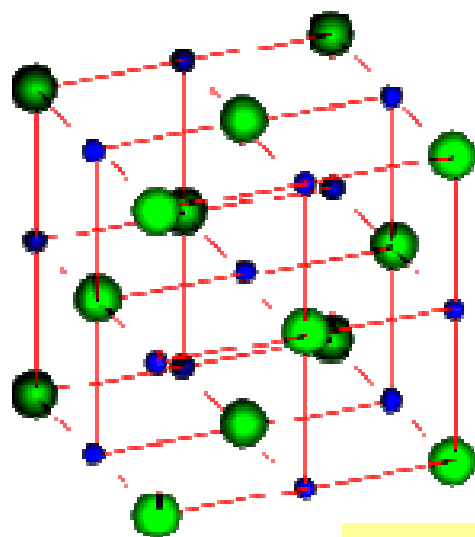
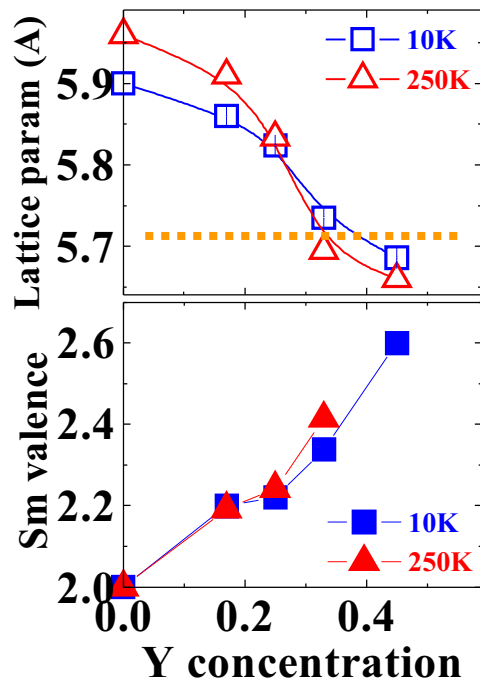
# Промежуточная валентность в $SmS$

"химическое давление"

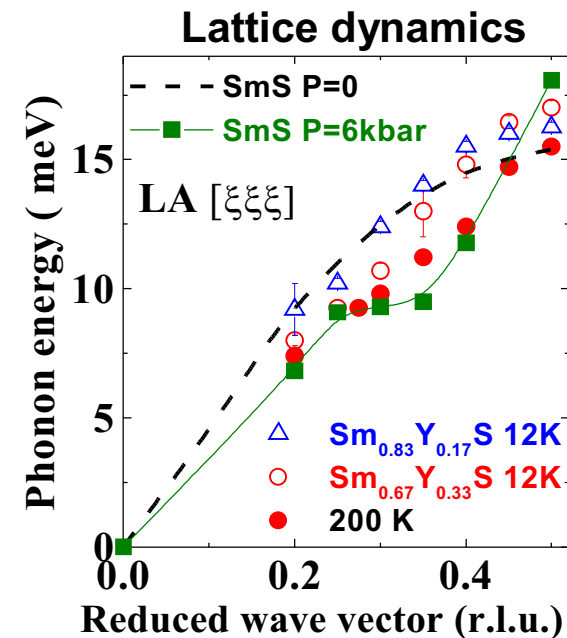
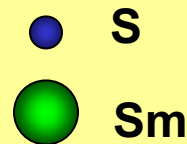
$Sm_{1-x}Y_xS$  непрерывный ЭФП

$P = 6$  кбар

ЭФП в "золотую" фазу,  
валентность  $\sim 2.7$

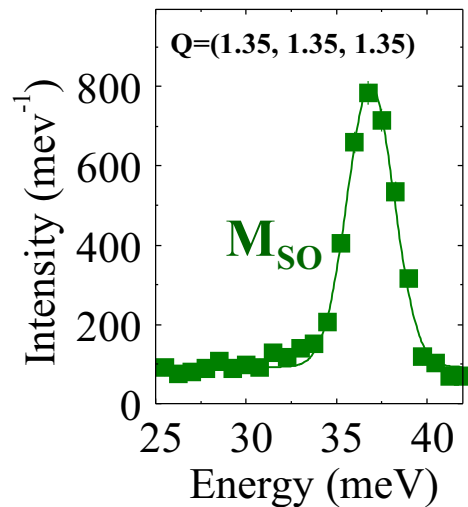


$SmS$   
 $a = 5.93 \text{ \AA}$

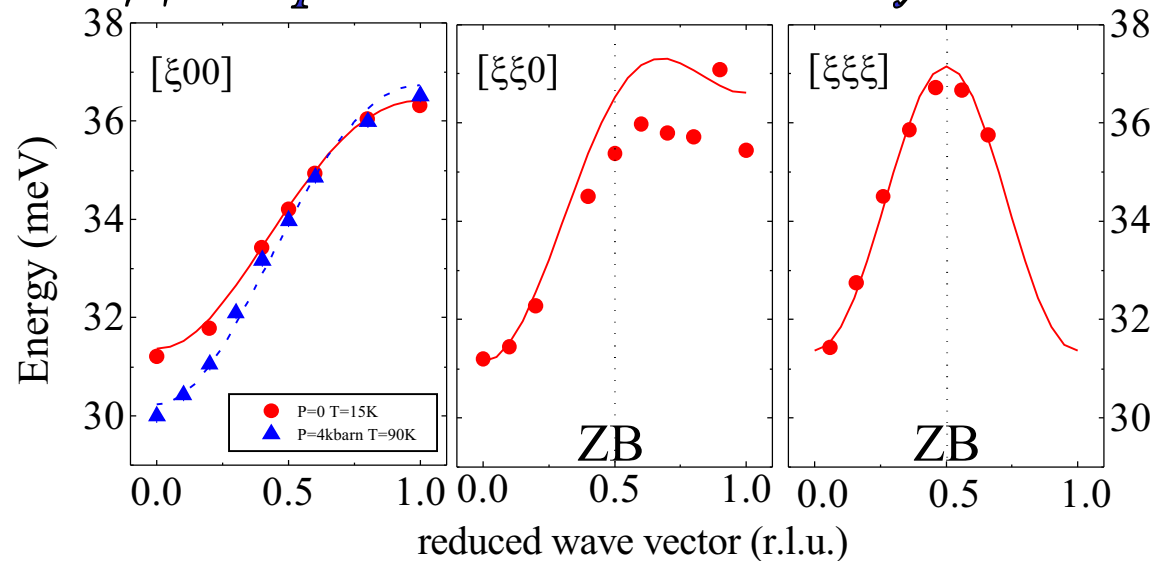


# Возбуждения и *Sm-Sm* обмен в *SmS*

Спин-орбитальные (СО) переходы в нейтронных спектрах *SmS*



Дисперсия магнитных возбуждений



Модельное описание дисперсии СО возбуждения (*S.M.Shapiro e.a., PRL, 1975*)

**Sm<sup>2+</sup> (4f)**

${}^6F_1$   
 $\Delta_{SO}$   
 ${}^7F_0$

**Sm-Sm exchange:**

$$J(\vec{q}) = \sum_j J_{ij} \exp[i\vec{q}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)]$$

**=**

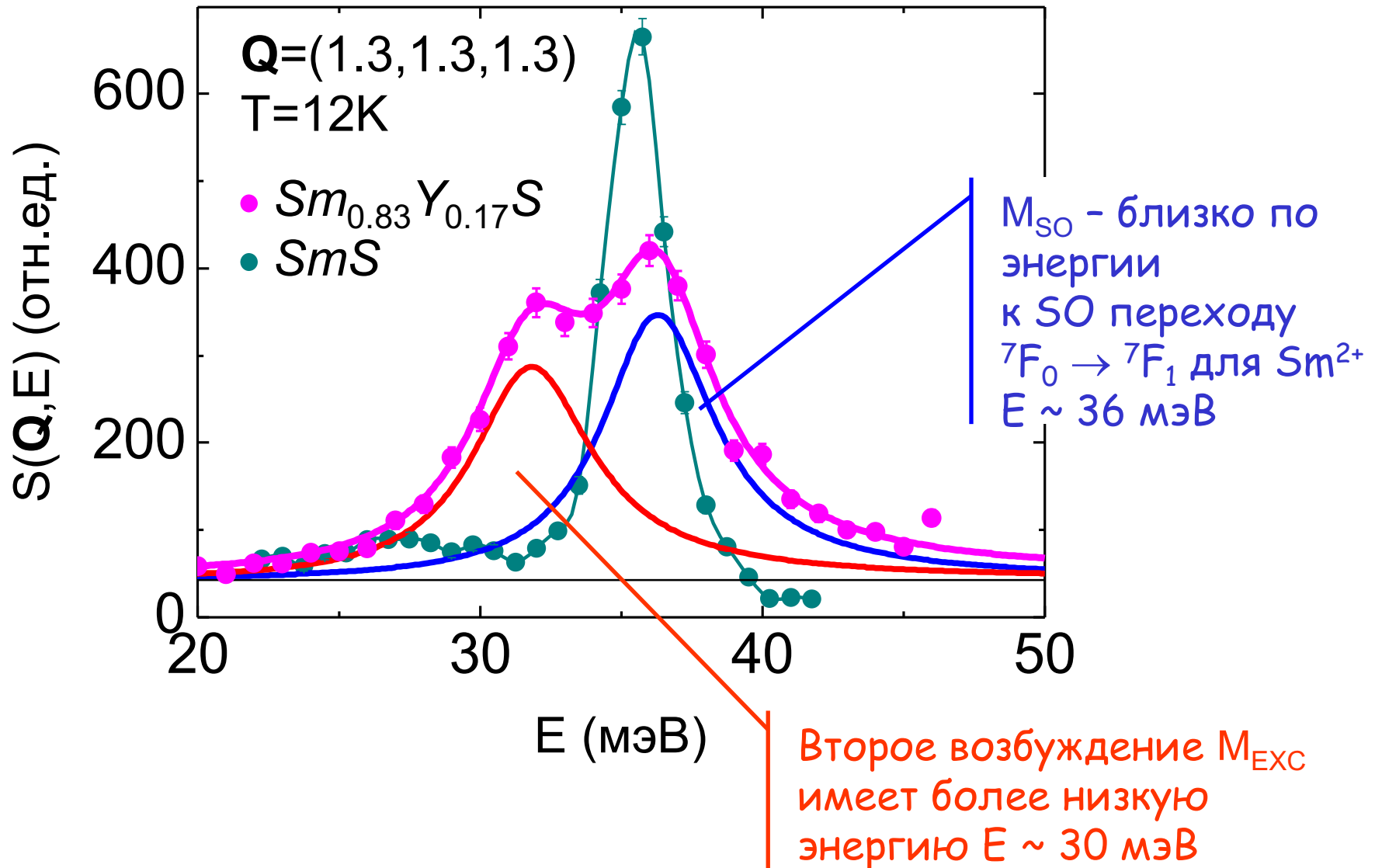
$$\omega_{SO}(\vec{q}) = \Delta_{SO} (1 - 16R(T)J(\vec{q}) / \Delta_{SO})^{1/2}$$

$$R(T) = \frac{1 - \exp(-\Delta/kT)}{1 + 3\exp(-\Delta/kT)} \quad \text{temperature factor}$$

Параметры обменного взаимодействия в *SmS*:  $J_1=0.043$   $J_2=0.020$   $J_3= - 0.003$

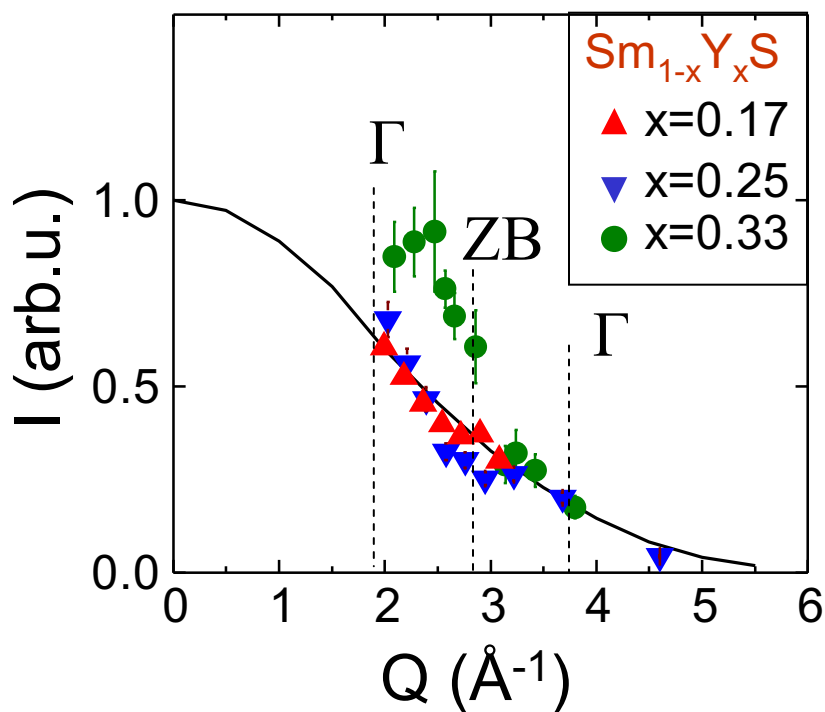
# Спиновая динамика в $Sm(Y)S$

## Тонкая структура спектра магнитных возбуждений в $Sm_{1-x}Y_xS$



# Проявления взаимодействия Sm-Sm

Q-зависимость  
интегральной интенсивности

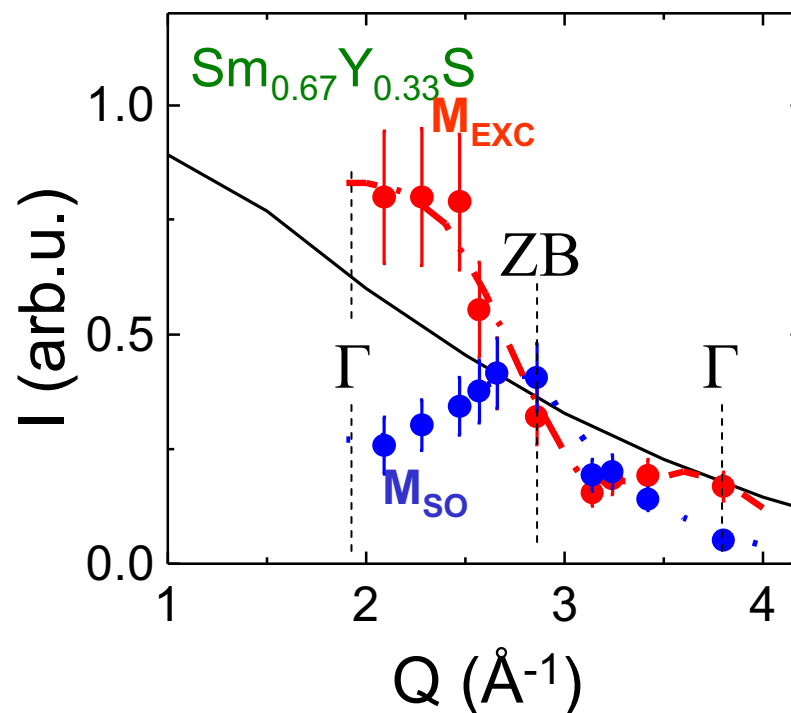


модуляции интенсивности с периодом, равным размеру зоны Бриллюэна



Существуют магнитные корреляции

Q-зависимость  
парциальных интенсивностей



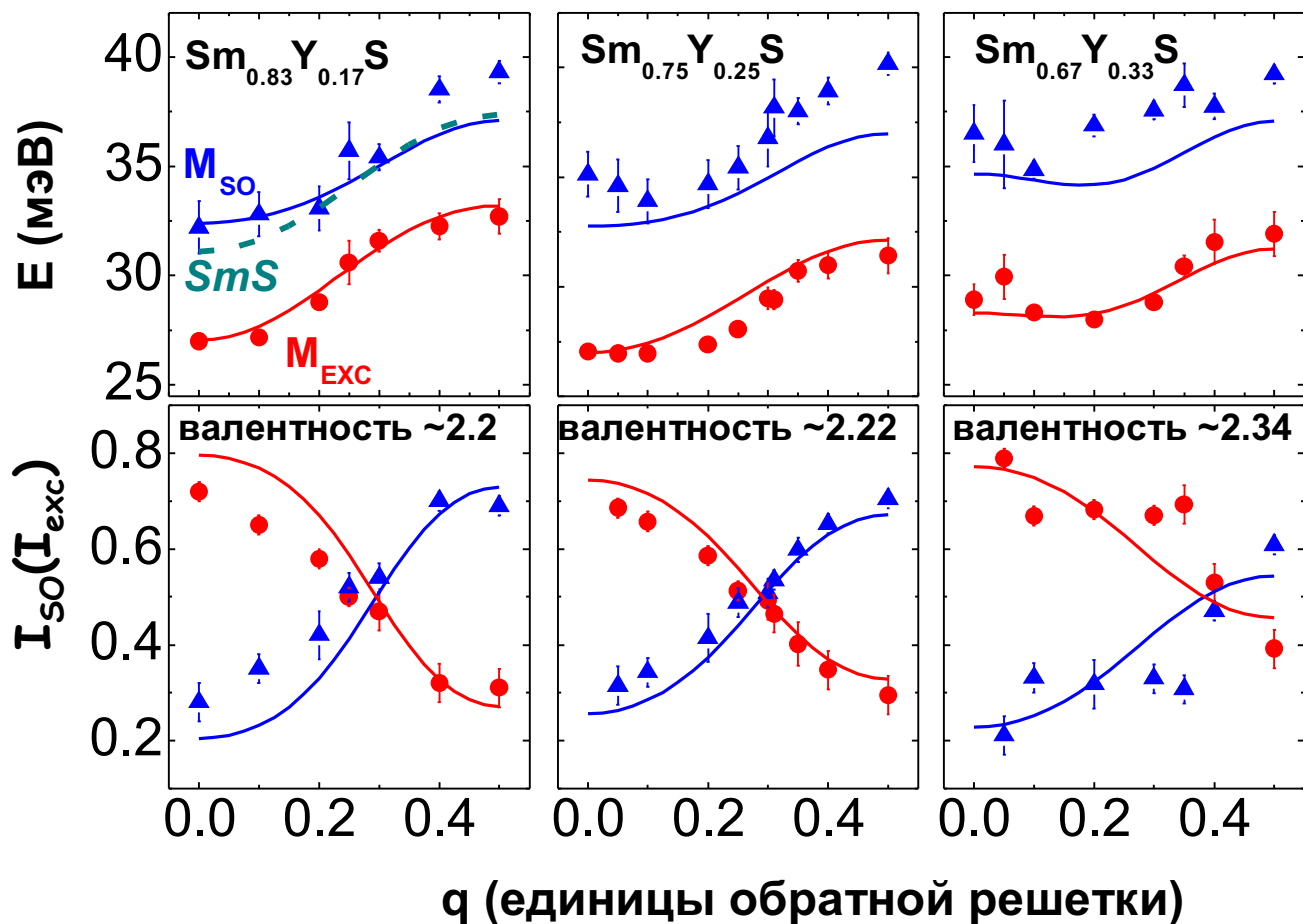
M<sub>EXC</sub> имеет более резкую зависимость по сравнению с форм-фактором для перехода  ${}^7F_0 \rightarrow {}^7F_1$  иона Sm<sup>2+</sup>



Электронные состояния (M<sub>EXC</sub>) более делокализованные

# Дисперсии энергий $M_{SO}$ и $M_{exc}$ и их относительные интенсивности ( $T = 12K$ )

$$I_{SO}(I_{EXC}) = \frac{I_{SO}(I_{EXC})}{I_{SO} + I_{EXC}}$$

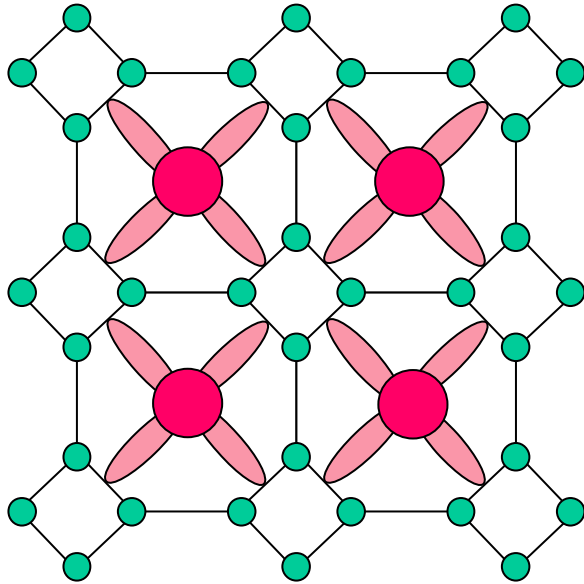


$Sm^{2+}$   $\rightarrow$   $Sm^{3+}$

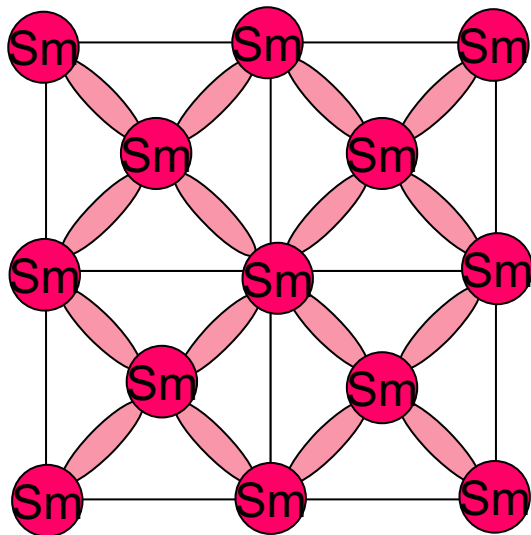
- дисперсия уменьшается
- минимум дисперсии сдвигается из  $\Gamma$ -точки
- мода  $M_{EXC}$  становится доминирующей по всей зоне Бриллюэна

Учет косвенного обменного взаимодействия Sm-Sm и взаимодействия (гибридизации) между  $M_{SO}$  и  $M_{EXC}$  позволяет описать экспериментальные кривые дисперсии  $E(q)$  и  $I(q)$

# Особенности ПВ состояния $Sm$



«Локальное» состояние  
частично  
делокализованных  $f$ -  
электронов:  
гибридизация « $Sm - B_6$ »



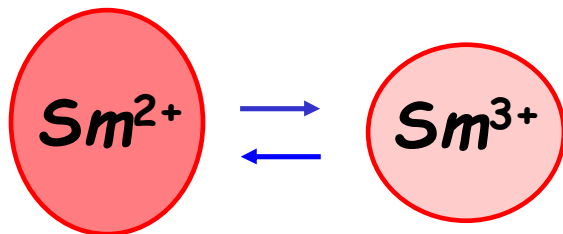
«Коллективное»  
состояние частично  
делокализованных  $f$ -  
электронов:  
гибридизация « $Sm -$   
 $Sm$ »

# Полупроводники с "сильной" промежуточной валентностью

$SmB_6$ ,  $SmS$  "классические" примеры ТВ

$f^6$

$f^5$  + электрон в зоне проводимости



Детальное исследование промежуточно-валентных полупроводников на основе  $Sm$  позволило развить микроскопическую модель однородного экситаноподробного основного состояния.

Характерное возбуждение из истинного основного состояния - "резонансная" мода со специфической зависимостью от температуры и волнового вектора.



# Заключение

- ✍ При переходе из режима спиновых флуктуаций в немагнитное (синглетное) основное состояние в валентно-нестабильных РЗ системах может формироваться специфическое экситоноподобное возбуждение, аналогичное так называемой "резонансной моде" в ВТСП.
- ✍ Обнаружено два типа экситонных возбуждений:
  - ✍ возбуждения на основе электронного (зарядового) экситона конечного радиуса (в системах с «сильной промежуточной валентностью»);
  - ✍ возбуждения типа спинового экситона, который возникает вследствие наличия динамических спиновых корреляций между локализованными магнитными моментами РЗ ионов.

A.Akbari, P.Thalmeier, P.Fulde,

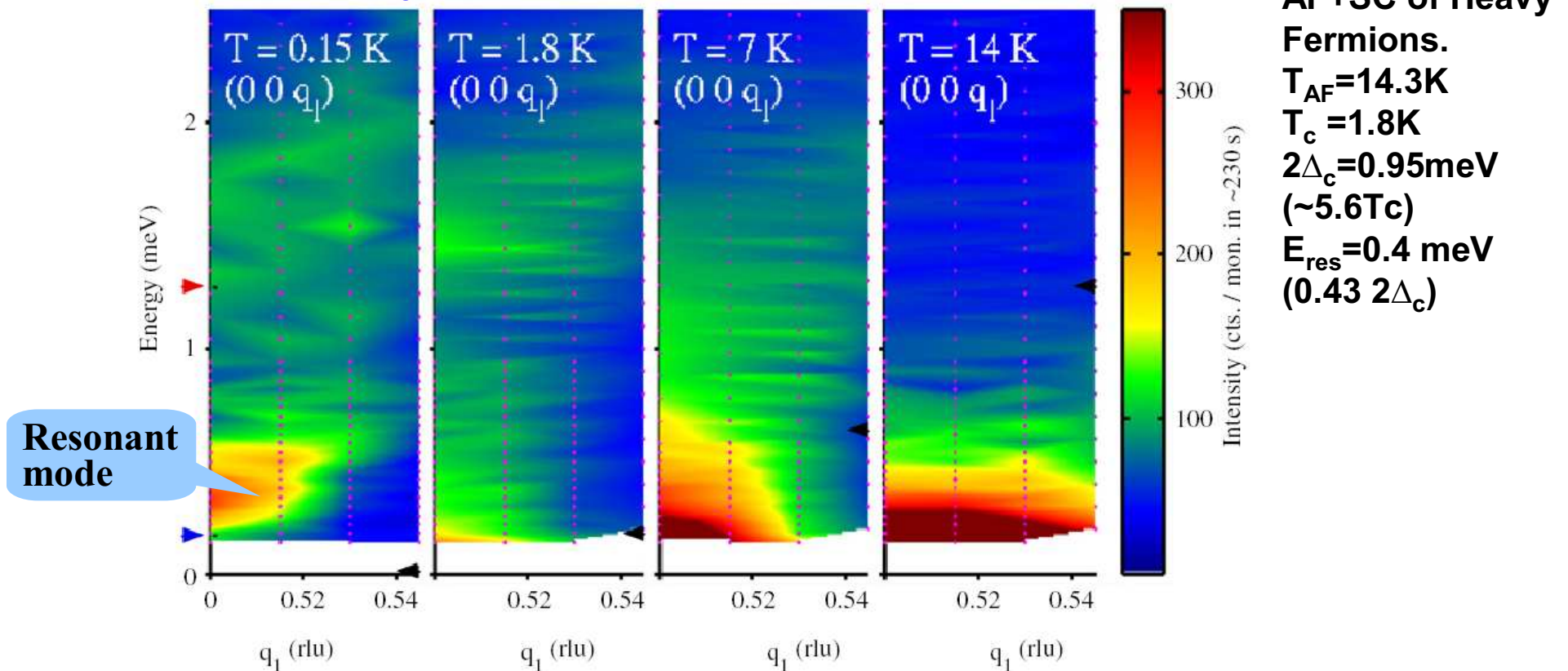
Theory of spin exciton

in the Kondo semiconductor  $\text{YbB}_{12}$

Phys.Rev.Lett. 102, p.106402, 13 MARCH 2009

# Heavy fermion antiferromagnetic superconductor $\text{UPd}_2\text{Al}_3$

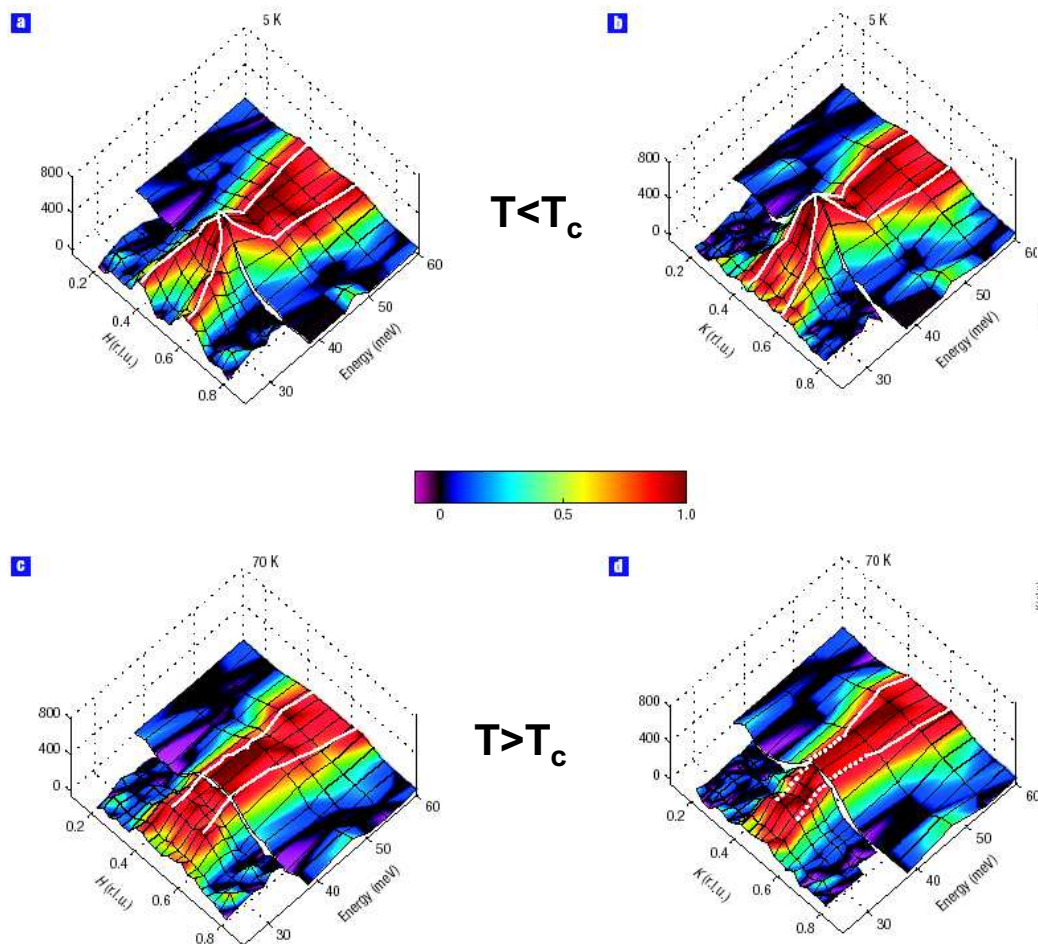
## $\text{UPd}_2\text{Al}_3$ – magnetic excitation spectra



**Figure 4.** Contour plots of the intensity at four temperatures (marked) as a function of  $\mathbf{q} = (0\ 0\ q_{\parallel})$  and energy transfer. On the energy scale, dark arrows (red and blue) on the left-hand side, mark the energies corresponding to the antiferromagnetic,  $T_{\text{N}}$ , and the superconducting,  $T_{\text{sc}}$ , transitions with the sample temperature,  $T$ , indicated by dark (black) arrows on the right-hand side on each panel. Data taken at ILL on IN14 with  $k_f = 1.15\ \text{\AA}^{-1}$ . The figure has been published previously [27].

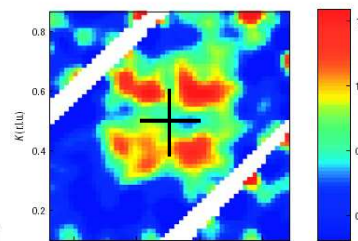
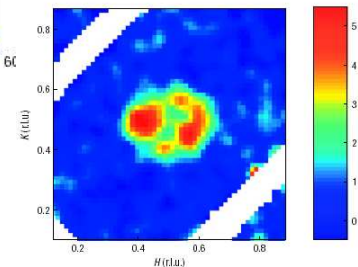
Recent publications in Nature etc., e.g. V.Hinkov, P.Bourges, S.Pailhes, Y.Sidis, A.Ivanov, et.al. Nature Physics 3, 780 (2007) opens a new window on the universality of the spin excitation in the cuprates

Magnetic intensity from tree-axis scans along the *a* axis (*H*, -1.5, -1.7) and *b* axis (1.5, *K*, 1.7)

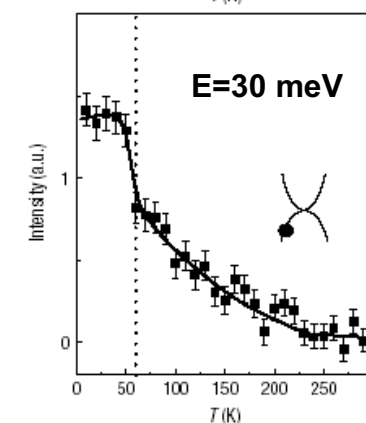
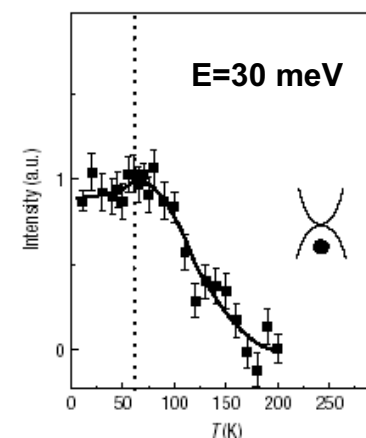


In-plane magnetic intensity at TOF spectrometer at 5K

$30 \pm 3.5 \text{ meV}$



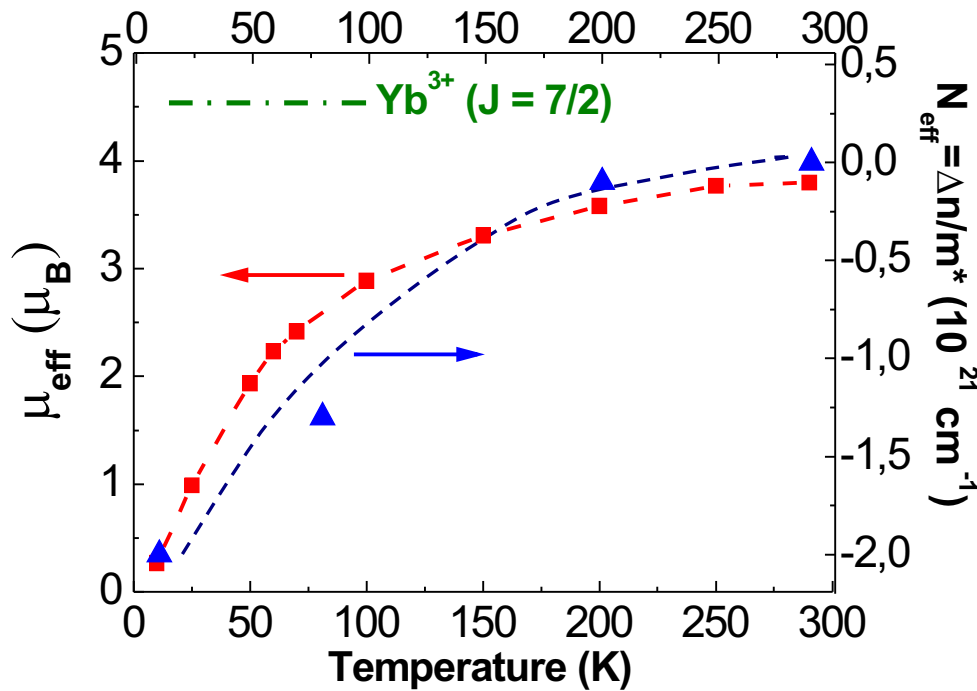
$63 \pm 5 \text{ meV}$



Temperature dependence for peak intensity in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.6}$

Difference in anisotropy, in temperature behaviour...

# Kondo-insulating regime for $\text{YbB}_{12}$ : paramagnetic-nonmagnetic and metal-semiconductor transformation below $T^* \sim 80\text{K}$



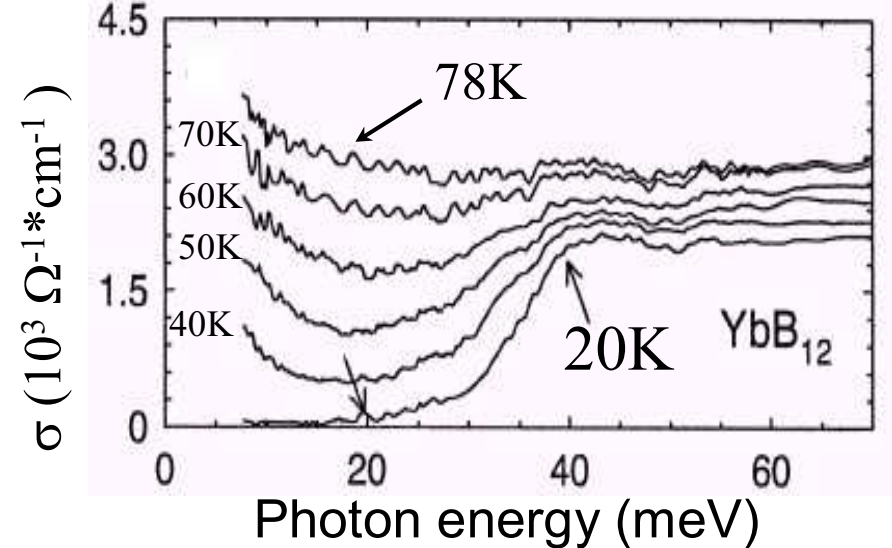
$$\chi(T) = \mu_{\text{eff}}^2 \mu_B^2 / 3k_B T \quad \mu_{\text{eff}} \propto \sqrt{\chi(T)T}$$

$$N_{\text{eff}} = \frac{\Delta n}{m^*} \propto \int \sigma(\omega, T) d\omega - \int \sigma(\omega, 300\text{K}) d\omega$$

## Optical conductivity



$2\Delta_0 = 25 \text{ meV}$  Okamura et.al





# YbB<sub>12</sub>- semiconductor with weak mixed valence

Samples:  $Yb_{1-x}(Lu,Er)_x^{11}B_{12}$  (99.5% <sup>11</sup>B)

$YbB_{12}$ ,  $Yb_{0.8}Lu_{0.2}B_{12}$  - single crystals (Hiroshima University, Japan)

$YbB_{12}$ ,  $Yb_{0.9}Er_{0.1}B_{12}$ ,  $Yb_{1-x}Lu_xB_{12}$  - polycrystals  
( $x=0.25, 0.75, 0.9$ ) (IPMS, NASU, Kyiv, Ukraine)

● **Me (0,0,0)**  $a \approx 7.47 \text{ \AA}$

● **B ( $\pm 1/2, x, x$ ),  $x \approx 0.17$  R(Yb-Yb)=5.3 Å (a lot!)**

## INS experiments

➤ Time-of-flight spectrometer HET (ISIS, UK)

$E = -40-65 \text{ m\AA B}$ ,  $T = 15-250 \text{ K}$

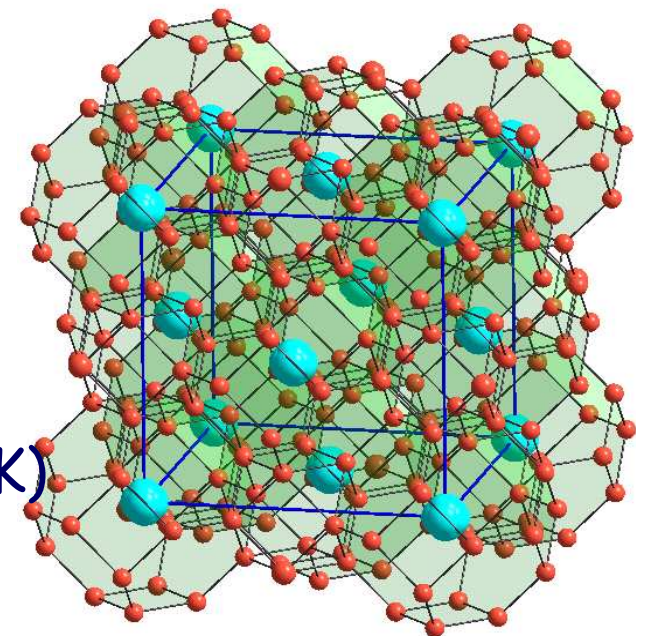
➤ Three-axis spectrometer 2T (LLB, France)

$E = 5-35 \text{ m\AA B}$ ,  $T = 15-80 \text{ K}$

➤ Three-axis spectrometer with polarization analysis IN20 (ILL, France):

$E = 10-60 \text{ m\AA B}$ ,  $T = 5-125 \text{ K}$

YbB<sub>12</sub>- structure of UB<sub>12</sub> type (based on NaCl)



# Experiments on single crystal including polarization analysis

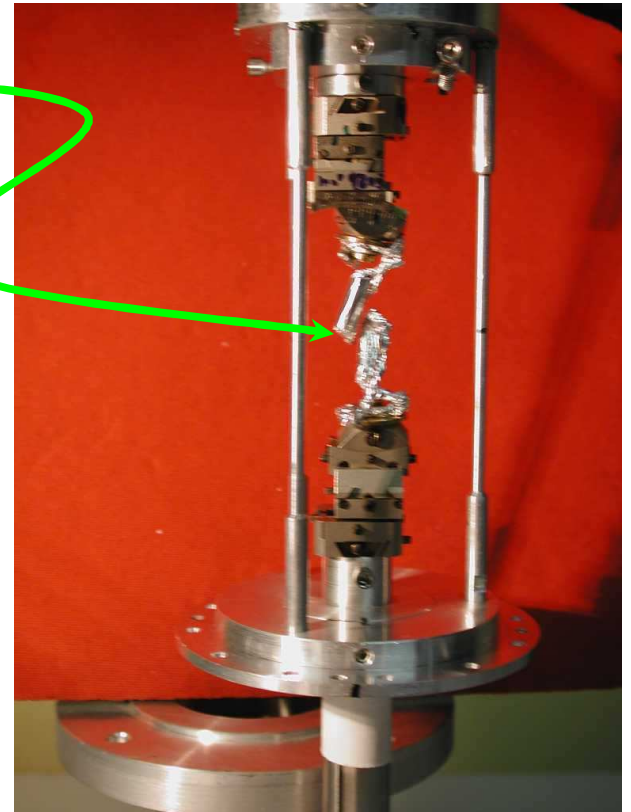
**sample:** two single crystals of  $\text{Yb}^{11}\text{B}_{12}$  ( $m_{\text{total}} \approx 2 \text{ g}$ )

**instruments:** triple axis spectrometers: 2T (LLB, France), IN20 (ILL)

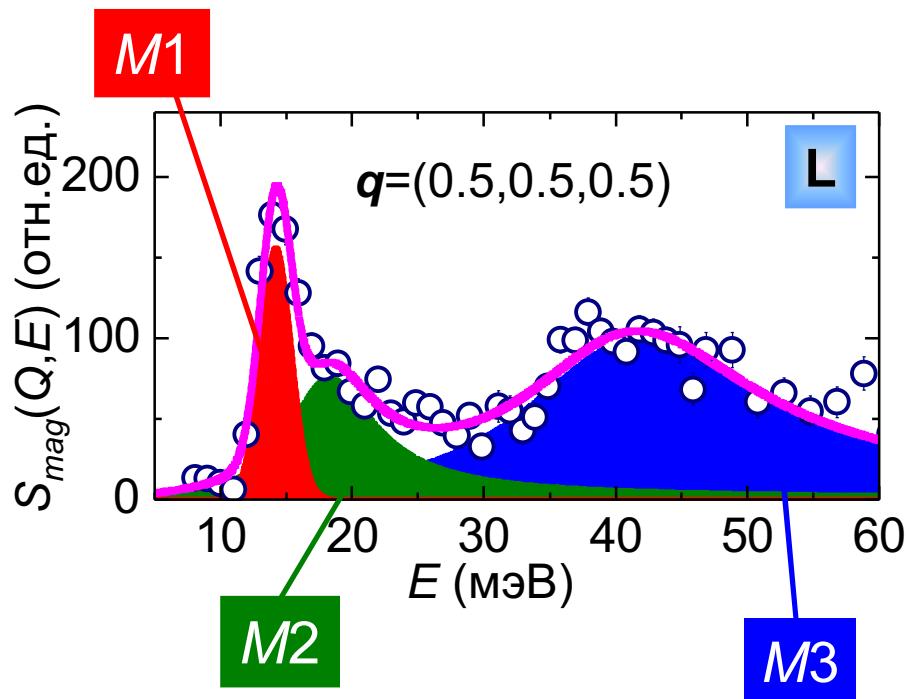
**final neutron energies:**  
 $E_f = 14.7, 30.5, 34.5 \text{ meV}$

**energy transfer:**  $E = 5\text{-}60 \text{ meV}$

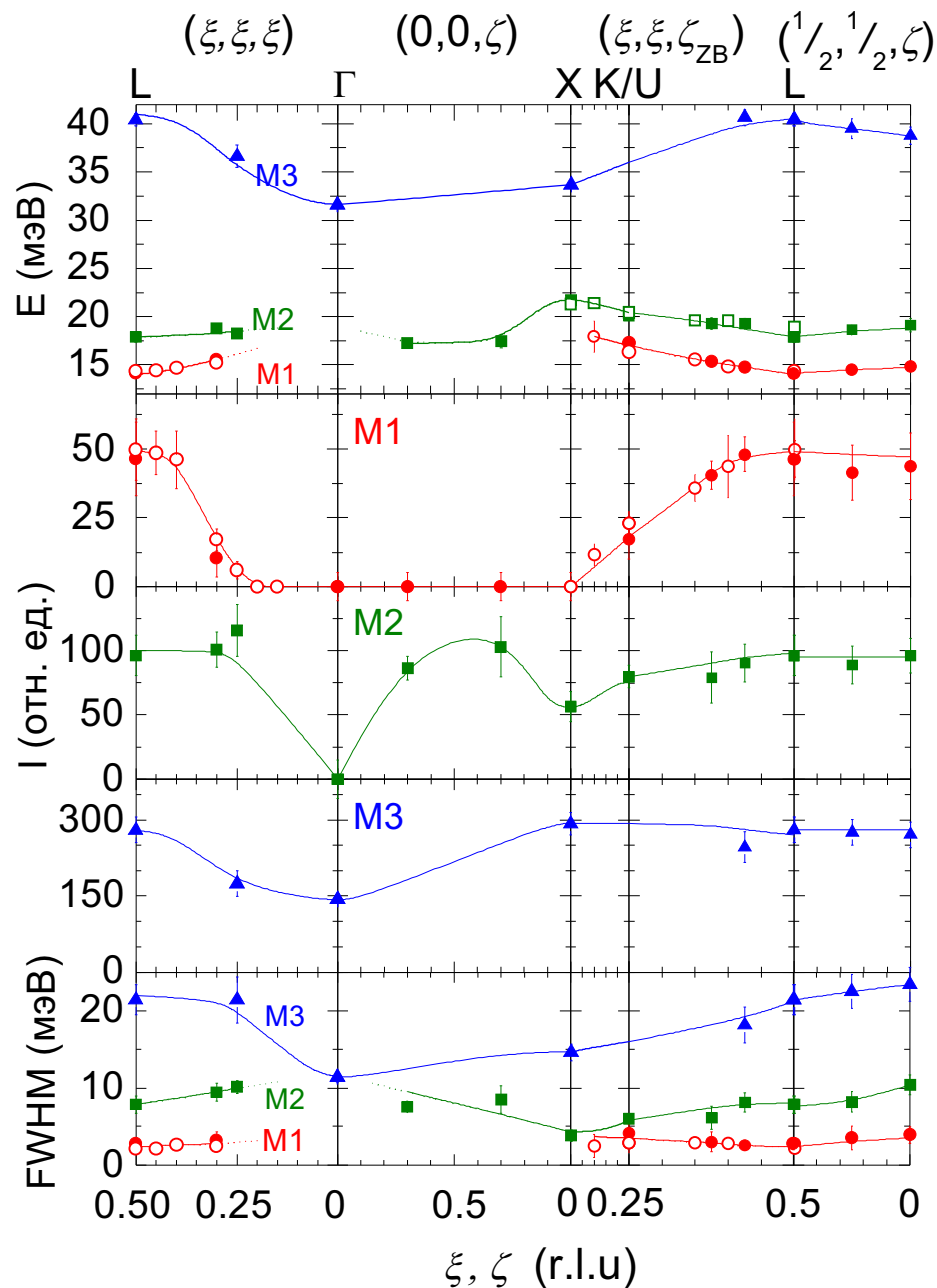
**temperature range:**  $5\text{...}130 \text{ K}$



# Спектральный магнитный отклик $YbV_{12}$ при $T=5K$



Спектральный магнитный отклик  $YbV_{12}$  формируется тремя дисперсионными возбуждениями  $M1$ ,  $M2$ ,  $M3$

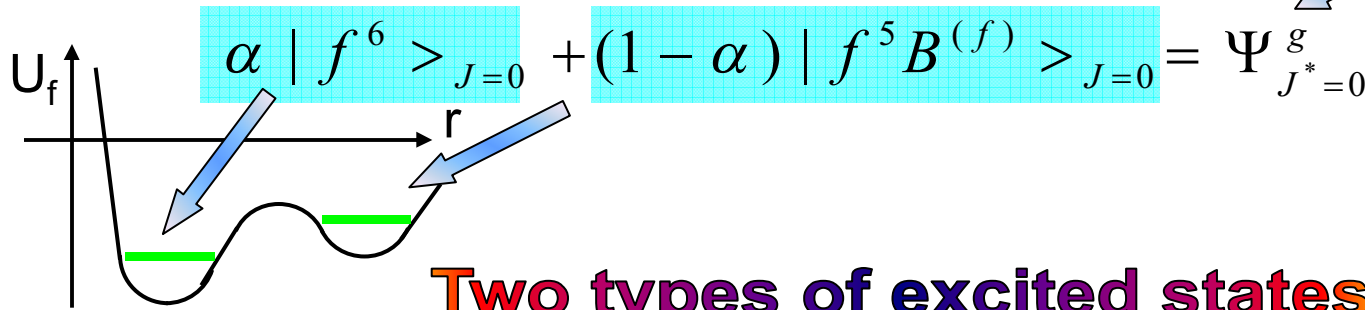




# MV ground state: "excitonic" model

Ion Sm:  $|f^{6,7}F_0\rangle \xrightarrow{\text{MV transition}} |f_{J=5/2}^5 \cdot f_{j=5/2}^*\rangle = |\tilde{f}^{6,7}F_0\rangle$

New ground state wave function:

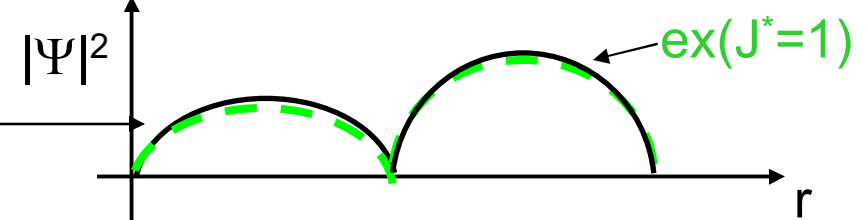
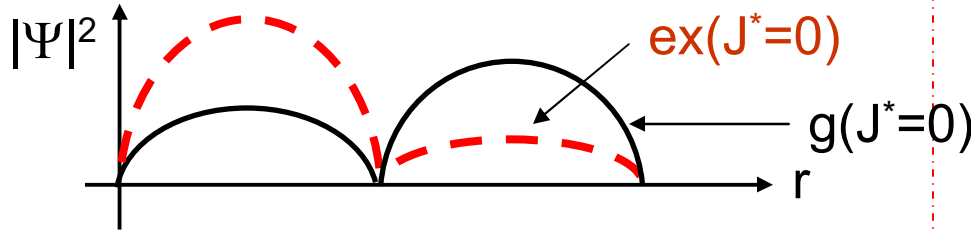


with charge transfer

$$\Psi_{J^*=0}^{ex} = (1-\alpha) |f^6\rangle_{J=0} - \alpha |f^5 B^{(f)}\rangle_{J=0}$$

with spin reorientation

$$\Psi_{J^*=1}^{ex} = \alpha |f^6\rangle_{J=1} + (1-\alpha) |f^5 B^{(f)}\rangle_{J=1}$$



"charge fluctuation"



anomalous electron-phonon interaction



phonon dispersion anomalies

"renormalization" of S-O excitation spectra

$$\omega_{J^*=0 \rightarrow 1}^{SO} \sim \langle f^* | \xi(r) | f^* \rangle \quad \xi(r) \sim \frac{\partial V(r)}{\partial r}$$

$$\omega_{J^*=0 \rightarrow 1}^{SO} = E_{J^*=1} - E_{J^*=0} = \alpha^2 \cdot \Delta_{SO}(f^6)$$

"low energy" excitation in IMNS or RS

for  $\text{SmB}_6$ :  $\alpha^2 \approx 0.5$ ;  $\hbar\omega^{SO} \sim 18$  meV

for  $\text{SmYS}$ :  $\alpha^2 \approx 0.8$ ;  $\hbar\omega^{SO} \sim 30$  meV

# Interplay of different interactions in systems under study

**YbB<sub>12</sub>**

**SmS&SmB<sub>6</sub>**

Local ground state

f-c  
hybridization

CEF

exchange

Magneto  
vibration  
interaction ?

f-c  
hybridization

exchange

CEF  
effects