

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,

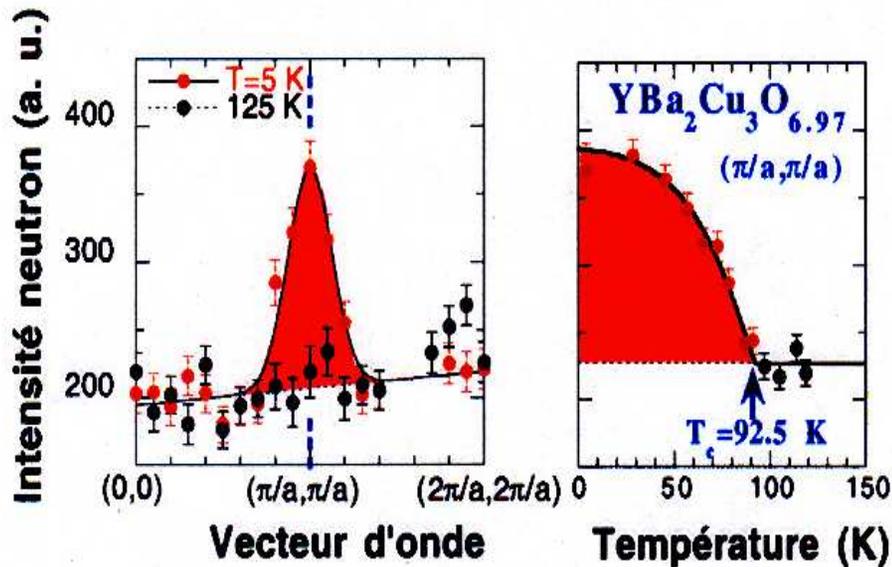
T.Takabatake

А.В.Голубков

"Resonant mode" in HTSC magnetic excitation spectra

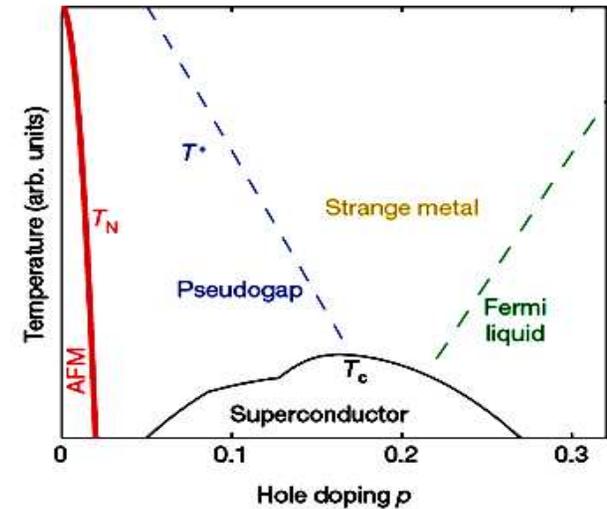
YBCO

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)

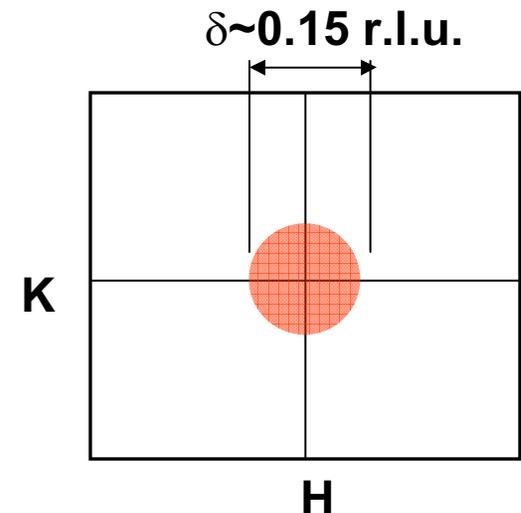
Generalized phase diagram of HTSC

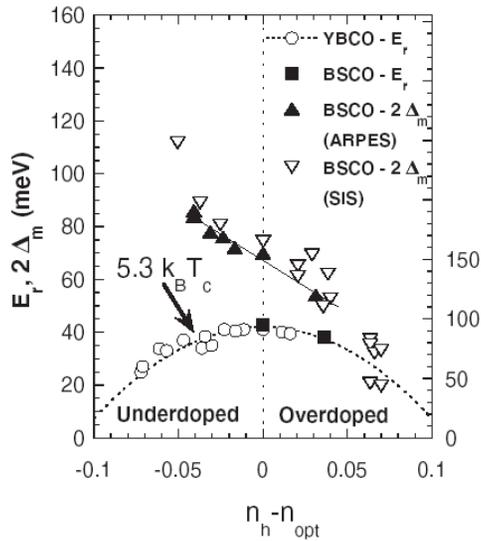


Optimally doped superconductor

Suppressed without energy shift

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



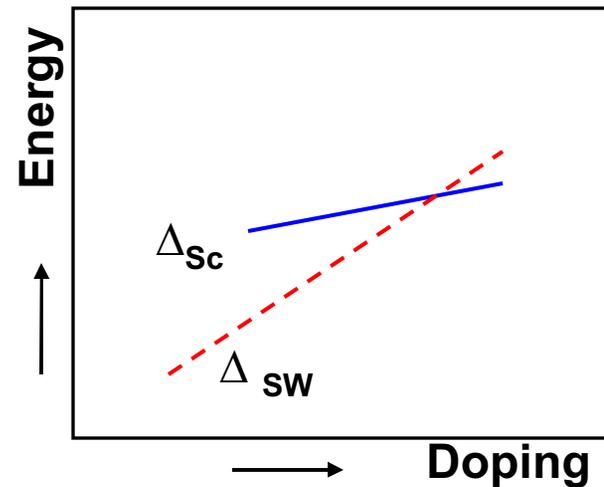
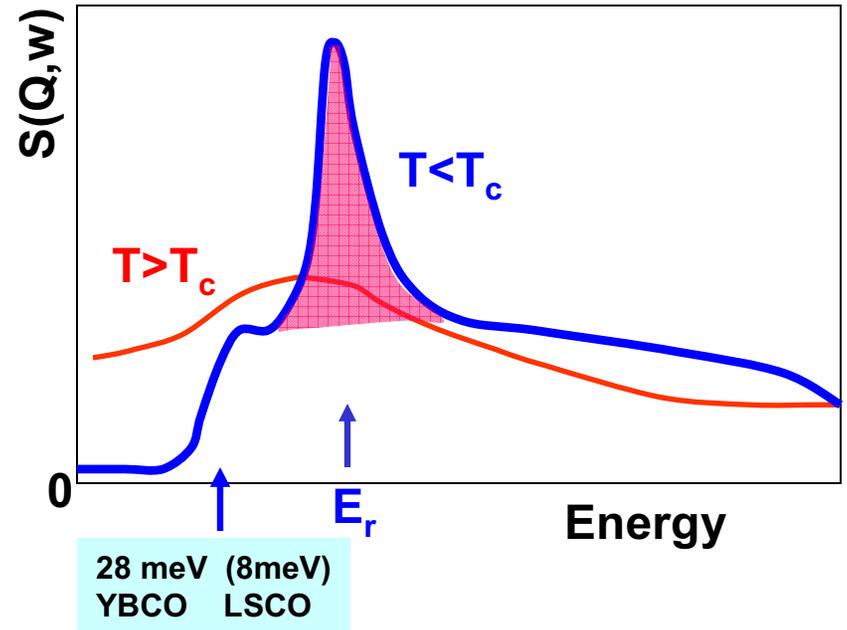


Correlation of E_r and hole density (T_c)

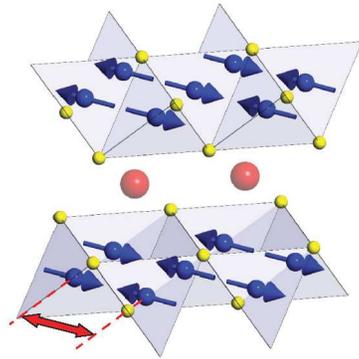
Transformation from spin-fluctuative to gap like spectrum due to SC state formation

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_{0.6}K_{0.4}Fe₂As₂, T_c=38K



BaFe₂As₂ is antiferromagnetically ordered with Q_{AF} = 1.15 Å⁻¹

Figure 1 | The crystal structure of Ba_{0.6}K_{0.4}Fe₂As₂. The unit cell of Ba_{0.6}K_{0.4}Fe₂As₂ contains two layers of Fe₂As₂ 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 BaFe₂As₂ (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.

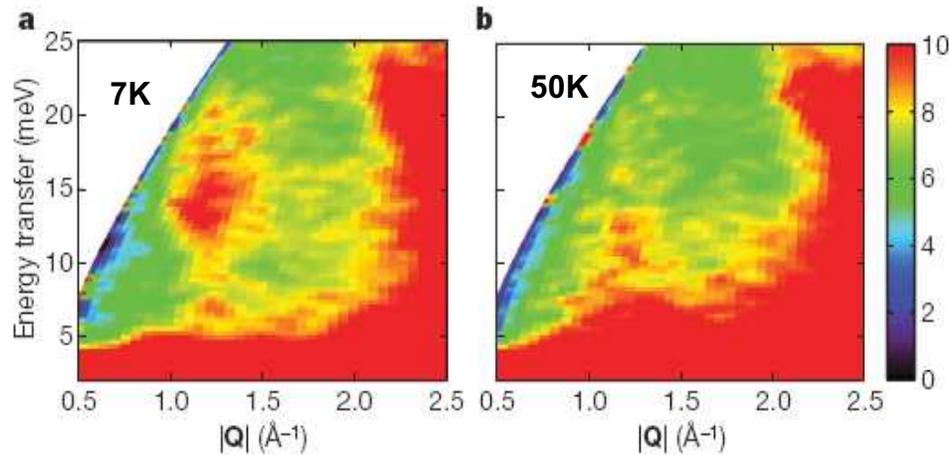


Figure 2 | Resonant spin excitation in Ba_{0.6}K_{0.4}Fe₂As₂. Inelastic neutron scattering, measured using an incident neutron energy of 60 meV at temperatures below (a, 7 K) and above (b, 50 K) T_c, shows the development of a magnetic excitation in the superconducting phase at an energy transfer of 14 meV and a momentum transfer of 1.15 Å⁻¹. 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.

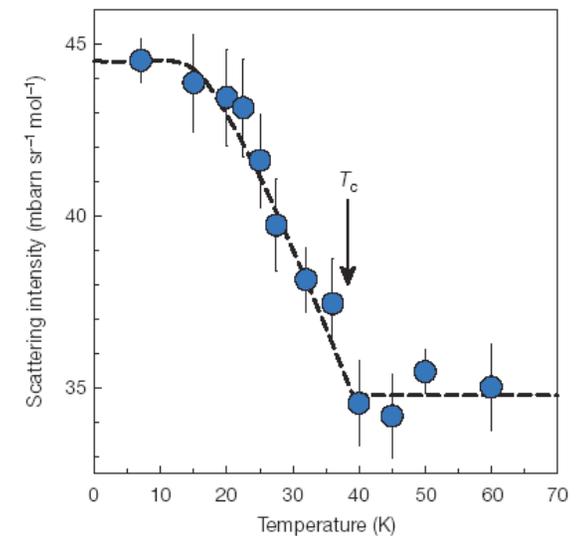


Figure 4 | Temperature dependence of the resonant spin excitation. The inelastic neutron scattering intensity from Ba_{0.6}K_{0.4}Fe₂As₂ integrated over Q in the range 1.0–1.3 Å⁻¹ and over ω in the range 12.5–17.5 meV. The integration range corresponds to the region of maximum intensity of the resonant excitation observed below T_c (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_c and shows the average value of the integrals above T_c.

A. D. Christianson¹, E. A. Goremychkin^{2,3}, R. Osborn², S. Rosenkranz², M. D. Lumsden¹, C. D. Malliakas^{2,4}, I. S. Todorov², H. Claus², D. Y. Chung², M. G. Kanatzidis^{2,4}, R. I. Bewley³ & T. Guidi³

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, Ce₃Bi₄Pt₃,
Ce₃Sb₄Pt₃, CeRhSb, ...
YbB₁₂ !
SmB₆, (SmS)
U₃Sb₄Pt₃, UNiSn, ...

“Высокотемпературный” предел:

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

“Низкотемпературный” предел (основное состояние) :

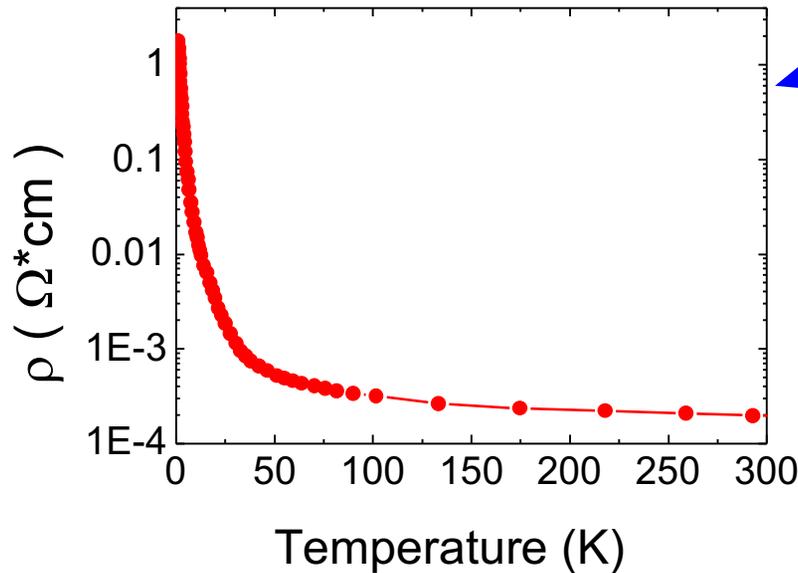
полупроводник (щель ~ 100 К) с нулевым магнитным моментом

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

Специфические свойства определяются динамическими эффектами :

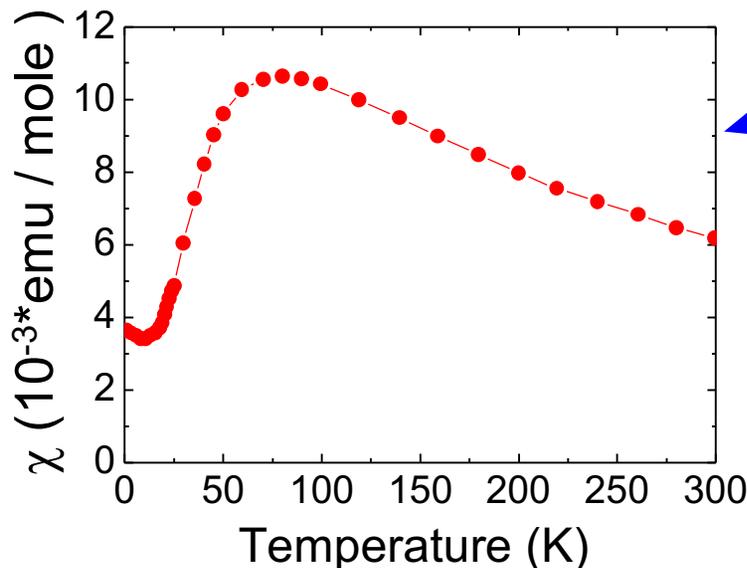
нейтронная спектроскопия – эффективный инструмент!

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



▲ Электросопротивление,
Takabatake et.al., 1998

ниже $T^* \sim 50-80\text{K}$ 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

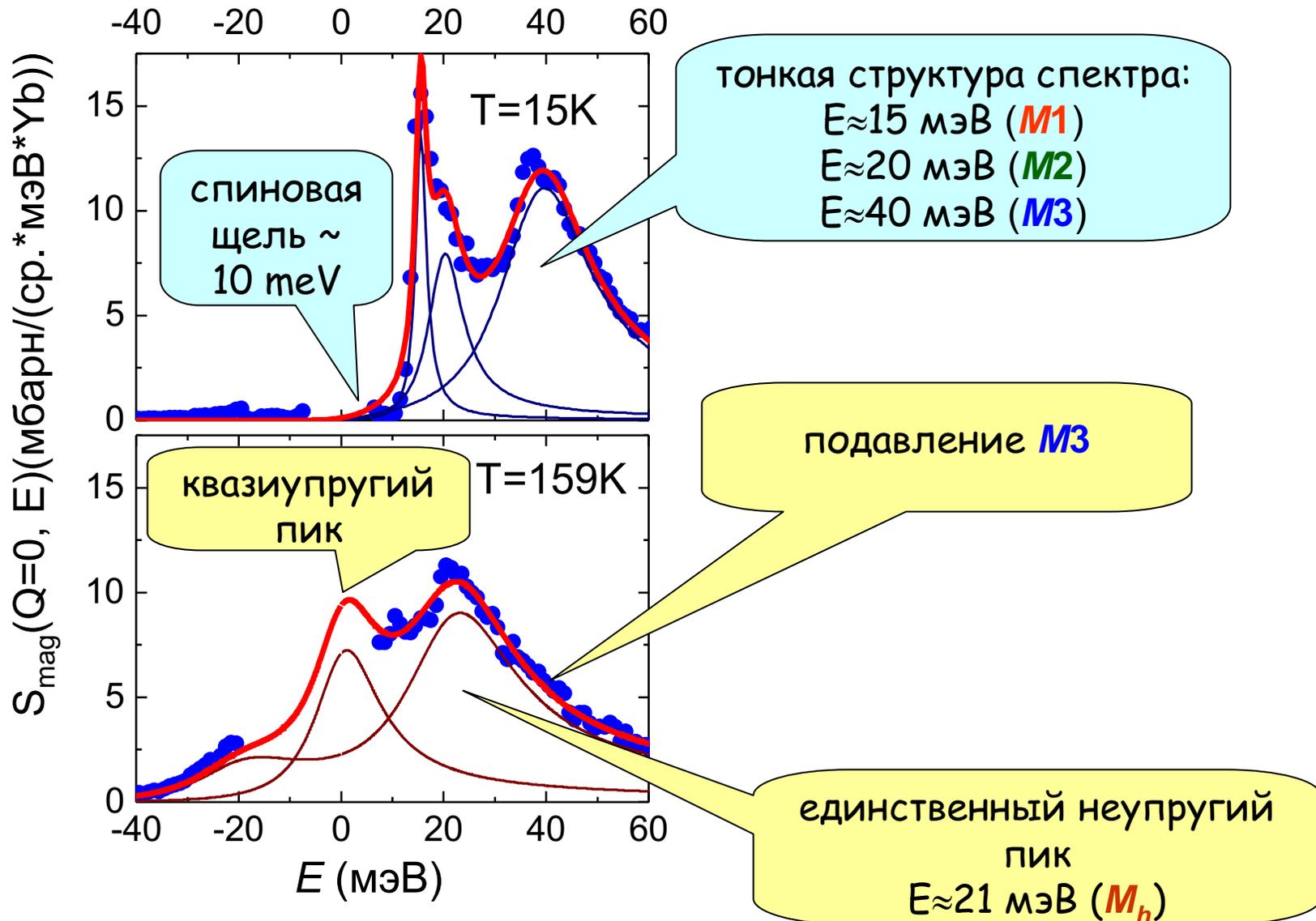
($x=0.25, 0.75, 0.9$)

(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

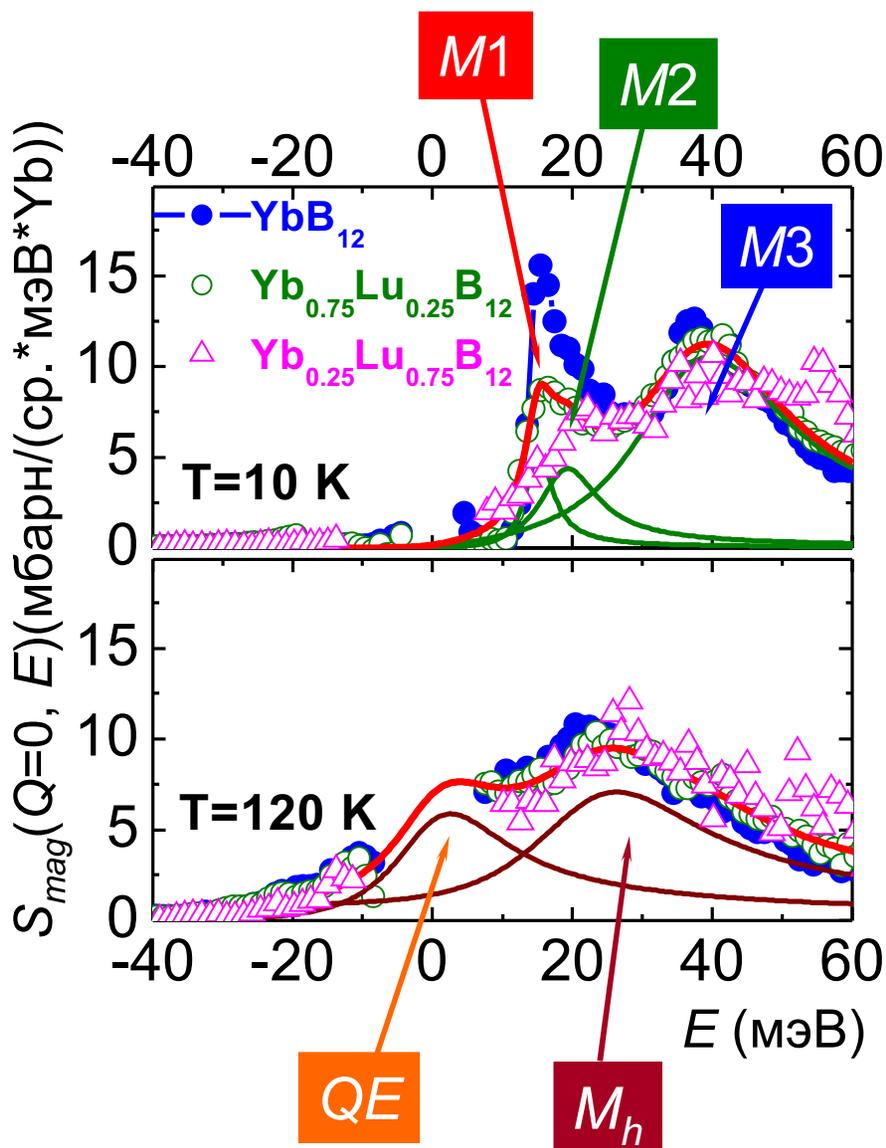
Спектр магнитных возбуждений в YbV_{12}



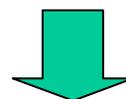
Вопросы к спектрам магнитных возбуждений
поликристаллического YbV_{12} :

- 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 $M3$.



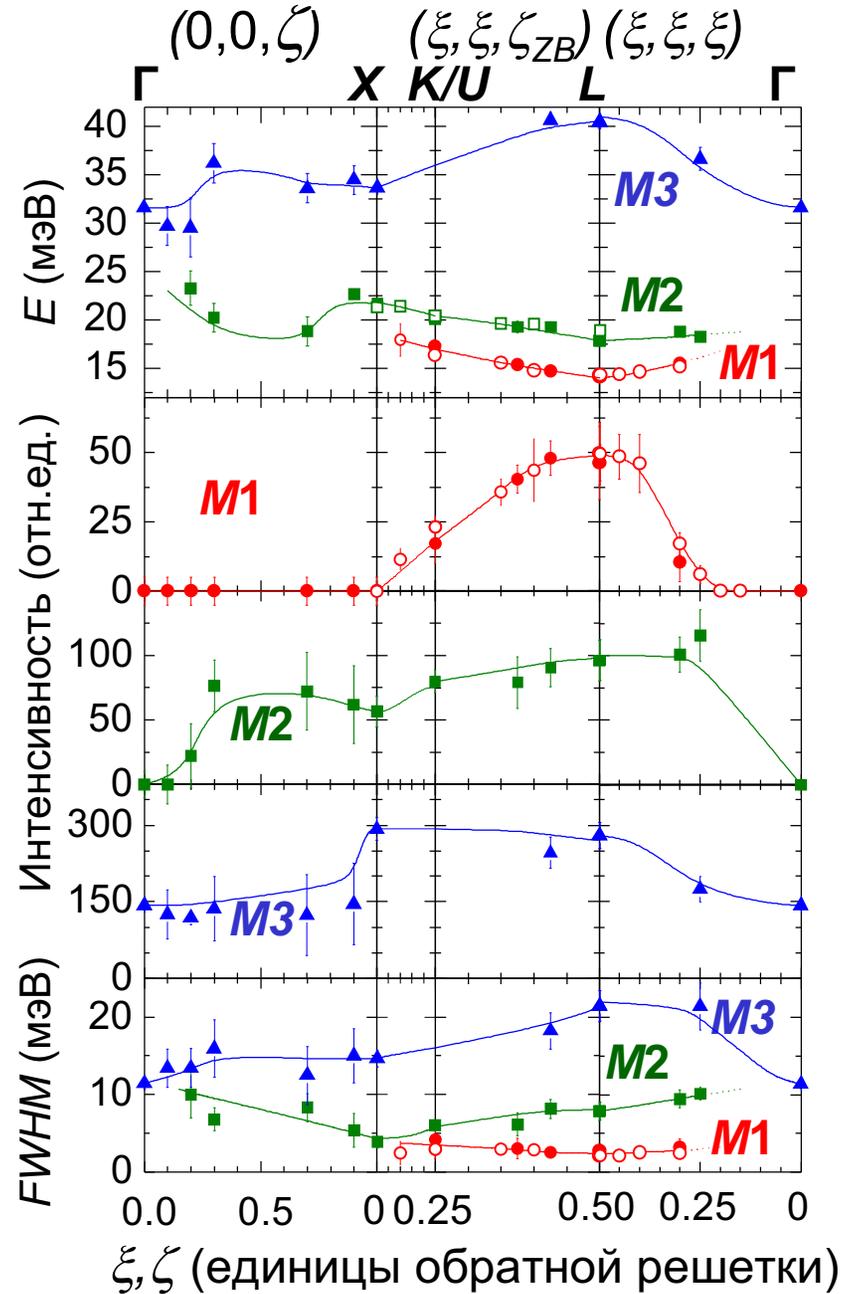
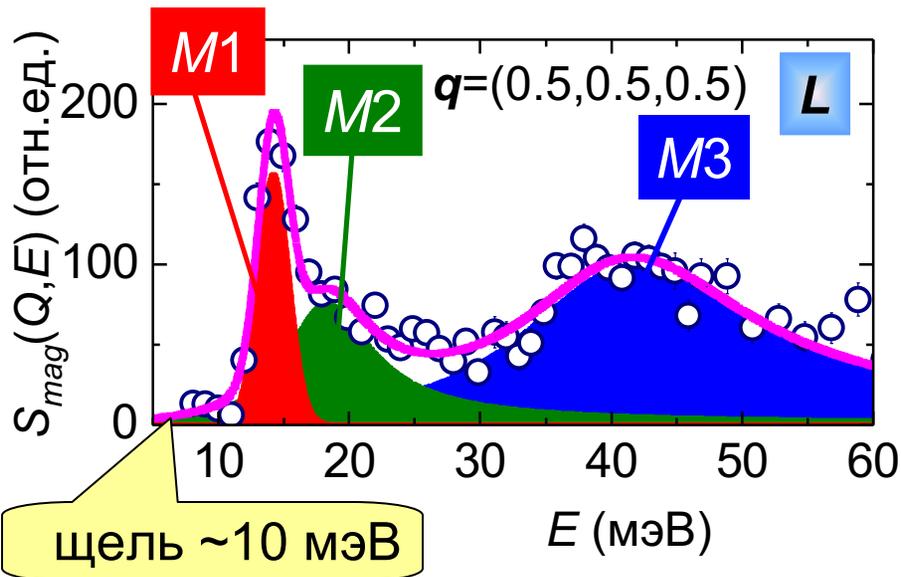
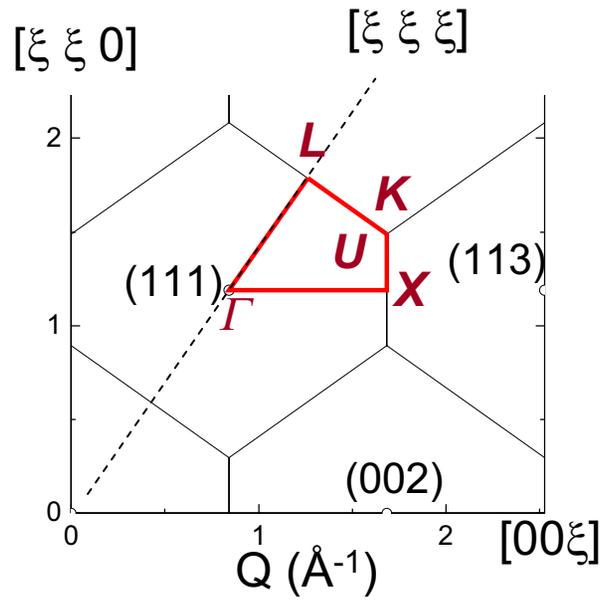
✂ Формирование спиновой щели и возбуждений $M2$ и $M3$ обусловлено одноузельными эффектами.
 $M1$ является кооперативным.

Высокотемпературный режим является чисто одноузельным (спиновые флуктуации).

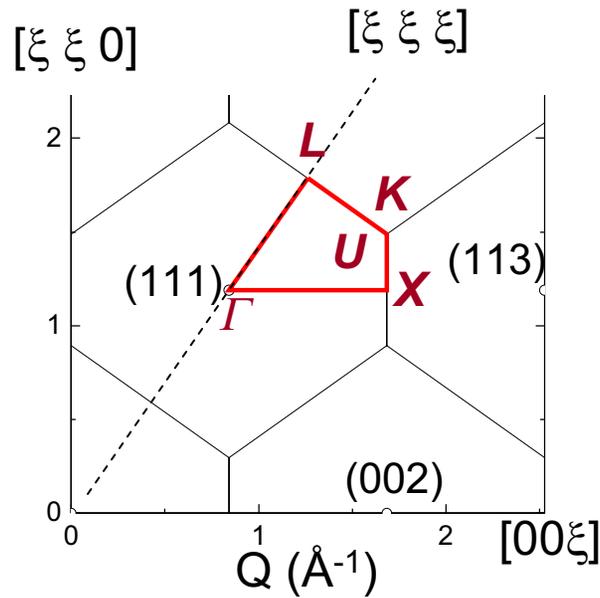
Из спектров поликристаллического UvB_{12}
мы узнали:

- 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 $T=5K$



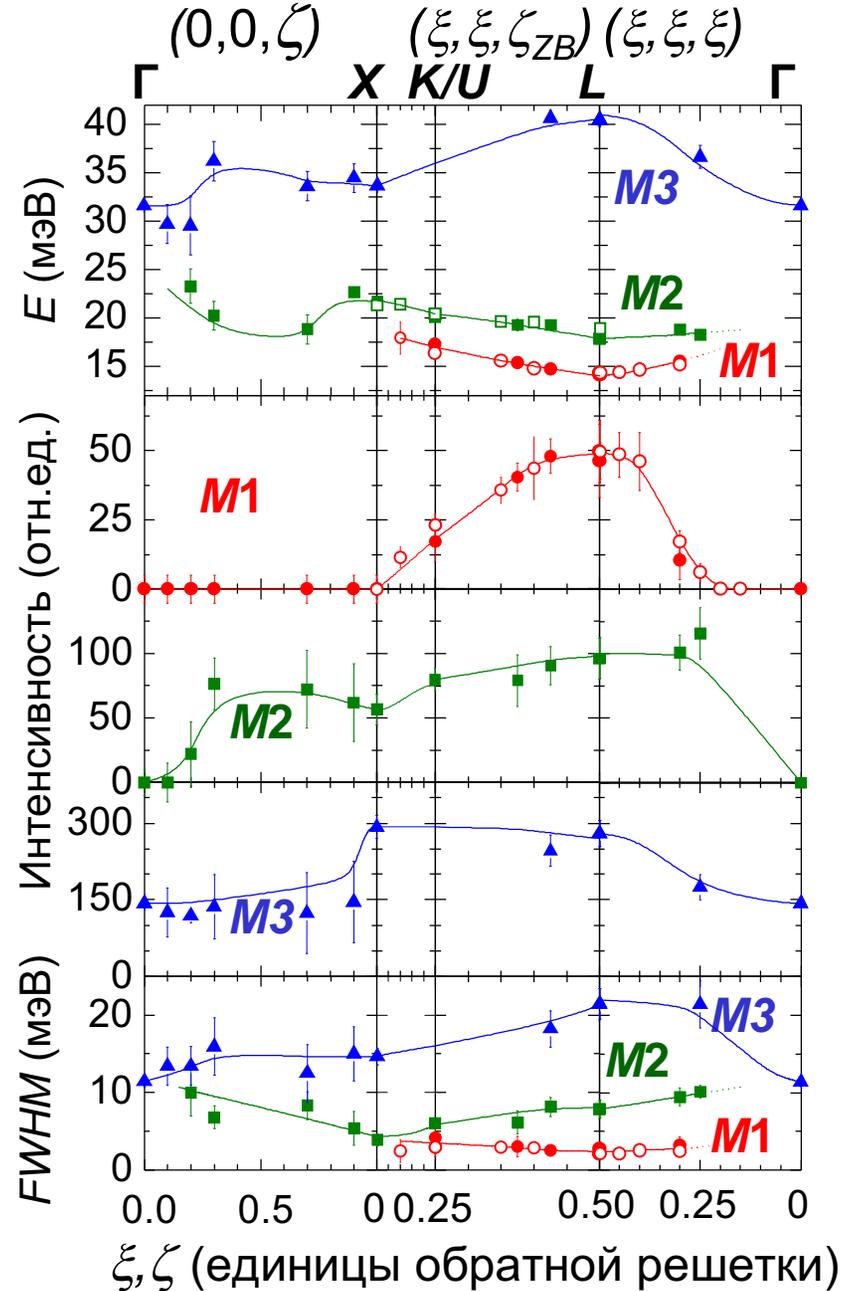
Дисперсия магнитных возбуждений в YbV_{12} при $T=5K$



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

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

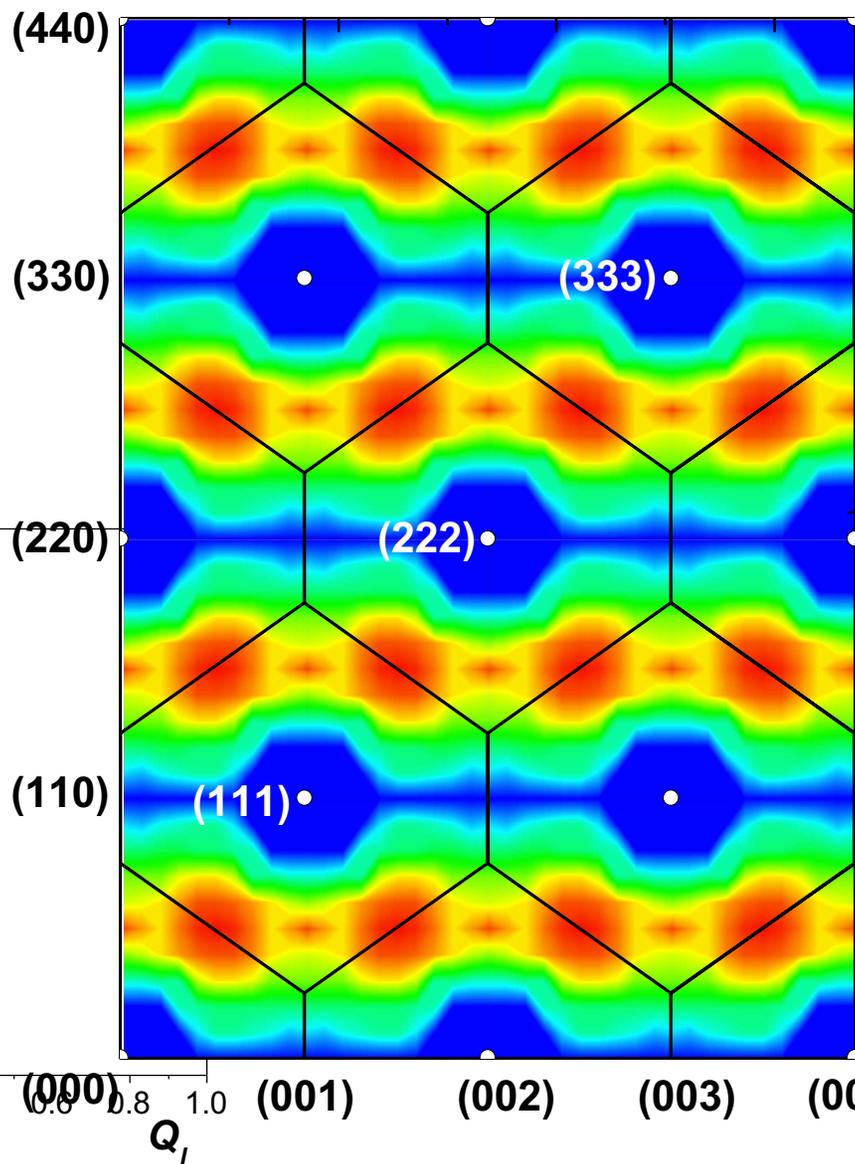
Ширина **M1** определяется приборным разрешением



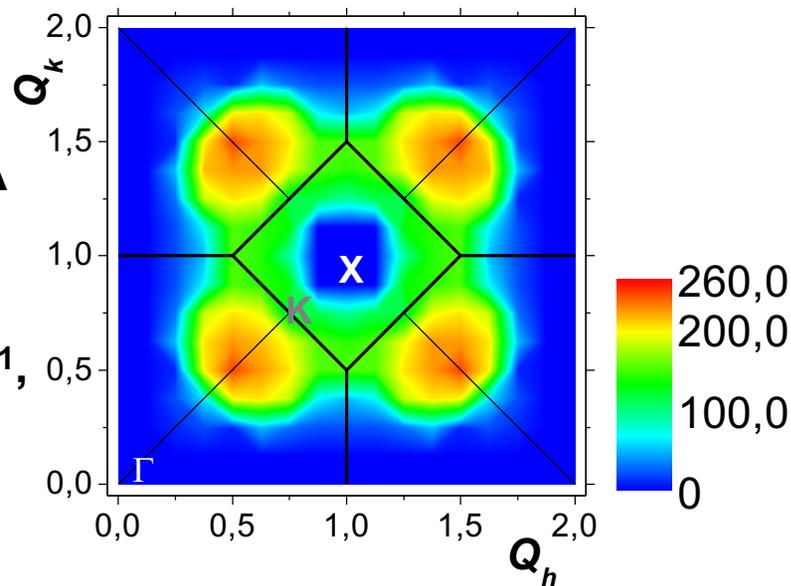
Интерполяция распределения интенсивности для M1 ($E \sim 15$ мэВ)

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

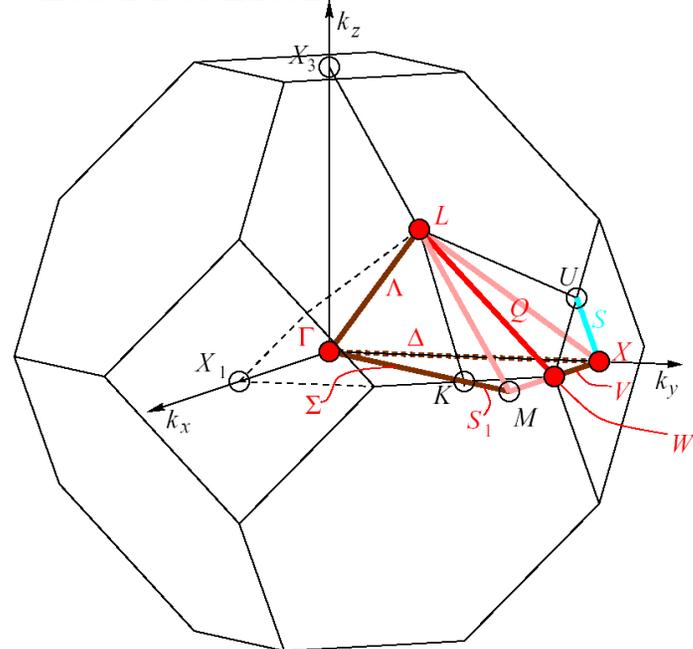
$\Gamma_{\parallel} = 0.58 \text{ \AA}^{-1}$, $\xi_{\parallel} = 3.4 \text{ \AA}$



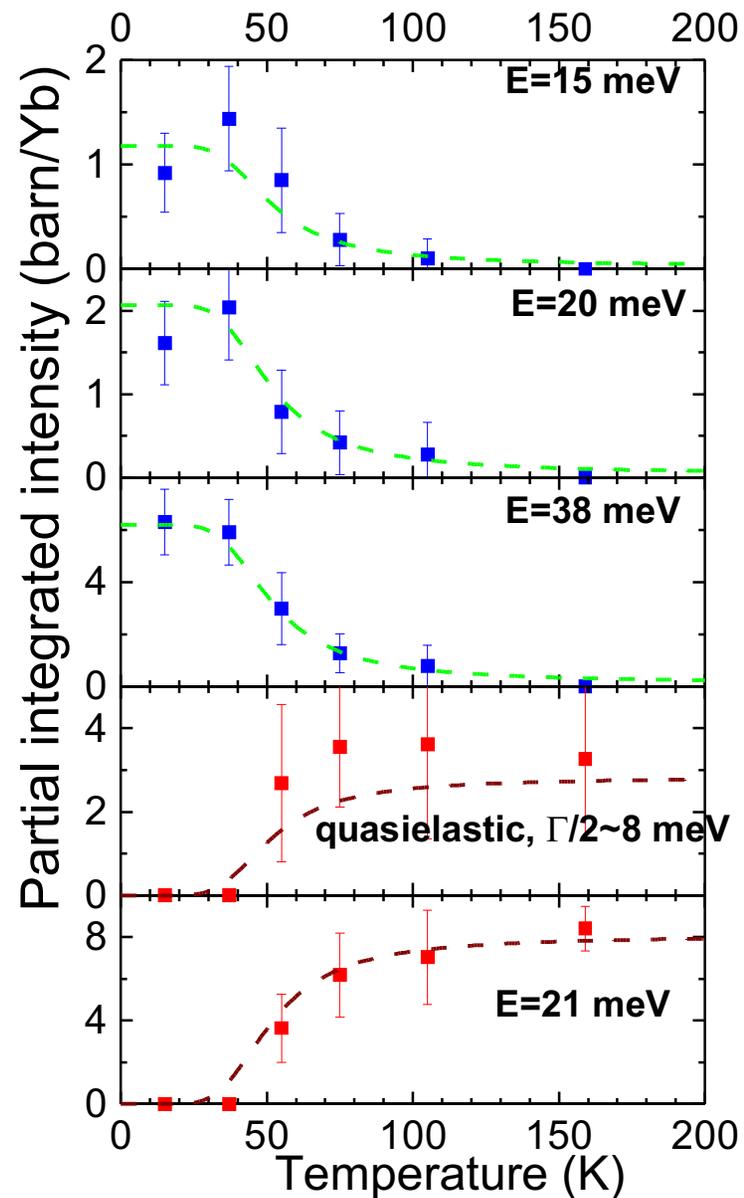
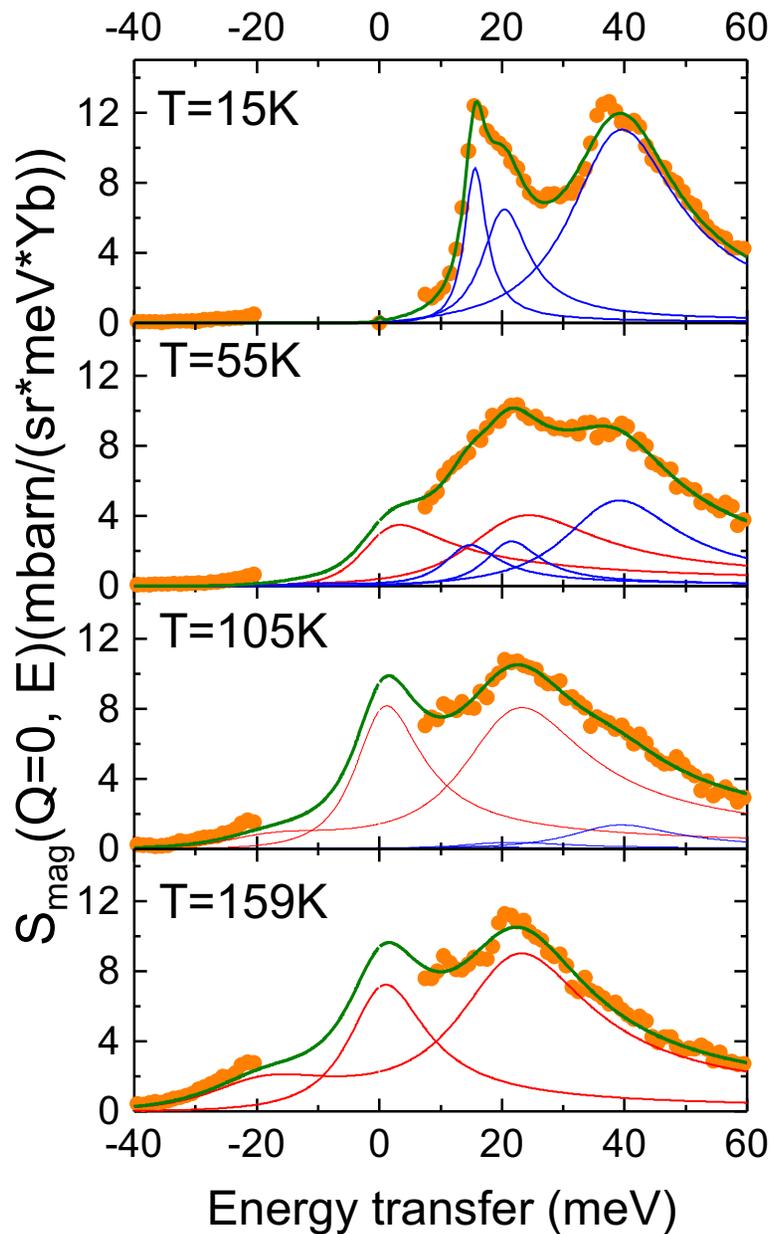
$\Gamma_{\perp} = 0.37 \text{ \AA}^{-1}$,
 $\xi_{\perp} = 5.6 \text{ \AA}$



Brillouin zone

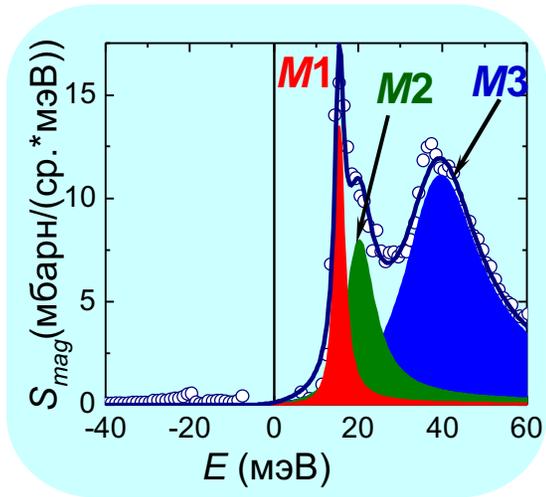


YbB₁₂ dynamical magnetic response: temperature evolution of spectral components

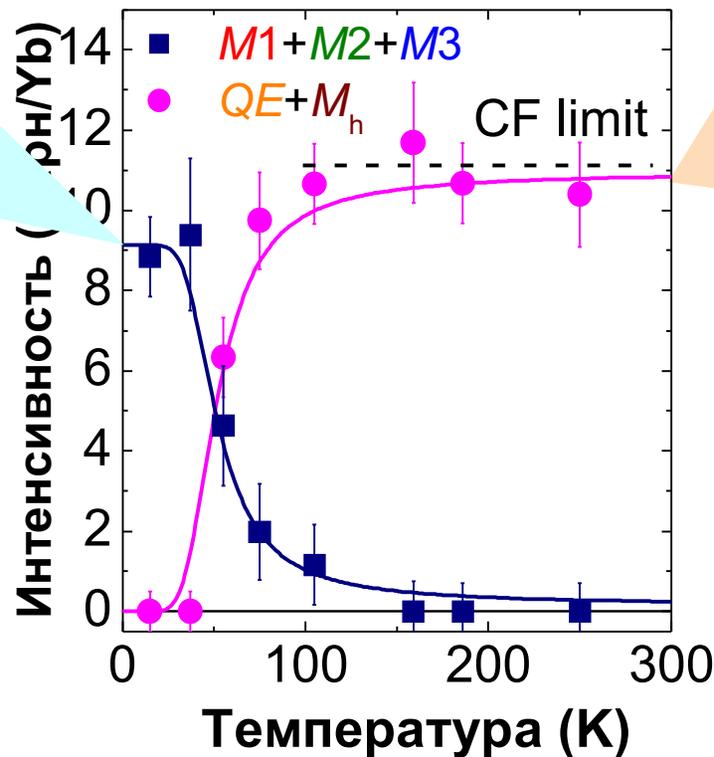


Magnetic Cross-sect.	
qe	el
3	1.5
ie	8.1
tot	12.6

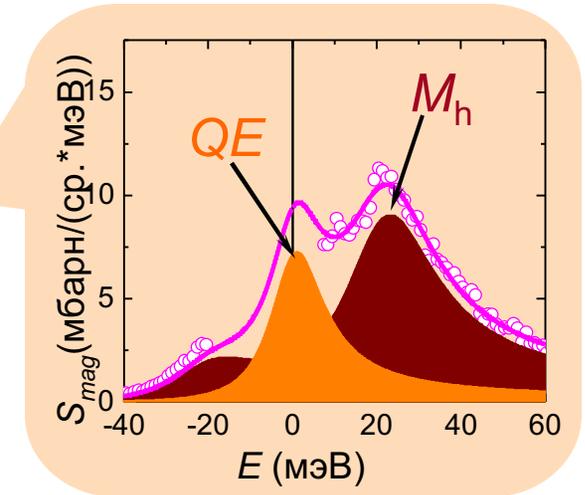
Температурная эволюция магнитных возбуждений в YbV_{12}



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.

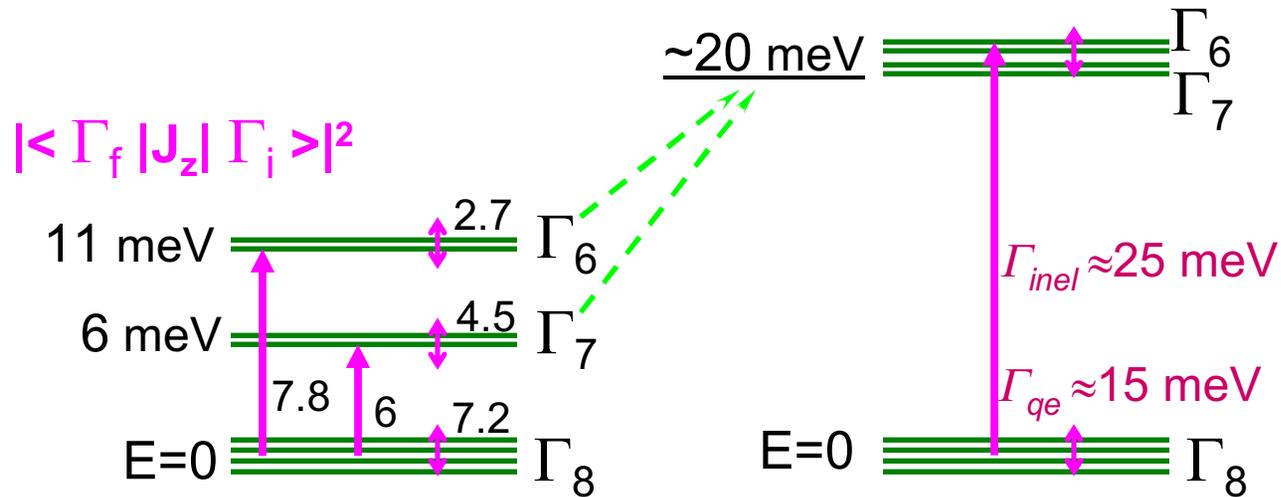
Для **$M1$** наблюдается сокращение размерности корреляций (2d). Энергетическая ширина **$M1$** в спектре НРН ограничена приборным разрешением (“резонансная мода”).

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

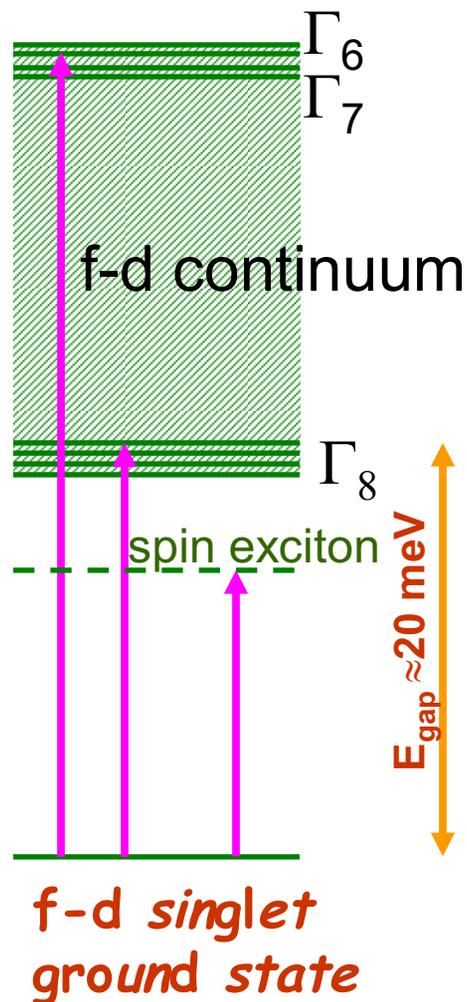


ожидаемая схема уровней
КЭП для Yb^{3+} в YbV_{12}
(экспериментальная оценка
по примесной метке Er^{3+})

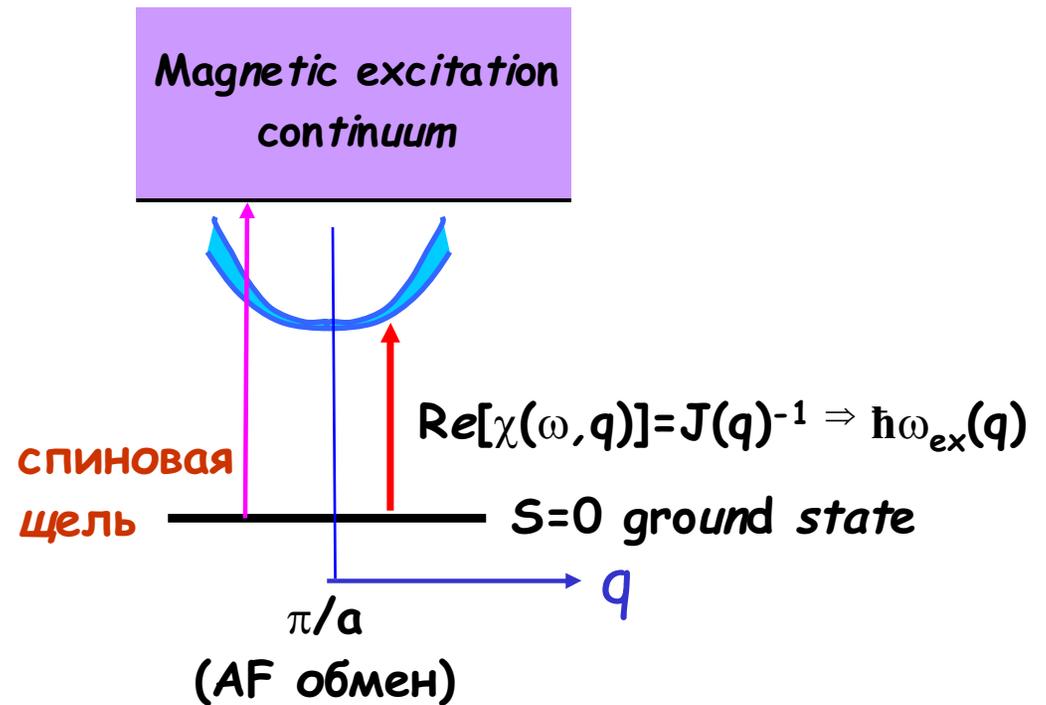
Наблюдаемое
расщепление при
 $T > 100\text{K}$

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

локальная щель *



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



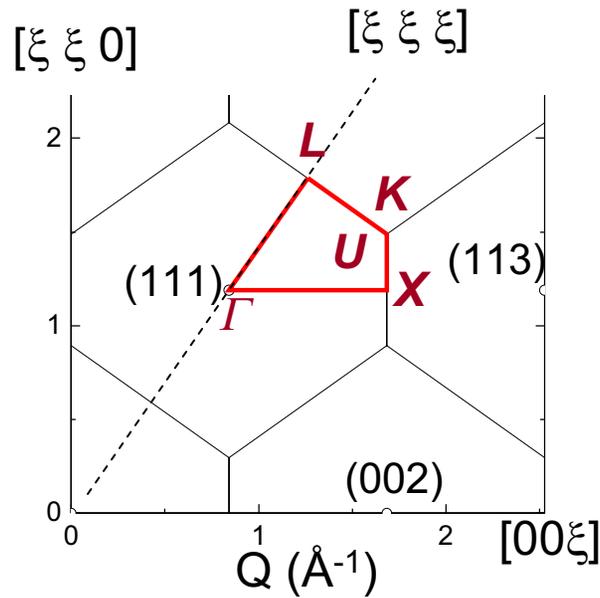
характерные особенности:

- 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)

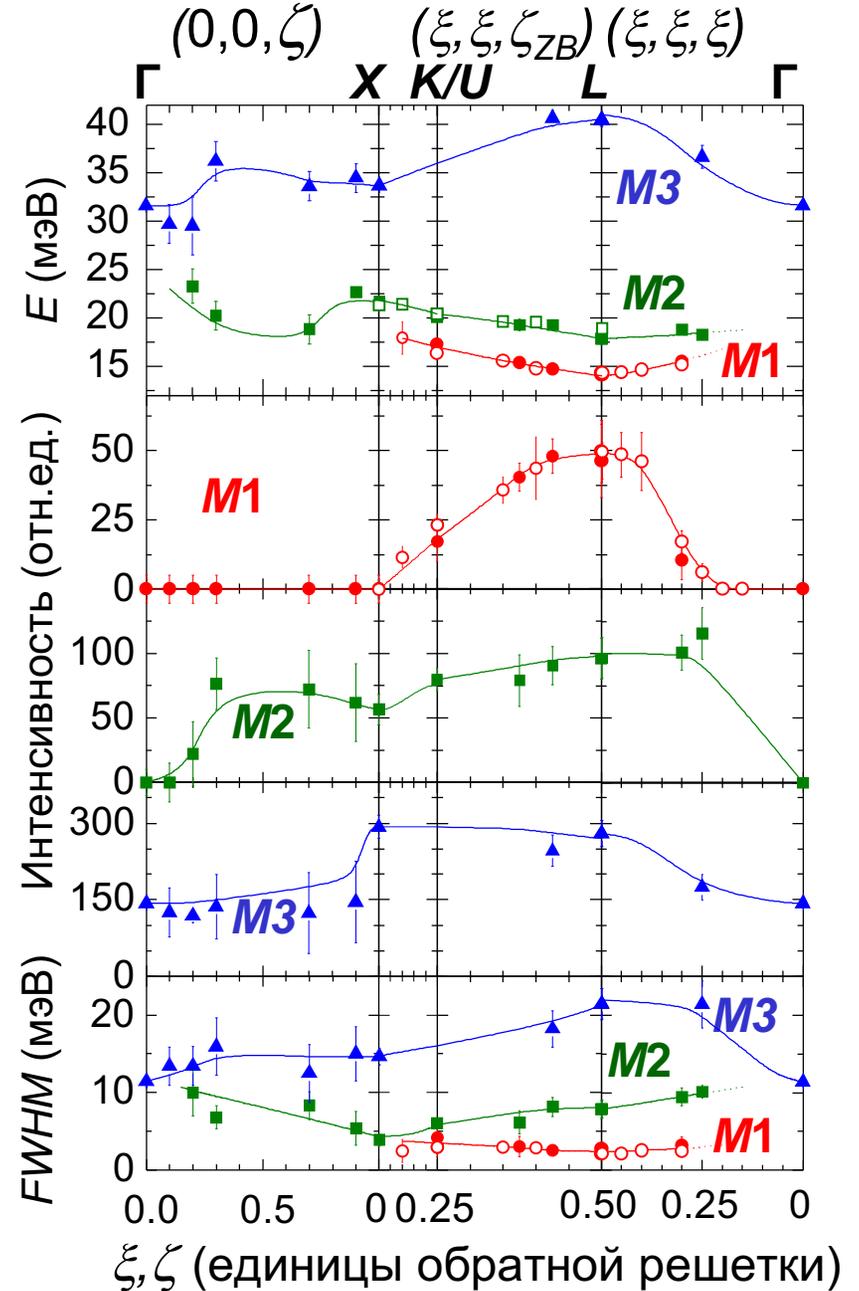
Дисперсия магнитных возбуждений в YbV_{12} при $T=5K$



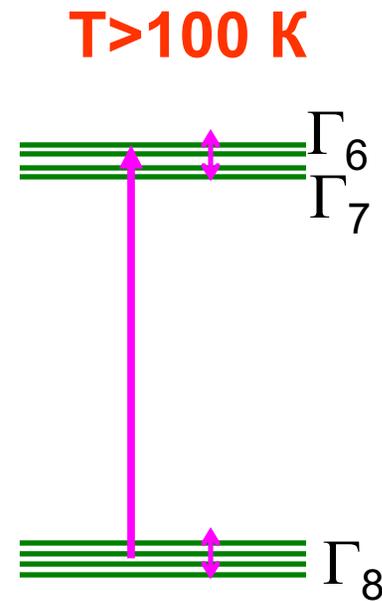
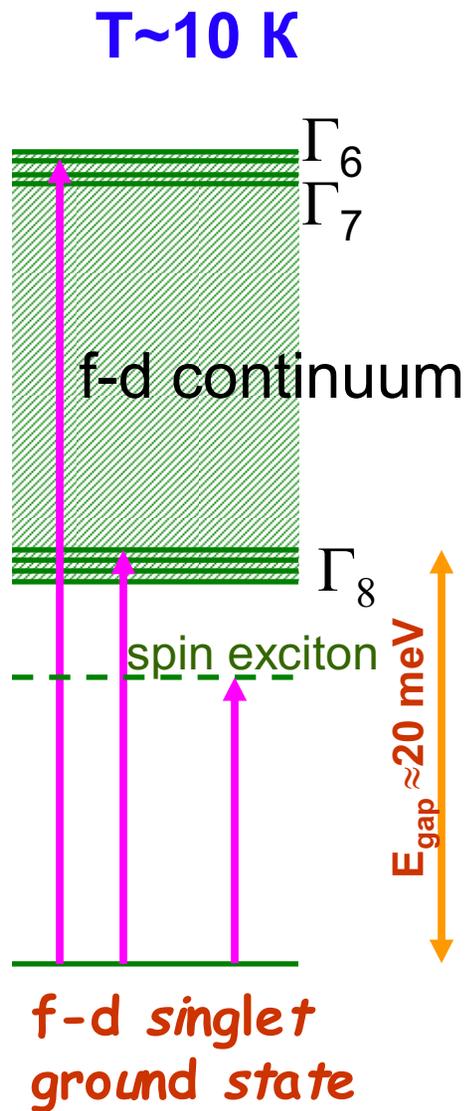
M1 имеет минимум энергии и максимум интенсивности в L -точке (АФМ характер).

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

Ширина **M1** определяется приборным разрешением



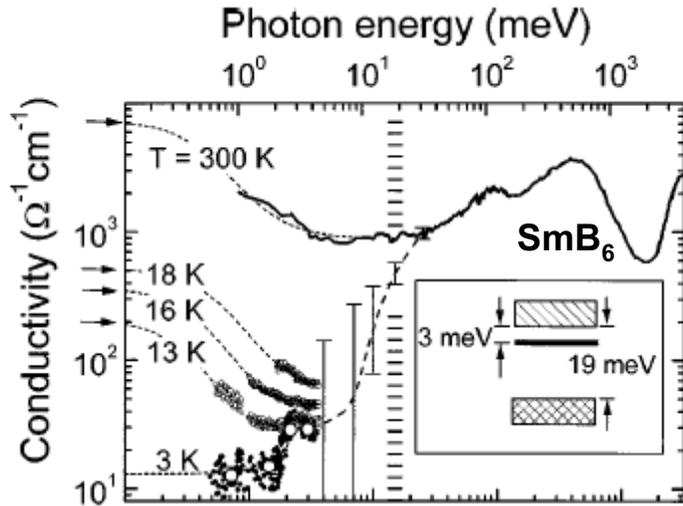
Интерпретация результатов: температурная эволюция



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

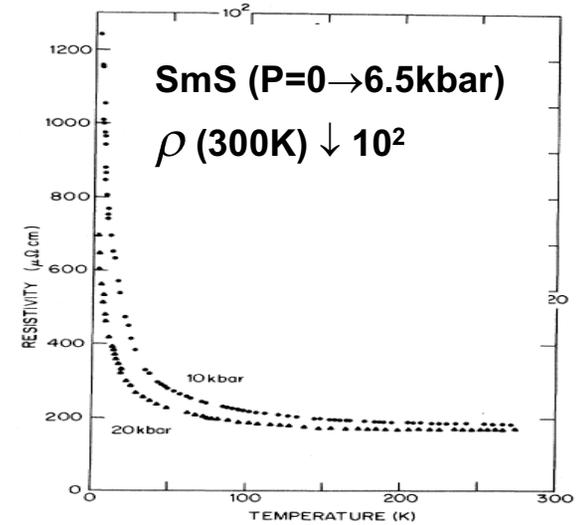
$$g_{loc}^f = 8 \quad g_{band}^d = (2s + 1)(2l + 1) = 10$$

SmB_6 и SmS^* : промежуточно-валентные полупроводники

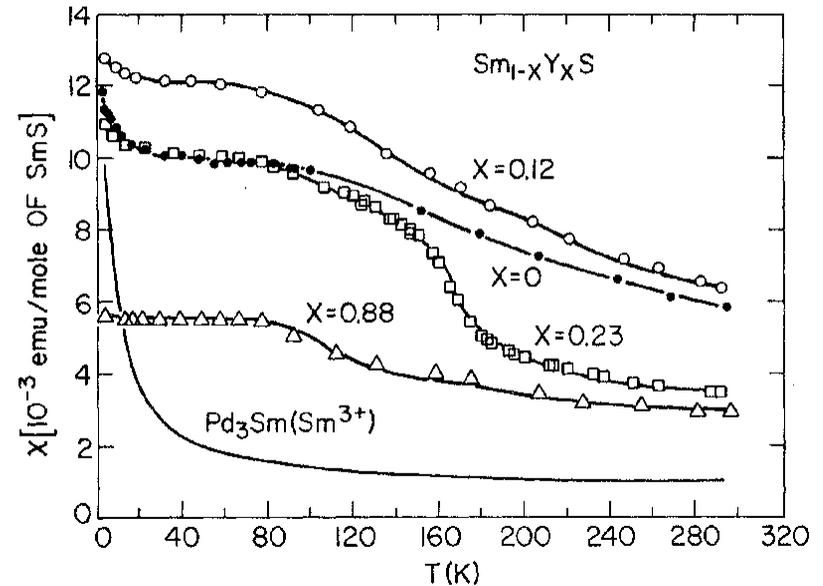
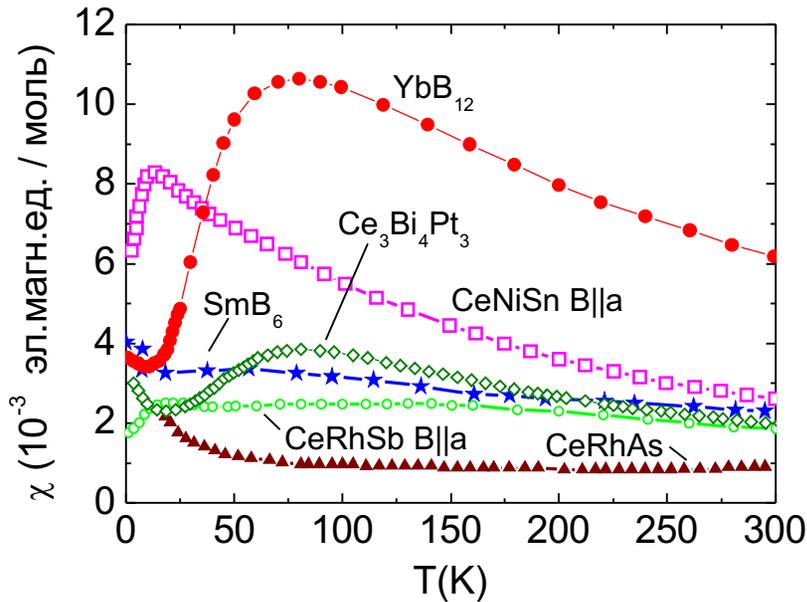


B. Gorchunov, N.Sluchanko et.al., PRB 59 (1999)

Resistivity of SmS



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



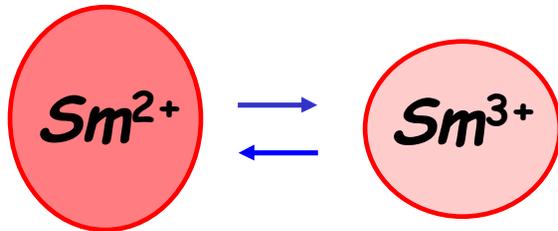
L.J.Tao, F. Holtzberg, PRB 11(10), 1975

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):

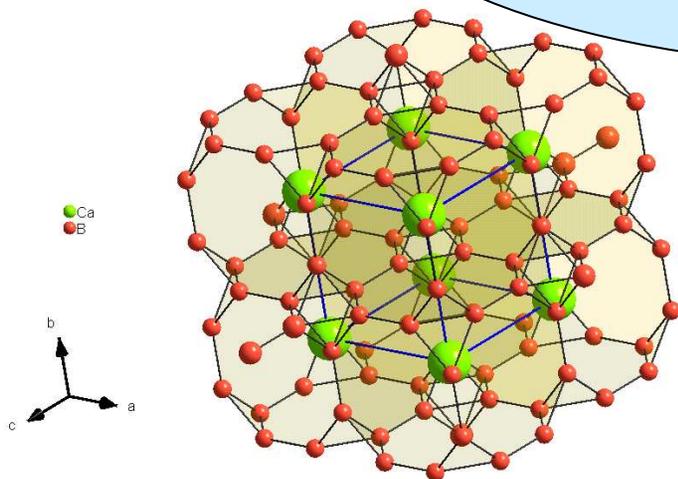
спин-орбитальные переходы конфигураций f^6 и f^5 .

Промежуточно-валентная система SmB_6

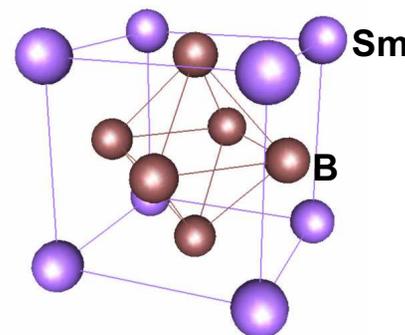
TOF, TAS : спектры магнитных возбуждений, динамика решетки, магнитный форм-фактор

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}Sm и ^{11}B

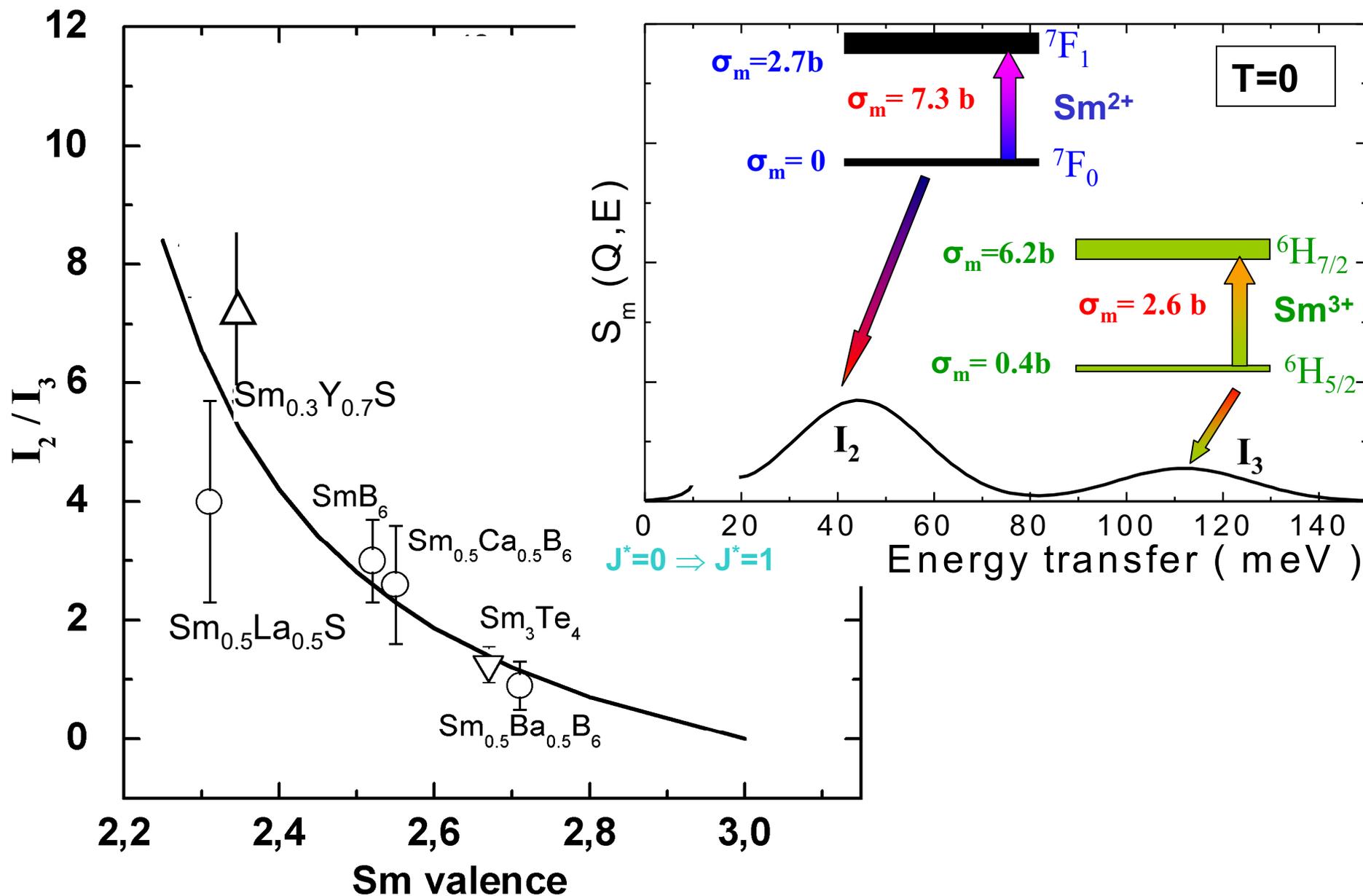
SmB_6 valence=2.5
 $\text{Sm}_{1-x}\text{La}_x\text{B}_6$ valence \rightarrow 2.0
 $\text{Sm}_{1-x}(\text{Ca}, \text{Ba})_x\text{B}_6$ valence \rightarrow 3.0



SmB_6
простая
кубическая
структура
 $a = 4.13 \text{ \AA}$

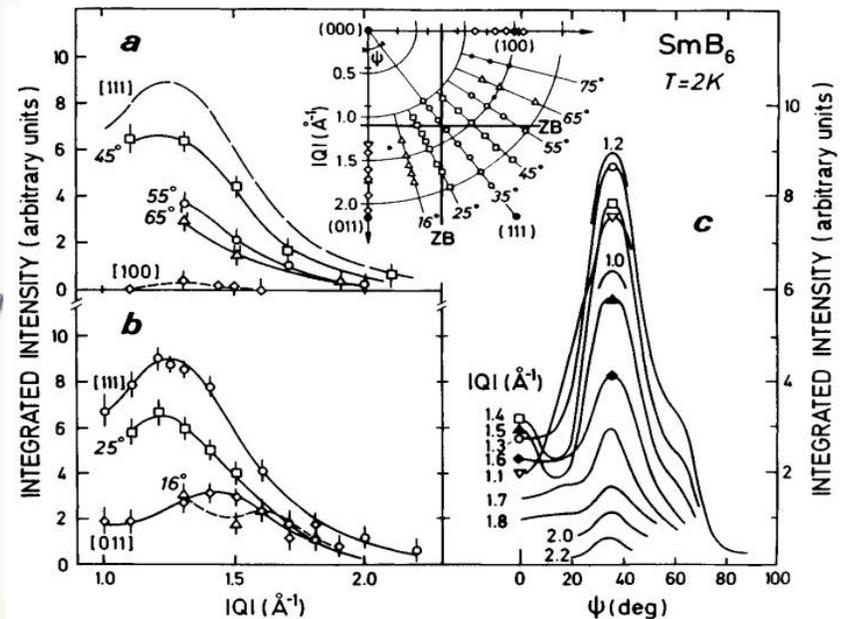
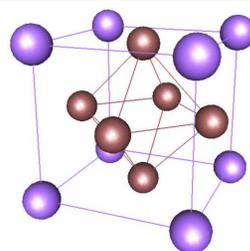
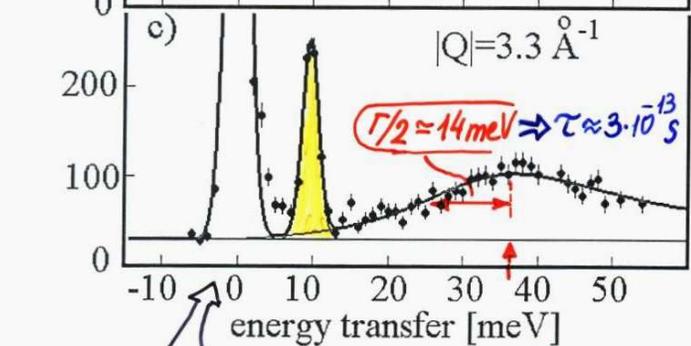
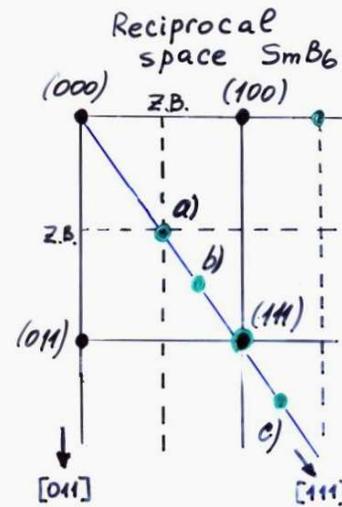
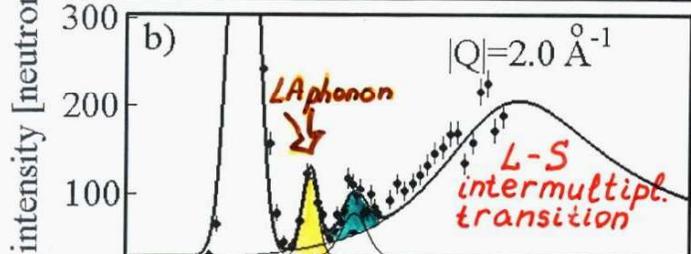
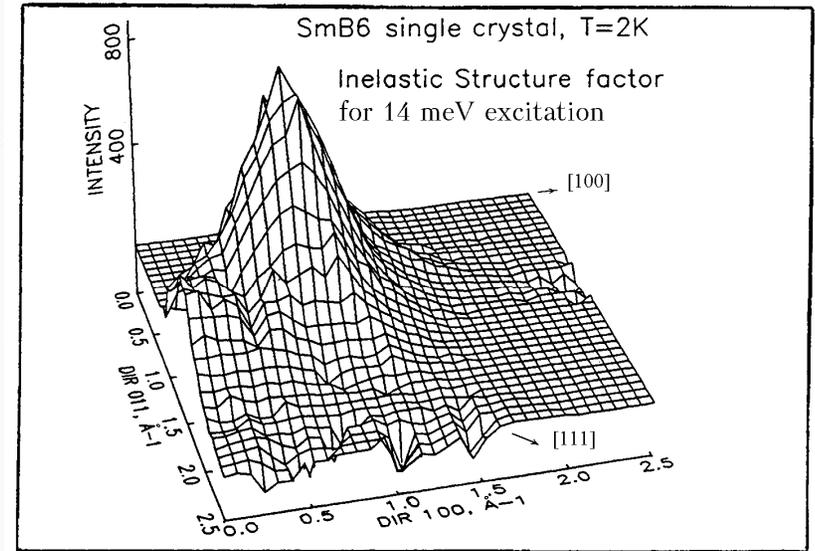
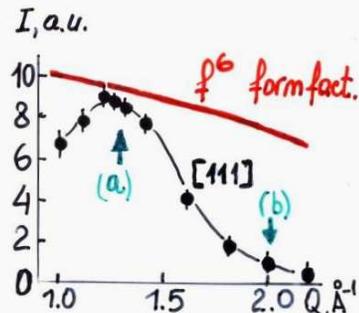
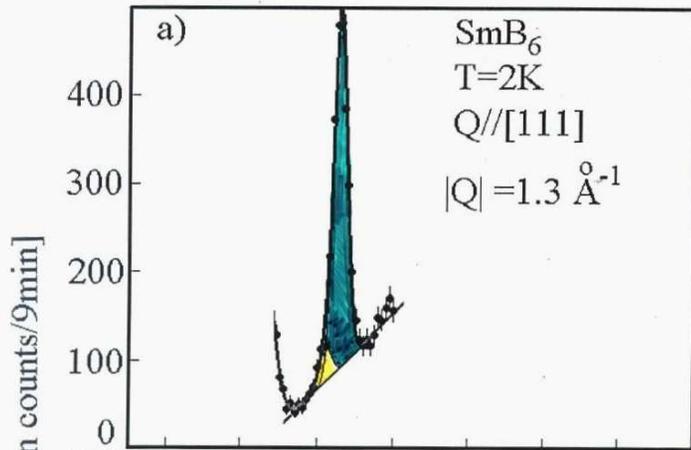


Межмультиплетные (спин-орбитальные) возбуждения



Низкоэнергетическая ("резонансная") мода в SmB_6

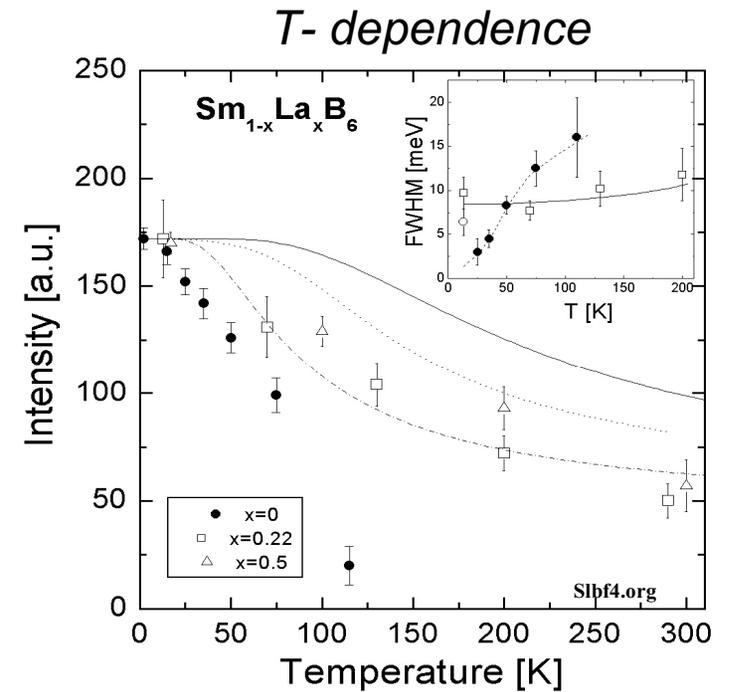
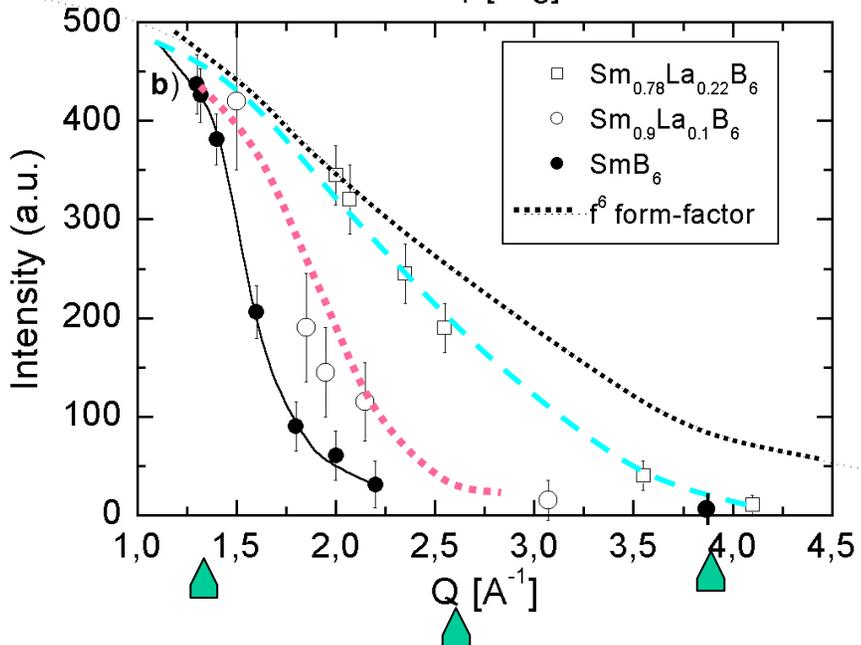
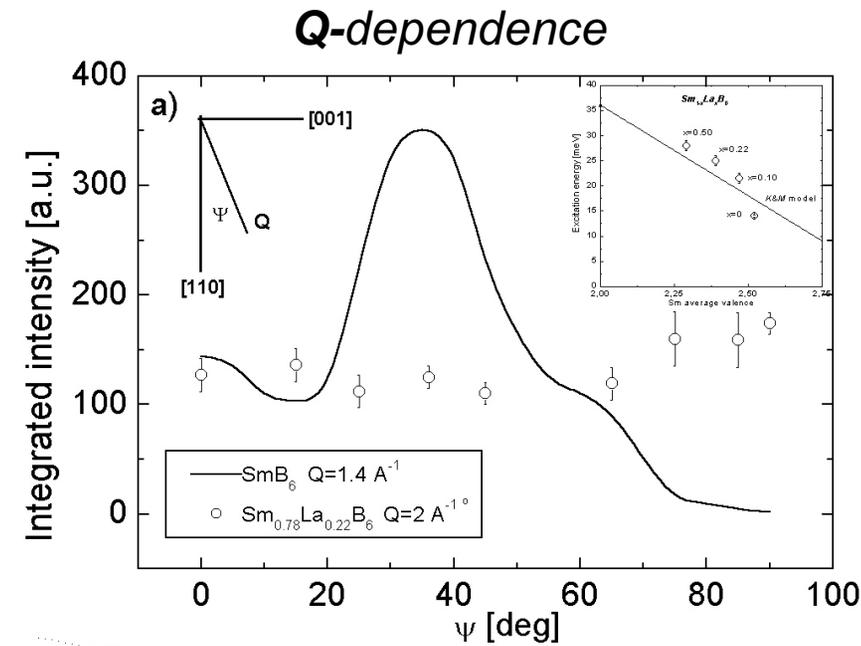
^{154}Sm B_6 single crystal



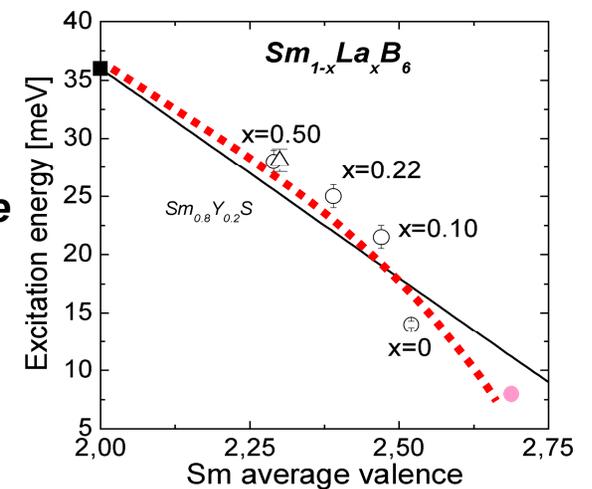
elastic nuclear scattering peak

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

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



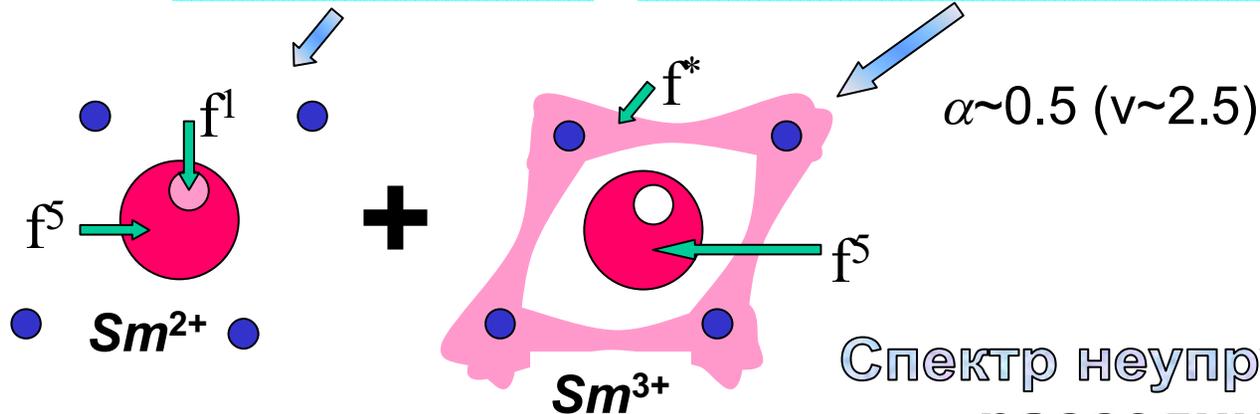
Energy-valence correlation



SmV₆- ПВ состояние экситонного типа

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

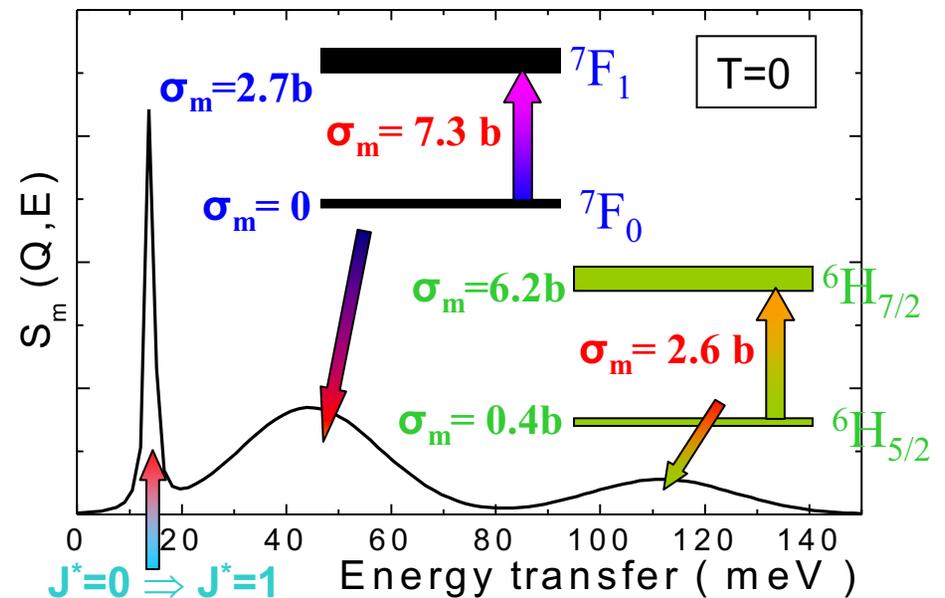
$$\Psi_{J^*=0}^g = \alpha^{1/2} |f^6, {}^7F_0\rangle + (1-\alpha)^{1/2} |f^5 B^{(f)}, {}^7F_0\rangle \quad \leftarrow \text{ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ}$$



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 $Sm-Sm$?!

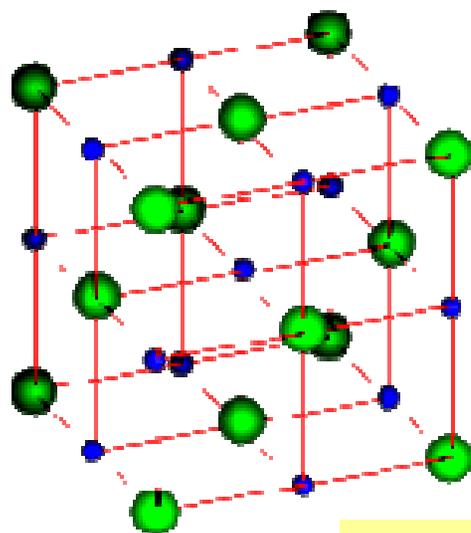
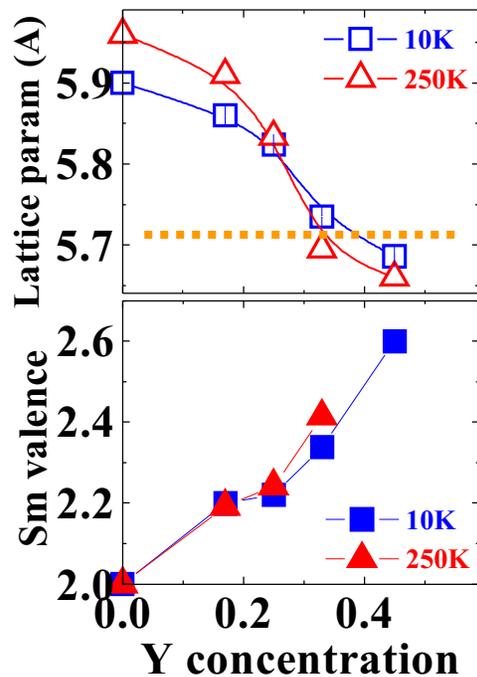
Промежуточная валентность в SmS

"химическое давление"

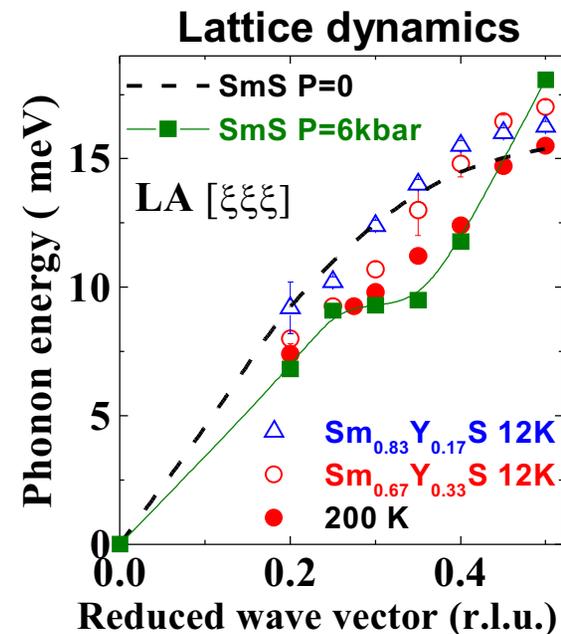
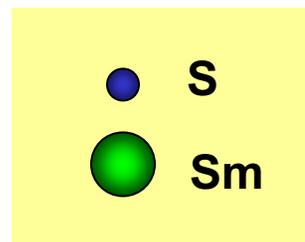
$Sm_{1-x}Y_xS$ непрерывный ЭФП

$P = 6$ кбар

ЭФП в "золотую" фазу,
валентность ~ 2.7

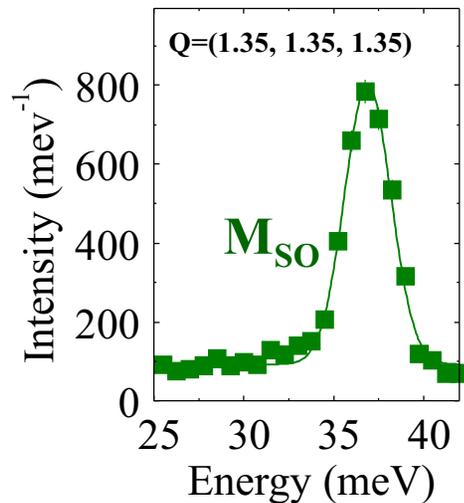


SmS
 $a = 5.93 \text{ \AA}$

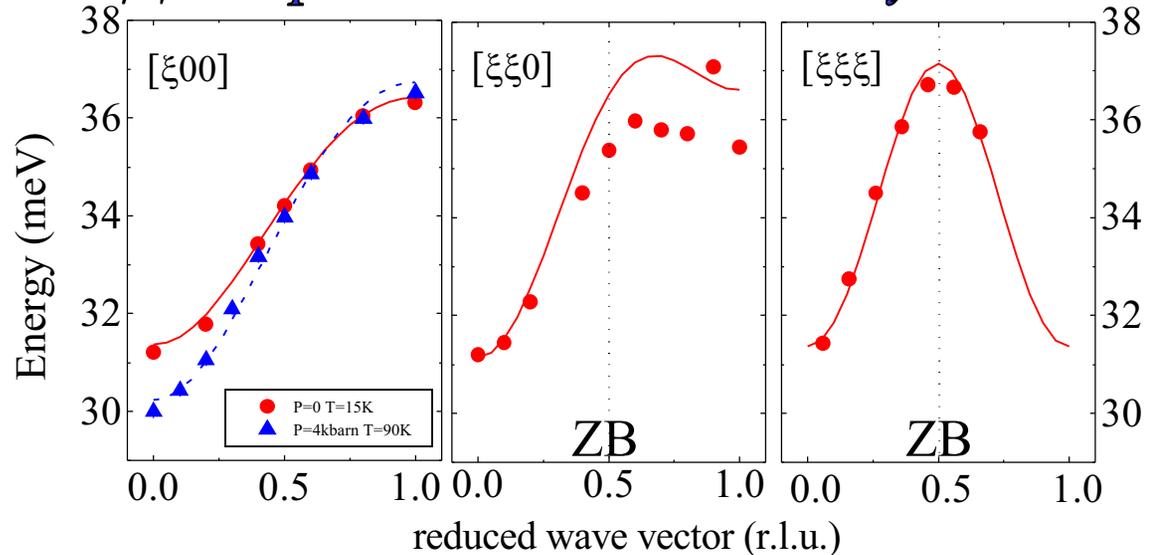


Возбуждения и *Sm-Sm* обмен в *SmS*

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



Дисперсия магнитных возбуждений



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

Sm²⁺ (4f)

6F_1
 Δ_{SO}
 7F_0

Sm-Sm exchange:

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

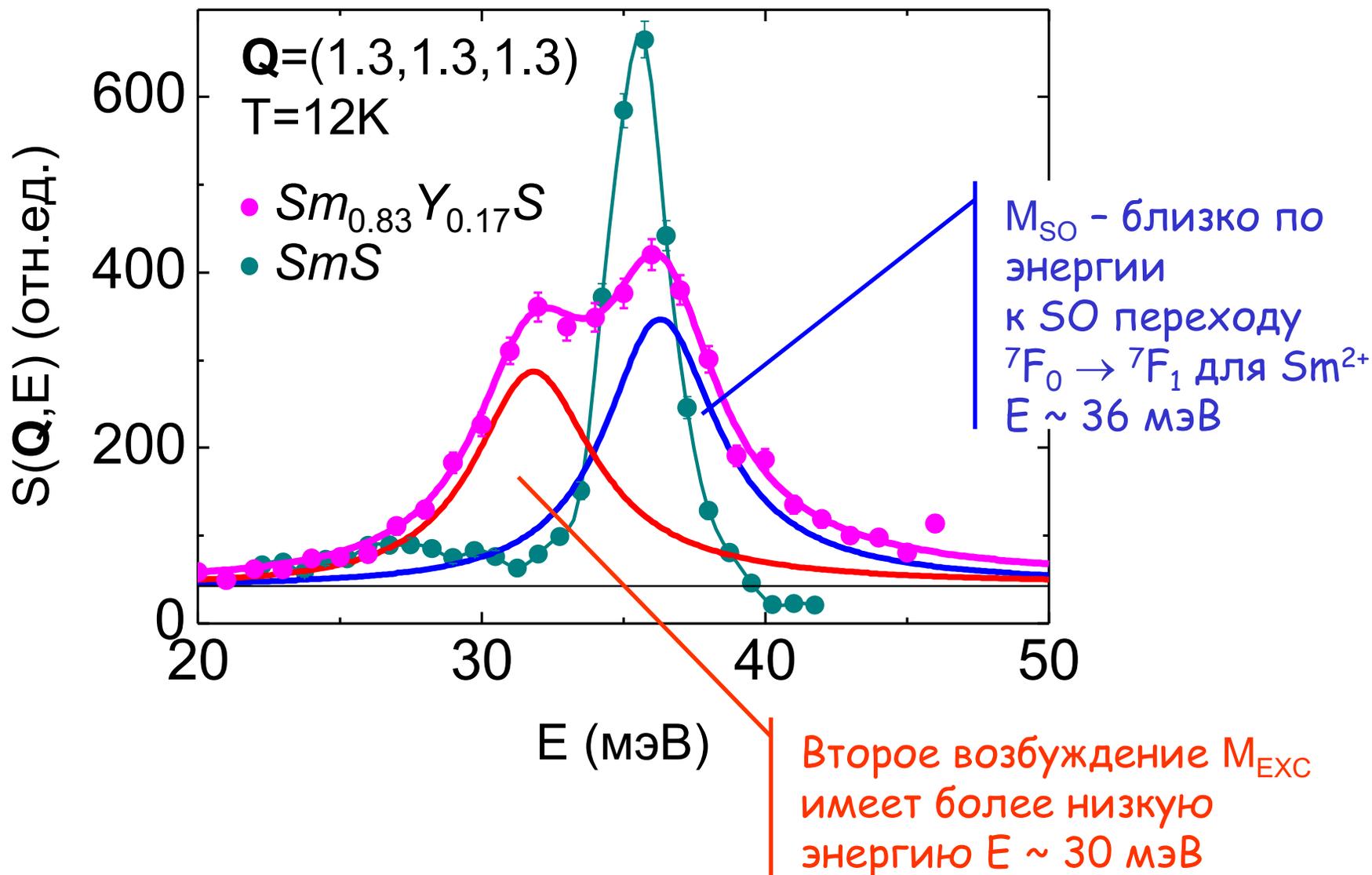
$$\omega_{SO}(\vec{q}) = \Delta_{SO} (1 - 16R(T)J(\vec{q}) / \Delta_{SO})^{1/2}$$

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

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

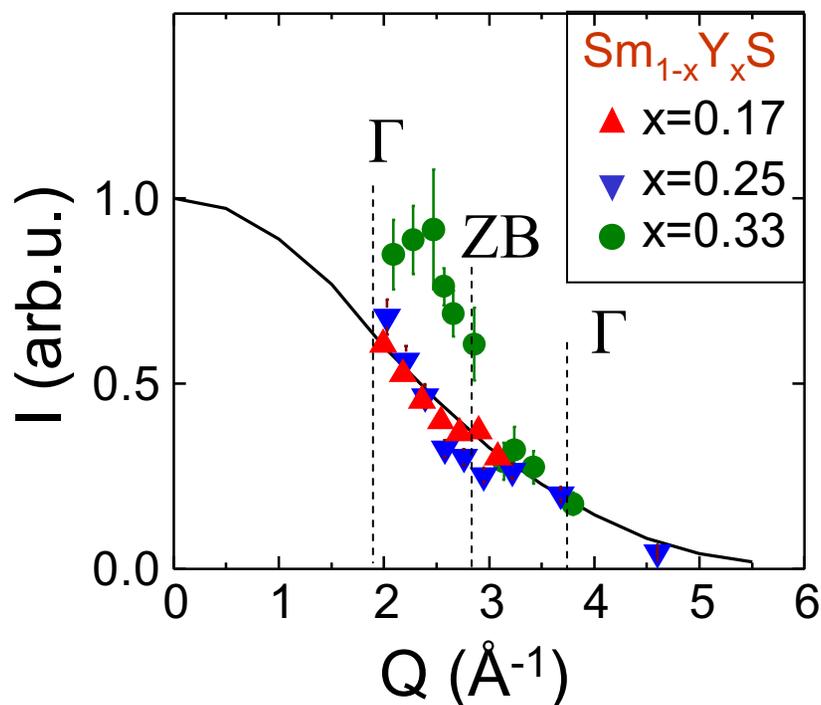
Спиновая динамика в $Sm(Y)S$

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

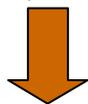


Проявления взаимодействия Sm-Sm

Q-зависимость
интегральной интенсивности

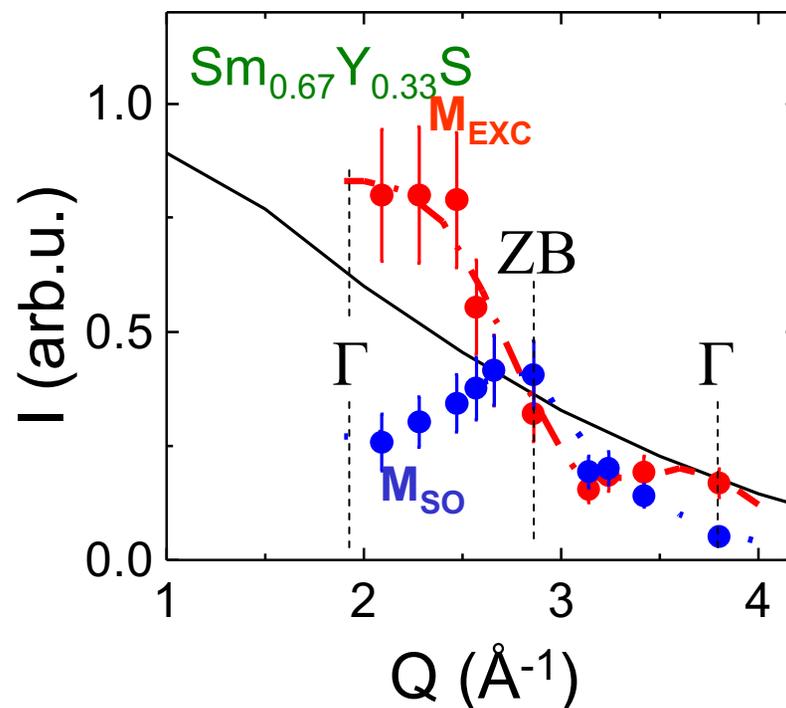


модуляции интенсивности с периодом, равным размеру зоны Бриллюэна



Существуют магнитные корреляции

Q-зависимость
парциальных интенсивностей



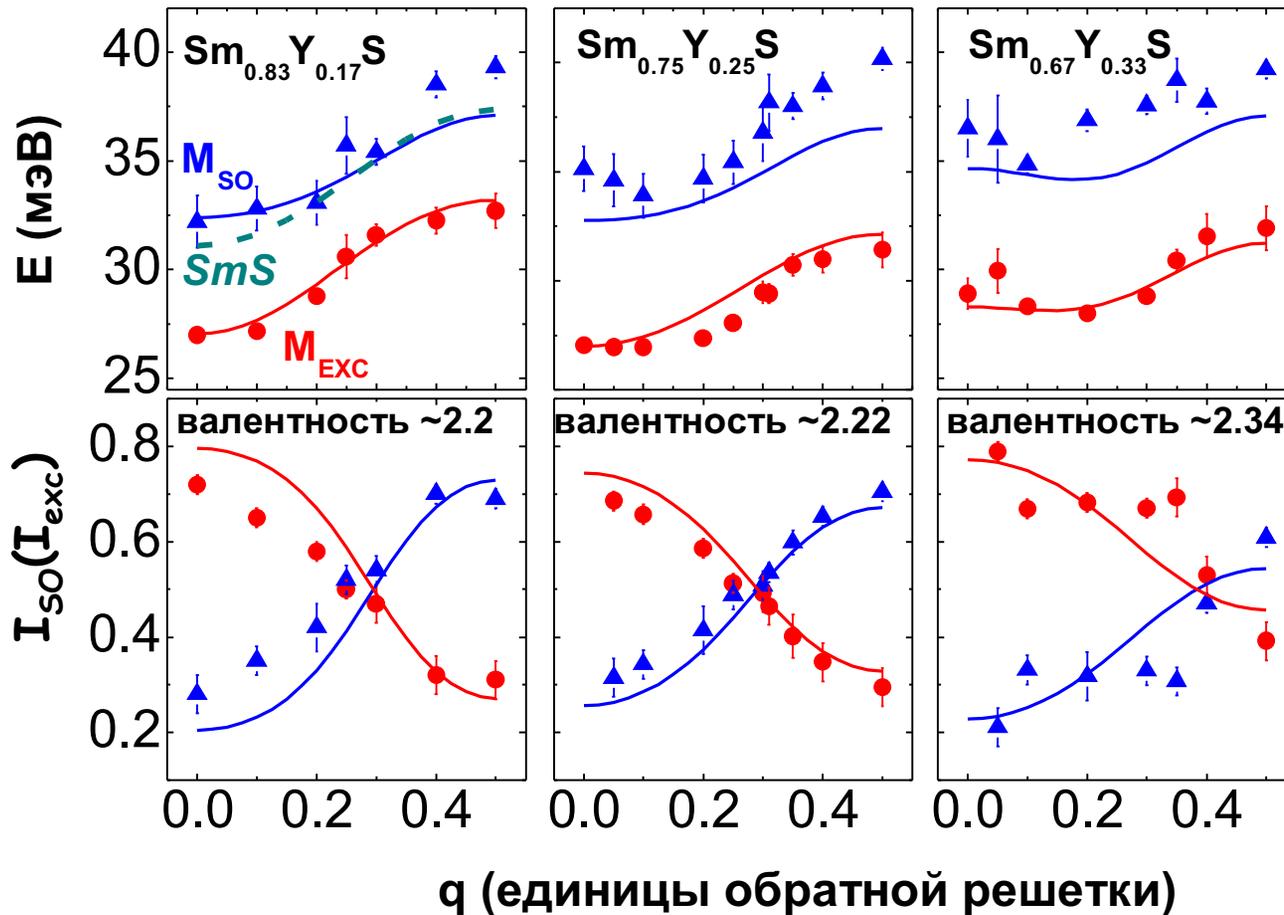
M_{EXC} имеет более резкую зависимость по сравнению с форм-фактором для перехода ${}^7F_0 \rightarrow {}^7F_1$ иона Sm²⁺



Электронные состояния (M_{EXC}) более делокализованные

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

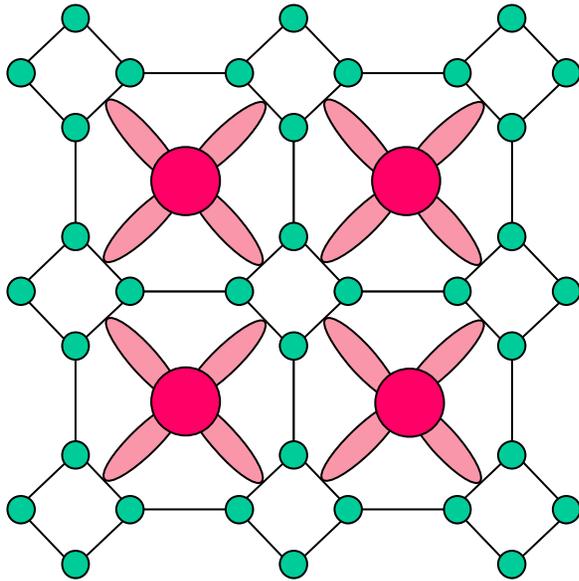
$$I_{SO}(I_{EXC}) = \frac{I_{SO}(I_{EXC})}{I_{SO} + I_{EXC}}$$



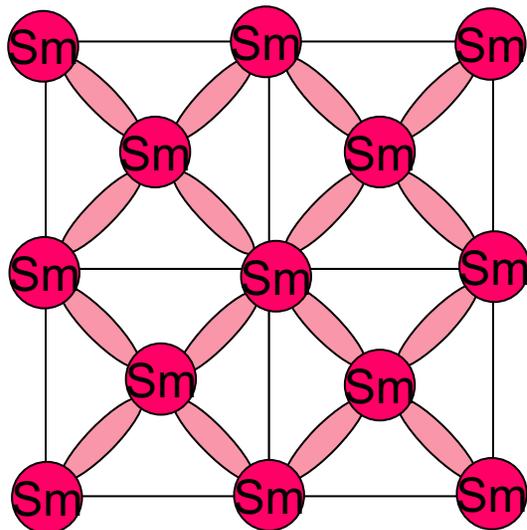
- Sm²⁺** → **Sm³⁺**
- дисперсия уменьшается
 - минимум дисперсии сдвигается из Γ -точки
 - мода M_{EXC} становится доминирующей по всей зоне Бриллюэна

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 « $Sm - B_6$ »



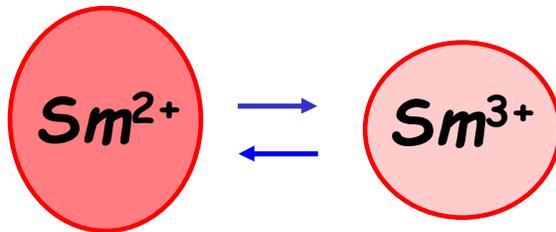
«Коллективное»
состояние частично
делокализованных f -
электронов:
гибридизация « $Sm -$
 Sm »

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 разработать 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 YbB_{12}

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

Heavy fermion antiferromagnetic superconductor UPd_2Al_3

UPd_2Al_3 – magnetic excitation spectra

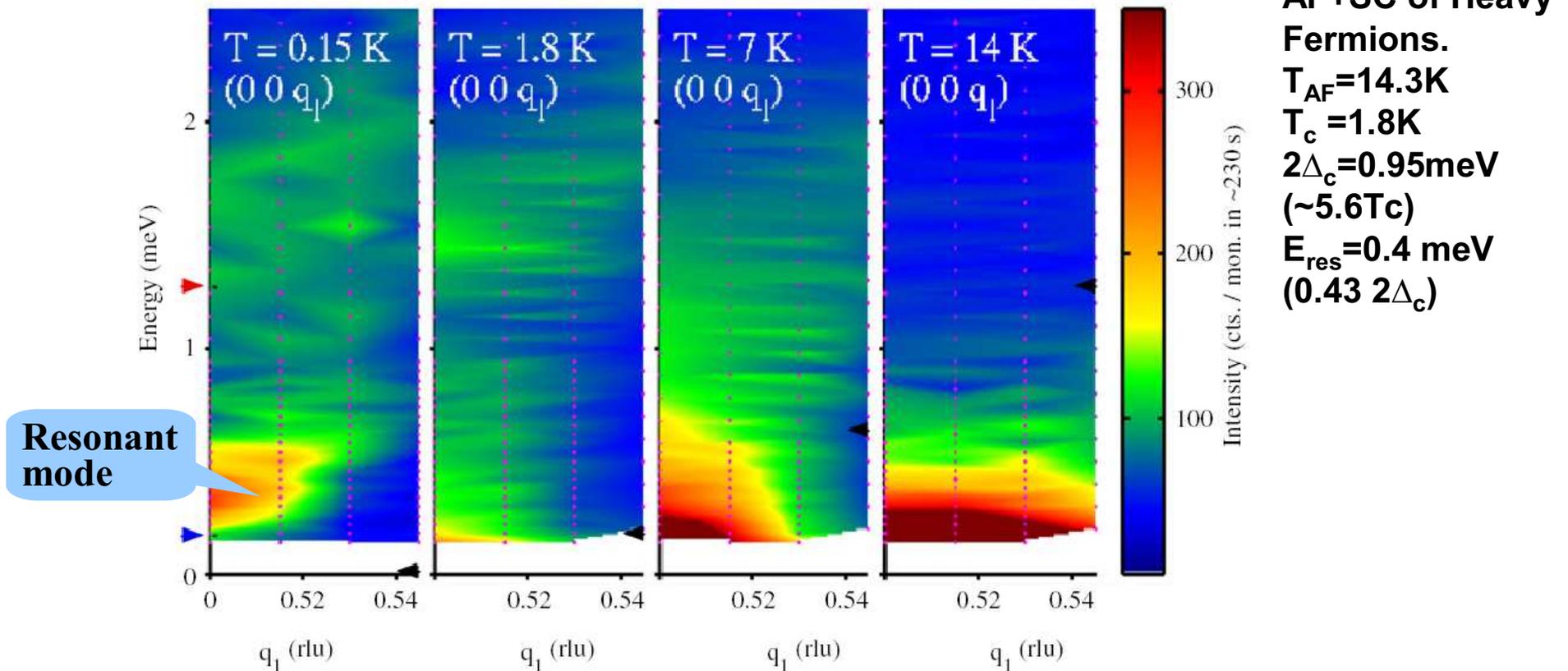
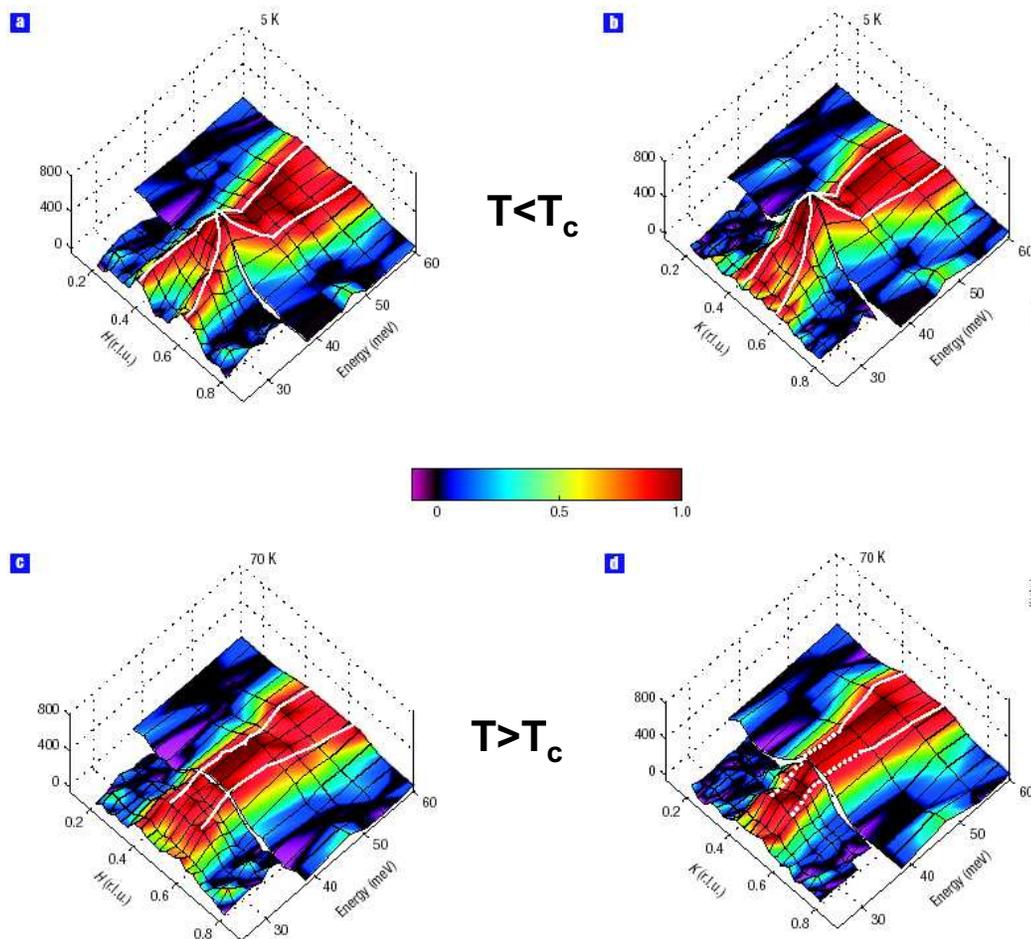


Figure 4. Contour plots of the intensity at four temperatures (marked) as a function of $\mathbf{q} = (0\ 0\ q_{\parallel})$ and energy transfer. On the energy scale, dark arrows (red and blue) on the left-hand side, mark the energies corresponding to the antiferromagnetic, T_{N} , and the superconducting, T_{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].

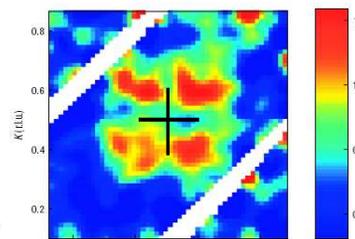
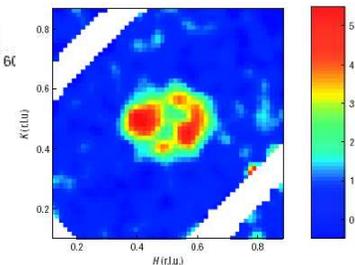
Recent publications in Nature etc., e.g. V.Hinkov, P.Bourges, S.Pailhes, Y.Sidis, A.Ivanov, et.al. Nature Physics 3, 780 (2007) opens a new window on the universality of the spin excitation in the cuprates

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

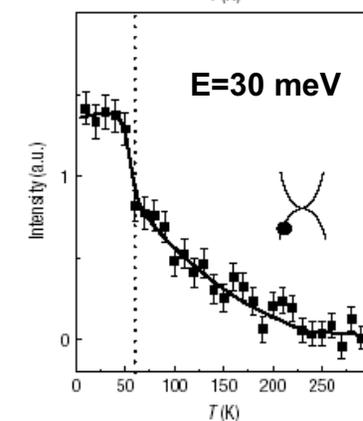
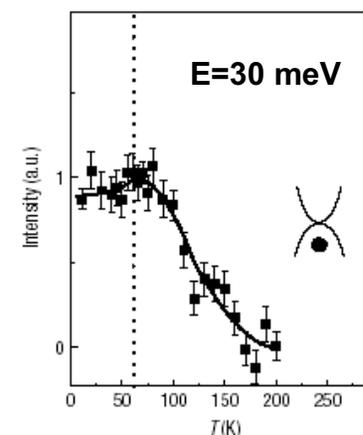


In-plane magnetic intensity at TOF spectrometer at 5K

$30 \pm 3.5\text{ meV}$



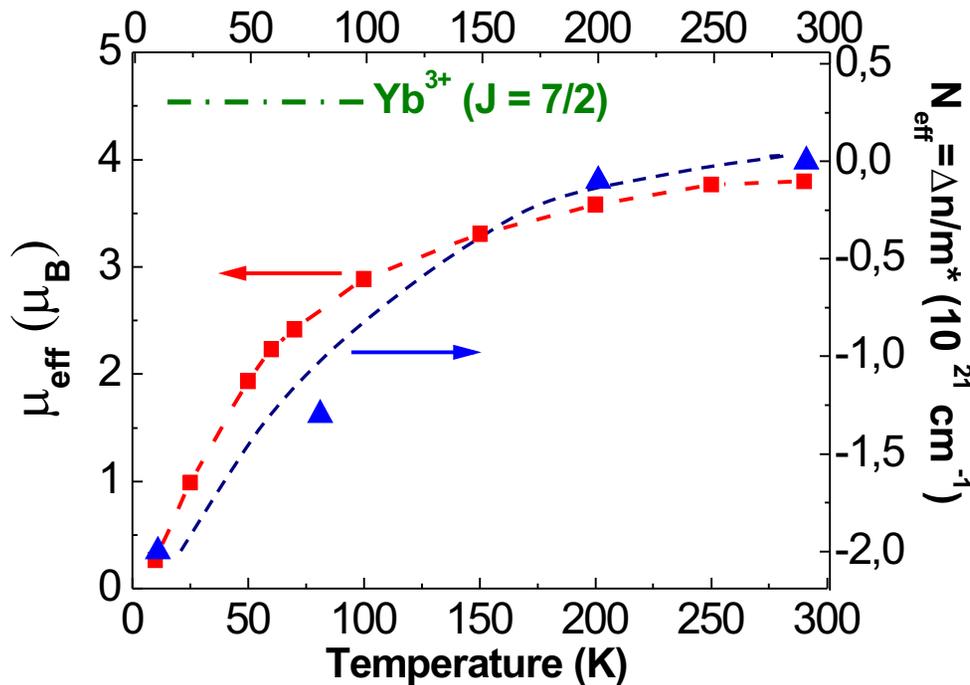
$63 \pm 5\text{ meV}$



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 YbB_{12} : paramagnetic-nonmagnetic and metal-semiconductor transformation below $T^* \sim 80\text{K}$



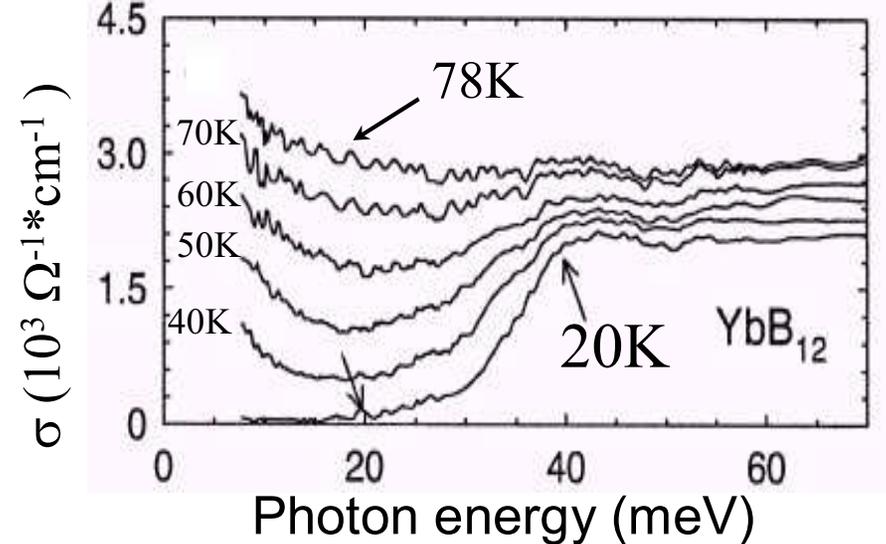
$$\chi(T) = \mu_{\text{eff}}^2 \mu_B^2 / 3k_B T \quad \mu_{\text{eff}} \propto \sqrt{\chi(T)T}$$

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

Optical conductivity



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



YbB₁₂- semiconductor with weak mixed valence

Samples: $Yb_{1-x}(Lu,Er)_x^{11}B_{12}$ (99.5% ^{11}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 ($\pm\frac{1}{2}, x, x$), $x \approx 0.17$ R(Yb-Yb)=5.3 Å (a lot!)**

INS experiments

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

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

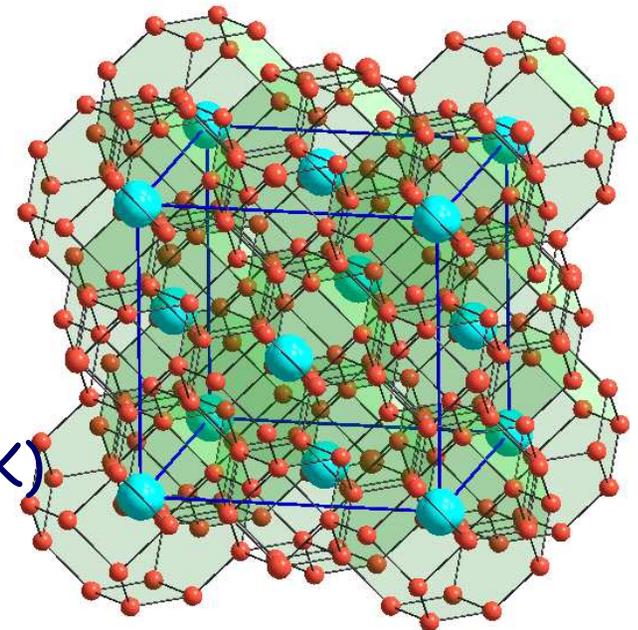
➤ Three-axis spectrometer 2T (LLB, France)

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

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

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

YbB₁₂- structure of UB₁₂ type (based on NaCl)



Experiments on single crystal including polarization analysis

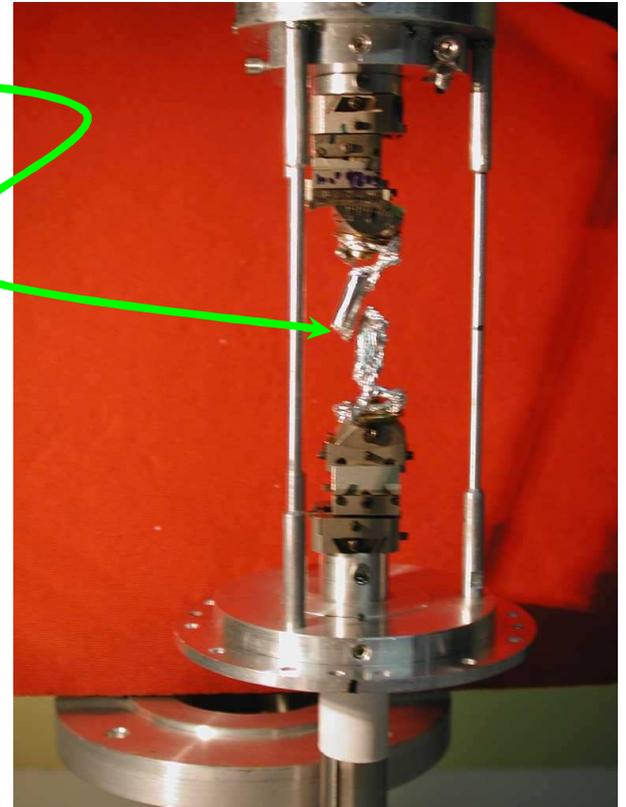
sample: two single crystals of $\text{Yb}^{11}\text{B}_{12}$ ($m_{\text{total}} \approx 2 \text{ g}$)

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

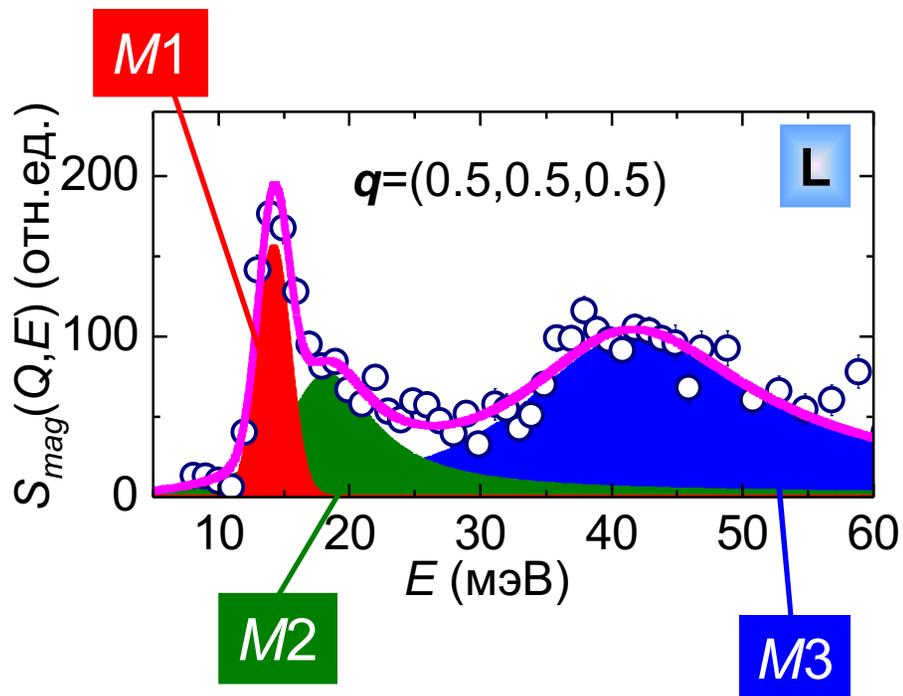
final neutron energies:
 $E_f = 14.7, 30.5, 34.5 \text{ meV}$

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

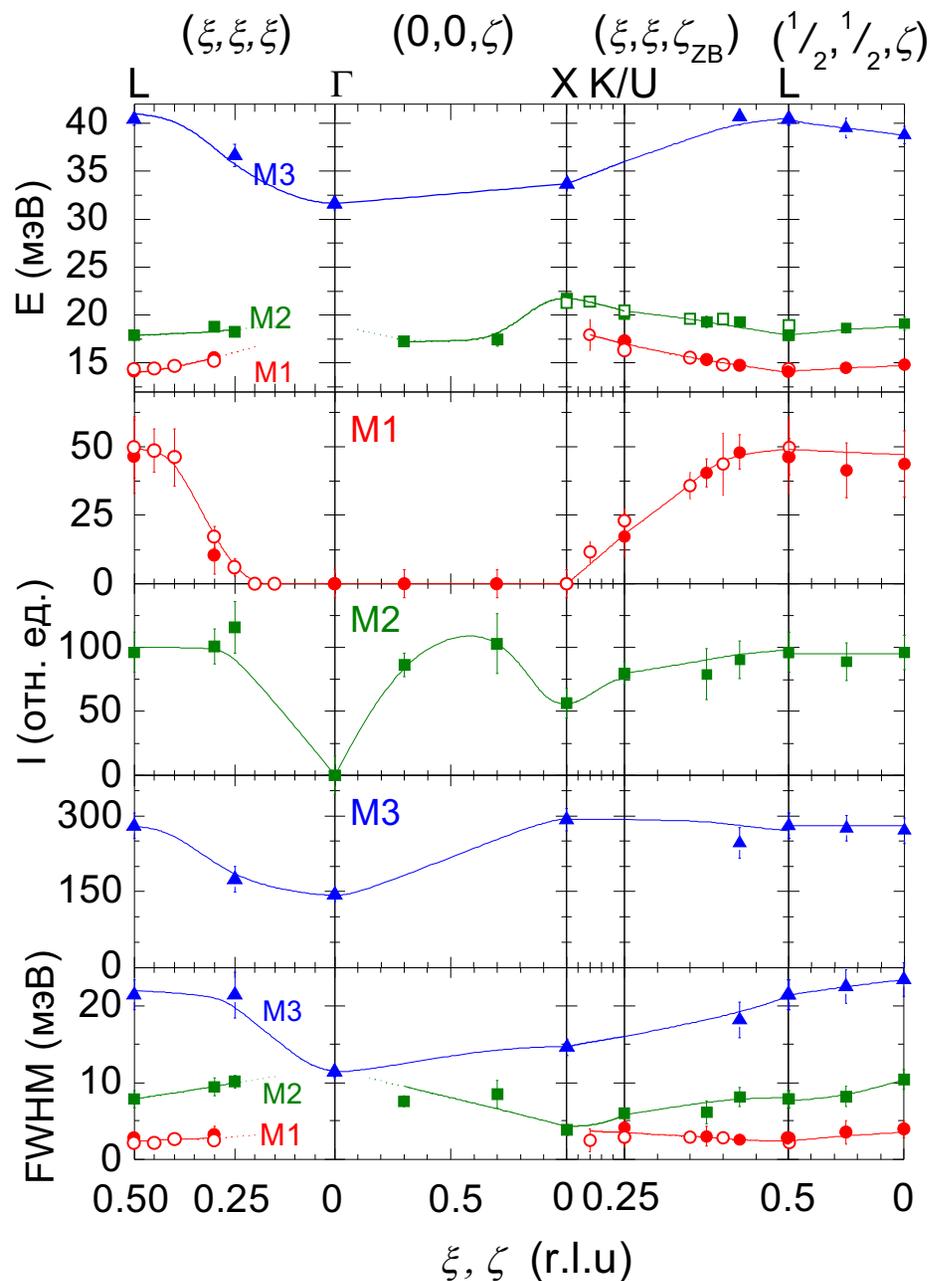
temperature range: $5\text{...}130 \text{ K}$



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



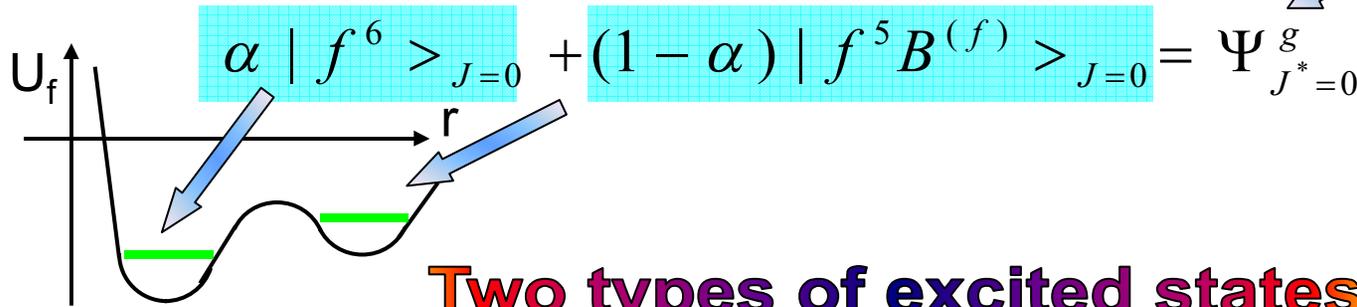
Спектральный магнитный отклик YbV_{12} формируется тремя дисперсионными возбуждениями **M1**, **M2**, **M3**



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:

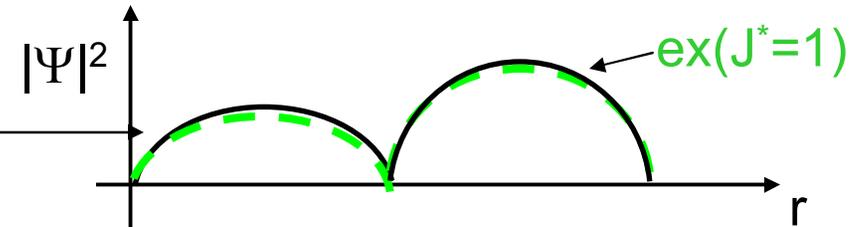
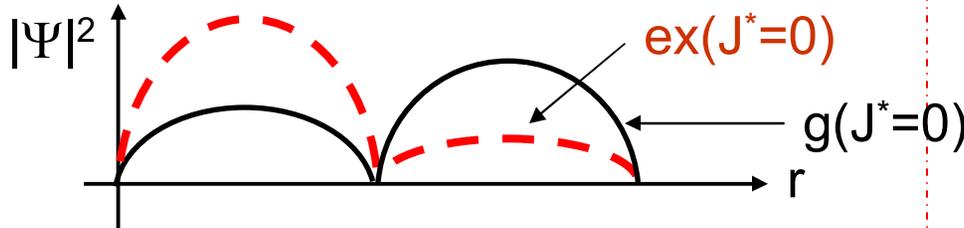


with charge transfer

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

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 SmB_6 : $\alpha^2 \approx 0.5$; $\hbar\omega^{SO} \sim 18$ meV

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

Interplay of different interactions in systems under study

YbB₁₂

SmS&SmB₆

Local ground state

f-c
hybridization

CEF

exchange

Magneto
vibration
interaction ?

f-c
hybridization

exchange

CEF
effects