



АНОТОВАНИЙ ЗВІТ
про виконану роботу у 2020 році в рамках реалізації проекту
із виконання наукових досліджень і розробок
«Багатозонність електронних станів: фізики та застосування»

Назва конкурсу: «Підтримка досліджень провідних та молодих учених»
Реєстраційний номер Проекту: 2020.02/0408

Підстава для реалізації Проекту з виконання наукових досліджень і розробок (реєстраційний номер та назва Проекту) 2020.02/0408 «Багатозонність електронних станів: фізики та застосування»

Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсу «Підтримка досліджень провідних та молодих учених»
протокол від «16-17» вересня 2020 року № 21

1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Тривалість виконання Проекту

Початок – дата укладання Договору про виконання наукових досліджень і розробок;
Закінчення – 2022 рік.

Загальна вартість Проекту, грн. 10 520 000 десять мільйонів п'ятсот двадцять тисяч

Вартість Проекту по роках, грн.:

1-й рік 2 000 000 два мільйони

2-й рік 4 530 000 чотири мільйони п'ятсот тридцять тисяч

3-й рік 3 990 000 три мільйон дев'ятсот дев'яносто тисяч

2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ

до виконання Проекту буде залучено 10 виконавців, з них:

доктори наук 2;

кандидати наук 3;

інші працівники 5.

3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ГРАНТООТРИМУВАЧА ТА ОРГАНІЗАЦІЮ(Ї) СУБВИКОНАВЦЯ(ІВ) ПРОЄКТУ

Державна наукова установа «Київський академічний університет» МОН та НАН України

Адреса: 03142, м. Київ, бул. Академіка Вернадського, 36

Тел. +38044 424-30-25

Веб-сайт: <http://kau.org.ua/>

4. ОПИС ПРОЄКТУ

4.1. Мета Проєкту (до 200 знаків)

Метою роботи є виявлення загальних механізмів впливу багатозонності на електронні властивості функціональних квантових матеріалів, в першу чергу надпровідників, та демонстрація прикладів їх практичного застосування.

4.2. Основні завдання Проєкту (до 400 знаків)

1. Виділити ключові механізми впливу багатозонності на електронні властивості надпровідників.
2. Побудувати теорію впливу багатозонності на фазову когерентність та інтерференційні явища у надпровідниках.
3. Створення нового типу надпровідних квантових інтерферометрів з покращеними властивостями із багатозонних надпровідників.
4. Залучення молоді до перспективного напряму – сучасних досліджень квантових матеріалів.

4.3. Детальний зміст Проєкту:

- Сучасний стан проблеми (до 400 знаків)

Переважна більшість функціональних матеріалів є принципово багатозонними, але мікрокопічні теорії, якими намагаються їх описати, походять від ідеалізованої «однозонної» моделі електронної структури, де багатозонність додано як уточнення. Те, що такий підхід не працює, найкраще видно на прикладі надпровідності. Є багато експериментальних свідчень, що багатозонність та високі T_c тісно пов'язані, але жодна мікрокопічна теорія досі не пояснила цих зв'язків.

- Новизна Проєкту (до 400 знаків)

Новизна проекту полягає у поєднанні різних типів експериментів (ARPES та тунельна і мікроконтактна спектроскопія) та їх експертного теоретичного аналізу у науковій складовій, та поєднання цих результатів з розвитком практичної складової алгоритму пошуку нових матеріалів та структур з вищими T_c та розробкою нових пристрій -- надпровідних інтерферометрів.

- Методологія дослідження (до 400 знаків)

Ми плануємо розробити узгоджену теорію електродинаміки багатозонних надпровідників з урахуванням специфічних ефектів квантової когерентності та квантової міжзонної інтерференції. Передбачається розробка теорії та експериментальне дослідження транспортних властивостей плівок багатозонних надпровідників і вивчення проявів ефектів дисоціації композитних вихорів Абрикосова, пов'язаних із багатозонністю та дослідження високочастотної електродинаміки багатозонних надпровідників у мікрохвильовому діапазоні.

5. ОТРИМАНІ НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ (до 2 сторінок) в поточному році/ в рамках реалізації Проєкту, зокрема:

Виходячи з мети проекту, що полягає у виділенні нових ключових механізмів впливу багатозонності на електронні властивості надпровідників та у розвитку їх застосувань, на першому етапі, нами проведено систематизацію та апробацію раніше отриманих даних, особливо у порівнянні з новими.

В першу чергу, проведено класифікацію експериментальних даних у відповідності до типів електронної нестабільності у багатозонних надпровідниках: купратах, надпровідниках на основі заліза, дихалькогенідах переходних металів. Виділено два основних механізми, що визначають співіснування різних типів електронних впорядкувань, зарядового/спінового та надпровідного, енергетичний виграш у реалізації яких визначається або нестингом поверхонь Фермі або сингулярностями Ван Хова. Саме ці типи нестингу ми плануємо взяти за основу моделювань у наступних етапах для пошуку нових надпровідних матеріалів.

Крім того, виявлено та досліджено нові багатозонні ефекти у плівках MoRe, температурні зсуви зон у надпровідниках на основі заліза, а також отримано низку нових теоретичних результатів стосовно ефекту Мейснера і комплексної високочастотної провідності двозонних

надпровідників. Зокрема, методом точкового контакту, отримано прямі докази формування двох надпровідних енергетичних щілин у плівках сплаву $Mo_{1-x}Re_x$ та показано, що посилення температури переходу у цих сплавах пов'язане з міжзонною взаємодією, а не з модифікаціями фононного спектру, як вважалось раніше.

З аналізу ARPES-спектрів різних залізовмісних надпровідників, а саме FeSe, Fe(Se,Te), та Ba(Co,Fe)As поблизу температури надпровідного переходу, встановлено існування сильного зсуву електронних зон у центрі зони Бріллюена у напрямку підвищення енергії зв'язку тільки для Fe(Se,Te), що може бути результатом взаємодії між надпровідним станом та механізмом, що відповідає за глобальний зсув зон у температурному діапазоні 20-300 К. Це є іншим нетривіальним проявом складної взаємодію надпровідного та спінового впорядкувань у багатозонних надпровідниках та потребує подальших досліджень.

У напрямі виявлення нових нелінійних ефектів в електродинаміці багатозонних надпровідників проведено теоретичні дослідження на основі теорії Гінзбурга-Ландау. Було досліджено: (1) нелінійний ефект Мейснера, пов'язаний з двома типами надплинних електронних конденсатів і фазово-когерентного джозефсонівського зв'язку між ними; (2) високочастотна нелінійна комплексна провідність в мікрохвильовому діапазоні; (3) входження абрикосівських вихорів у двозонний надпровідник із подоланням крайового бар'єру та можливість сепарації вихорів на фрактальні при такому процесі. Передбачено новий ефект виникнення нелінійного ефекту Мейснера для двозонного надпровідника, що пов'язаний із міжзонним зв'язком надплинних конденсатів. А шляхом моделювання нестационарного рівняння Гінзбурга-Ландау методами скінченних елементів для двовимірних та тривимірних надпровідних зразків складної геометрії було розраховано динаміку входження вихорів у надпровідний зразок та показано, як наявність геометричних дефектів знижує енергетичний бар'єр для входження вихорів.

У напрямі розвитку експериментальної інфраструктури та методик вимірювань комплексної провідності багатозонних надпровідників у НВЧ діапазоні, було розроблено методику застосування мініатюрного резонатору типу розірване кільце для вимірювань дійсної та уявної частини провідності надпровідних зразків субміліметрових розмірів. Розроблено програмне забезпечення для керування процесом вимірювань. Запропоновано метод пошуку основної моди коливань серед паразитних мод, на основі факту відсутності паразитних мод з добротністю більшою ніж добротність основної моди та проведено чисельні розрахунки, які показали високу чутливість розробленої методики, що дозволить вимірювати мініатюрні зразки.

Також було придбано та інстальовано унікальний для України векторний аналізатор ланцюгів, що є головним елементом розробленої методики. Чутливість методики квадратично залежить від граничної частоти аналізатора, яка склала рекордні 26,5 ГГц.

Проводились заходи для заличення молоді до досліджень багатозонних квантових матеріалів. Було створено сайт проекту <http://kau.org.ua/multiband> та сторінку на Facebook, започатковано тематичні лекції та семінари з висвітленням на Youtube-каналі <https://www.youtube.com/playlist?list=PLSGP3r1iKksPaVmYCDukM1Khz2NESqlmD>.

Тривала робота над поточними та майбутніми міжнародними проектами, що мають спиратись на результати даного проекту. Почались роботи з проектування однофотонного детектора на основі надпровідного кубіта за проектом NATO SPS Programme “Single microwave photon counter based on tunable flux qubit”, що має стати модельним детектором для дослідження можливості використання нових багатозонних матеріалів для побудови нових надпровідних кубітів для квантових технологій. Подано заявку на участь в конкурсі на створення Німецько-Українського центру квантових матеріалів, що буде фінансуватись Федеральним міністерством освіти та досліджень Німеччини (BMBF).

5.1. Опис наукових або науково-технічних результатів, отриманих в рамках виконання Проекту (із зазначенням їх якісних та кількісних (технічних) характеристик)

Виділено два основних механізми, що визначають співіснування різних типів електронних впорядкувань, зарядового/спінового та надпровідного, енергетичний вигравш у реалізації яких визначається або нестингом поверхонь Фермі або сингулярностями Ван Хова.

Розроблено програму для моделювання нестационарного рівняння Гінзбурга-Ландау методами скінченних елементів для двовимірних та тривимірних надпровідних зразків складної

геометрії для моделювання динаміки входження вихорів у надпровідний зразок та показано, як наявність геометричних дефектів знижує енергетичний бар'єр для входження вихорів.

Запропоновано метод пошуку основної моди коливань серед паразитних мод, на основі факту відсутності паразитних мод з добротністю більшою ніж добротність основної моди та проведено чисельні розрахунки, які показали високу чутливість розробленої методики, що дозволить вимірювати зразки з розмірами $0,2 \times 0,2 \times 0,2$ мм³.

Придбано та інсталювано унікальний для України векторний аналізатор ланцюгів Keysight Streamline, що є головним елементом розробленої методики. Оскільки чутливість методики квадратично залежить від граничної частоти аналізатора, було придбано модель P9375A з рекордною граничною частотою 26,5 ГГц. Невеликі розміри аналізатора дозволять суттєво зменшити відстань до зразка, що істотно сприятиме зменшенню шумів.

5.2. За наявності науково-технічної продукції обґрунтування її переваг у порівнянні з існуючими аналогами

Створення науково-технічної продукції не передбачено в рамках виконання завдань цього проекту в 2020 році.

5.3. Практична цінність отриманих результатів реалізації Проєкту для економіки та суспільства (стосується проектів, що передбачають проведення прикладних наукових досліджень і науково-технічних розробок)

Інсталяція обладнання (НВЧ-аналізатора ланцюгів) та налагодження методики його використання розширили спектр можливих експериментальних досліджень. Інсталюваний НВЧ-аналізатор ланцюгів дозволяє проводити дослідження в кріогенному діапазоні температур з частотою до 26,5 ГГц, що наразі не можливо виконати в інших українських лабораторіях. Оскільки обладнання є частиною майбутнього центру колективного користування, інші українські вчені зможуть його використовувати та отримувати експериментальні результати, що будуть важливими для української наукової спільноти.

5.4. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці.

Після завершення гранту, будуть тривати як дослідження нових квантових матеріалів та квантових приладів на їх основі, так і подальша розбудова центру квантових досліджень. Ми плануємо, що цей центр стане осередком залучення молоді до квантових досліджень та ключовою складовою майбутніх міжнародних проектів (наприклад, вже подано проект на конкурс Міністерства Освіти та Науки Німеччини (BMBF)), а також одним з яскравих прикладів дослідницьких інфраструктур у складі проекту Academ.City (<http://kau.org.ua/centers/innovation/academ-city>), що також активно розвивається зараз за підтримки BMBF.

Примітка: Анотований звіт не містить відомостей, заборонених до відкритого опублікування

Науковий керівник Проєкту

Член-кореспондент НАН України,
д. ф.-м. н., проф

О.А. Кордюк

(підпись)