

УДК 538.955

ВЛИЯНИЕ ФОРМЫ ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ НА АНИЗОТРОПИЮ МАГНЕТСОПРОТИВЛЕНИЯ ZrB_{12}

© 2022 г. К. М. Красиков^{1,*}, М. А. Макрушин^{1,2}, С. В. Демишев^{1,3},
В. Б. Филиппов⁴, Н. Ю. Шицевалова⁴, Н. Е. Случанко¹

Представлено академиком РАН И.А. Щербаковым 25.11.2021 г.

Поступило 25.11.2021 г.

После доработки 01.12.2021 г.

Принято к публикации 02.12.2021 г.

В сильно коррелированном металле ZrB_{12} (додекаборид циркония) с электронным фазовым расслоением типа динамических зарядовых страйпов выполнен анализ топологии поверхности Ферми и построена карта траекторий носителей заряда включая замкнутые и открытые орбиты. Сравнение полученных теоретических результатов с экспериментальными данными по магнетосопротивлению при гелиевых температурах в магнитном поле до 80 кЭ позволило предложить объяснение подавления анизотропии зарядового транспорта в ZrB_{12} .

Ключевые слова: топология поверхности Ферми, анизотропия магнетосопротивления, открытые траектории в металлах

DOI: 10.31857/S2686740022010096

ВВЕДЕНИЕ

Решение проблемы высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) имеет огромные перспективы практического применения и сулит достижение качественно нового уровня в технологиях, поэтому в последние несколько десятилетий большой интерес вызывает изучение материалов с высокими критическими температурами T_c . Для выяснения механизмов, ответственных за ВТСП, проводятся исследования купратов (см., например, [1]), пниктидов и халькогенидов на основе Fe [2, 3], а также MgB_2 [4]. В этих ВТСП-соединениях был обнаружен целый ряд необычных явлений, таких как зарядовые и спиновые страйпы [1, 3, 5] и электронный нематический эффект [1, 3]. Было высказано предположение, что эффекты усиления сверхпроводимости могут быть связаны с данными аномалиями. В настоящее время считается, что конкуренция различных ме-

ханизмов, действующих одновременно (зарядовых, спиновых, решеточных и орбитальных взаимодействий) в сильно коррелированных электронных системах (СКЭС) с металлической проводимостью, может определять усиление или подавление сверхпроводимости [1, 3, 5, 6].

Диборид магния MgB_2 с $T_c = 39$ К [4] привлек интерес к соединениям на основе бора, как перспективным новым кандидатам в ВТСП. Среди них ZrB_{12} , обладающий простой ГЦК-кристаллической структурой типа UB_{12} (см. рис. 1а), является сверхпроводником, свойства которого хорошо описываются моделью Бардина–Купера–Шриффера (БКШ) и который обладает самой высокой $T_c \approx 6$ К (рис. 1б) в семействе додекаборидов [7, 8]. Интересно, что в родственном соединении LuB_{12} температура сверхпроводящего перехода оказывается значительно ниже ($T_c = 0.4$ К [9, 10]), причем причина столь большой разницы T_c для этих двух соединений с похожими зонной и кристаллической структурой до сих пор не ясна. В недавних работах [11, 12] в LuB_{12} была обнаружена сильная анизотропия магнетосопротивления (МС), обусловленная как электронным фазовым расслоением с образованием динамических зарядовых страйпов, так и особенностями топологии поверхности Ферми (ПФ) этого металла. В классических работах Лифшица и Песчанского [13, 14] было показано, что возникновение сильной анизотропии МС в металлах при низких температурах может быть вызвано наличием открытых тра-

¹ Институт общей физики имени А.М. Прохорова Российской академии наук, Москва, Россия

² Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

³ Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, Москва, Россия

⁴ Институт проблем материаловедения им. И. М. Францевича Национальной академии наук Украины, Киев, Украина

*E-mail: krasikokirill@yandex.ru

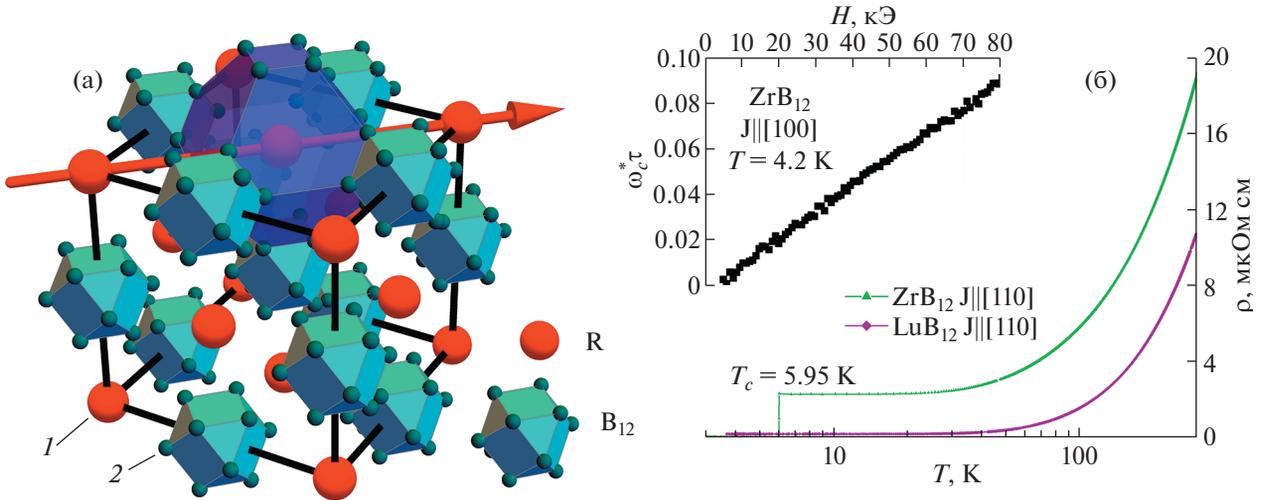


Рис. 1. а – Кристаллическая структура металлов RB_{12} (1 – R3-ионы, 2 – темно-зеленым – атомы бора). б – Температурная зависимость удельного сопротивления для ZrB_{12} и LuB_{12} . На вставке показана полевая зависимость параметра $\omega_c\tau$, построенная по данным подвижности из [20].

екторий на поверхности Ферми. При этом в пределе сильного поля $\omega_c\tau \gg 1$ (ω_c – циклотронная частота, τ – время релаксации носителей) наличие открытых траекторий на ПФ может приводить к гигантской (в 1800 раз в Cu) анизотропии МС при изменении ориентации магнитного поля с переходом от замкнутых к открытым орбитам электронов [13, 14]. Поскольку в соединениях RB_{12} дырочный лист ПФ в форме “монстра” [15] имеет несколько групп открытых траекторий [16–18], представляет интерес сравнить между собой и проанализировать особенности поверхностей Ферми LuB_{12} и ZrB_{12} , а также провести измерение угловых и полевых зависимостей магнетосопротивления в ZrB_{12} и сопоставить их с данными для додекаборида LuB_{12} с аналогичной топологией ПФ.

МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

Измерение удельного сопротивления проводилось на оригинальной установке для гальваномагнитных исследований в Институте общей физики РАН при гелиевых температурах до 2 К. Использовался стандартный четырехконтактный метод измерения сопротивления на постоянном токе. Конструкция используемой вставки позволяет вращать образец во внешнем магнитном поле вокруг токовой оси во время эксперимента.

Для описания ПФ у ZrB_{12} было использовано модельное выражение [13, 14]:

$$E = \cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a) + A(\cos(k_x a) \cos(k_y a) \cos(k_z a)) + C(\cos(k_x a) \cos(k_y a) + \cos(k_x a) \cos(k_z a) + \cos(k_y a) \cos(k_z a)), \quad (1)$$

где k_x, k_y, k_z – проекции волнового вектора на координатные оси, a – период решетки.

В формуле (1) коэффициенты A и C являются подгоночными параметрами, которые могут быть определены из анализа известного закона дисперсии [19], рассчитанного путем решения уравнения Шрёдингера в рамках теории функционала плотности (DFT). В качестве дополнительного условия учитывалось прохождение поверхности через точки, в которых спектр носителей заряда пересекает уровень Ферми в обратном пространстве.

Далее в анализе рассматривались секущие плоскости ПФ, перпендикулярные различным направлениям вектора магнитного поля \mathbf{H} . Плоскости были параметризованы тремя координатами: зенитным и азимутальным углами (θ, ϕ) и величиной проекции квазиволнового вектора k_z на направление \mathbf{H} . Построение карты траекторий проводилось с шагом 5° по (θ, ϕ) и $0.1 \frac{\pi}{a}$ по p_z . Полученные траектории носителей заряда были поделены на три типа: (1) открытые; (2) замкнутые и (3) замкнутые, но распространяющиеся на много (>10) зон Бриллюэна в обратном пространстве.

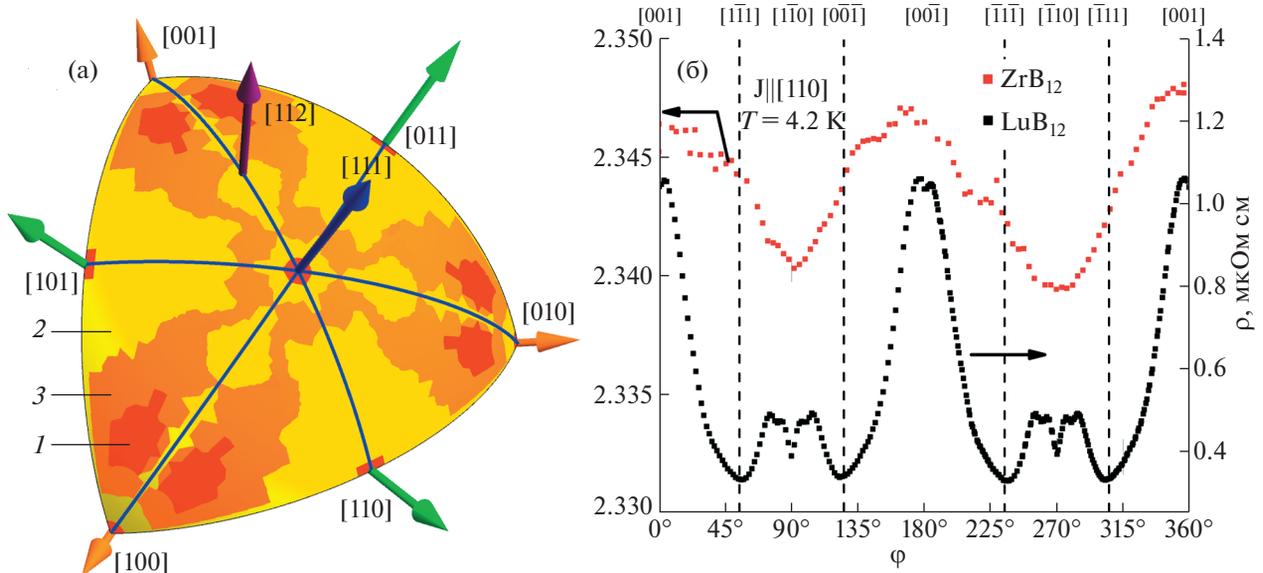


Рис. 2. а – Стереографическая карта открытых и замкнутых траекторий носителей заряда на дырочной поверхности Ферми ZrB_{12} . 1 – направления замкнутых траекторий, 2 – открытых и 3 – направлений замкнутых, но распространяющихся на много зон Бриллюэна в обратном пространстве, траекторий. б – Угловые зависимости магнетосопротивления ZrB_{12} (левая шкала) и LuB_{12} (правая шкала) в магнитном поле $H = 80$ кЭ при $T = 4.2$ К.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Выполненные расчеты показали, что уровень Ферми пересекается дырочной и электронной поверхностями, образуя различные траектории на ПФ. Поскольку электронный лист поверхности Ферми оказывается односвязным и не приводит к появлению открытых траекторий, в дальнейшем анализе он не учитывался. Найденная в настоящей работе дырочная ПФ для ZrB_{12} является многосвязной (типа “Монстр” [15]) и имеет направления, которые характеризуются открытыми траекториями носителей заряда. Рассчитанная карта возможных траекторий дырок у ZrB_{12} представлена на рис. 2а (типы траекторий, получающихся при фиксированных (θ, ϕ) , обозначены различными цветами).

На рис. 2б приведены полученные в работе угловые зависимости удельного сопротивления при $T = 4.2$ К для монокристалла ZrB_{12} при вращении вокруг токового направления $[110]$. Для сравнения показана аналогичная кривая для LuB_{12} из работ [11, 12]. Видно, что анизотропия сопротивления в ZrB_{12} ($\frac{\Delta\rho}{\rho} \sim 0.2\%$) оказывается на несколько порядков меньше, чем в LuB_{12} ($\frac{\Delta\rho}{\rho} \sim 250\%$). Отсутствие заметной анизотропии у ZrB_{12} , на первый взгляд, противоречит результатам анализа траекторий носителей заряда (рис. 2а). Согласно

теории Лифшица и Песчанского [13, 14], в направлениях магнитного поля поперек замкнутых траекторий должны наблюдаться резкие провалы магнетосопротивления, тогда как для H , перпендикулярного открытым траекториям, следует ожидать квадратичного роста МС, который действительно наблюдается у LuB_{12} . При этом карта траекторий для LuB_{12} , рассчитанная аналогичным методом, демонстрирует хорошее соответствие между теоретическими и экспериментальными данными [11].

Указанное различие в поведении магнетосопротивления у ZrB_{12} и LuB_{12} можно объяснить следующим образом. В случае ZrB_{12} подавление анизотропии МС (рис. 2б) может объясняться малой длиной свободного пробега носителей заряда. Полученная из экспериментальных данных подвижности оценка параметра $\omega_c\tau$, показывающего, какую часть траектории проходит носитель заряда между двумя актами рассеяния, в исследуемом интервале полей ($H \leq 80$ кЭ) приводит к значениям $\omega_c\tau \approx 0.1$ [20] (см. вставку на рис. 1б). В результате, при $H \leq 80$ кЭ у ZrB_{12} реализуется предел слабого поля, отвечающий режиму зарядового транспорта, при котором топология ПФ практически не влияет на его характеристики. Объяснение столь значимых различий в величине параметра $\omega_c\tau$ для LuB_{12} (~ 1) и ZrB_{12} (~ 0.1) в полях до 80 кЭ, по-видимому, следует искать в различной структуре динамических зарядовых страйпов в

этих соединениях. Действительно, в LuB_{12} при низких температурах $T \leq T^* \sim 60$ К (фаза каркасного стекла [10]) филаментарная структура проводящих каналов ориентируется вдоль направления [110] в ГЦК-решетке додекаборида (показана стрелкой на рис. 1а). Недавно было показано, что в ZrB_{12} страйпы образуют две непересекающиеся сетки флуктуирующих зарядов с ромбическими ячейками, расположенными в плоскостях (111) и ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$) соответственно. Естественно ожидать, что рассеяние носителей заряда на динамических флуктуациях электронной плотности в существенно более сложной многокомпонентной филаментарной структуре приводит к резкому подавлению длины свободного пробега носителей и отсутствию анизотропии зарядового транспорта в ZrB_{12} , что и наблюдается экспериментально.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ формы и сечений поверхности Ферми позволил построить карту различных траекторий носителей заряда у ZrB_{12} , в том числе открытых и замкнутых. Сравнение полученных теоретических результатов с экспериментальными данными магнетосопротивления в магнитном поле до 80 кЭ, а также с аналогичными данными для LuB_{12} , показало, что у ZrB_{12} происходит существенное (примерно на порядок) уменьшение параметра $\omega_c \tau$. По сравнению со случаем LuB_{12} , именно сильное уменьшение длины свободного пробега носителей заряда у ZrB_{12} обуславливает слабое влияние формы поверхности Ферми на анизотропию магнетосопротивления в этом сильно коррелированном металле с динамическими зарядовыми страйпами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Keimer B., Kivelson S.A., Norman M.R., Uchida S., Zaanen J. From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides // *Nature*. 2015. V. 518. P. 179–186.
2. He J., Liu X., Zhang W., Zhao L., Liu D., He S., Mou D., Li F., Tang C., Li Z. Electronic evidence of an insulator–superconductor crossover in single-layer $\text{FeSe}/\text{SrTiO}_3$ films // *Proc. Natl. Acad. Sci.* 2014. V. 111. № 52. P. 18501–18506.
3. Fernandes R.M., Chubukov A.V., Schmalian J. What drives nematic order in iron-based superconductors? // *Nat. Phys.* 2014. V. 10. № 2. P. 97–104.
4. Nagamatsu J., Nakagawa N., Muranaka T., Zenitani Y., Akimitsu J. Superconductivity at 39 K in magnesium diboride // *Nature*. 2001. V. 410. № 6824. P. 63–64.
5. Sachdev S., Keimer B. Quantum criticality feature // *Phys. Today*. 2011. V. 64. № 2. P. 29.
6. Dagotto E. Complexity in strongly correlated electronic systems // *Science*. 2005. V. 309. P. 257–262.
7. Lortz R., Wang Y., Abe S., Meingast C., Paderno Y.B., Filippov V., Junod A. Specific heat, magnetic susceptibility, resistivity and thermal expansion of the superconductor ZrB_{12} // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 72 (2). 024547.
8. Wang Y., Lortz R., Paderno Y., Filippov V., Abe S., Tutsch U., Junod A. Specific heat and magnetization of a ZrB_{12} single crystal: Characterization of a type-II/1 superconductor // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 72 (2). 024548.
9. Sluchanko N., Gavrilkin S., Mitsen K., Kuznetsov A., Sannikov I., Glushkov V., Demishev S., Azarevich A., Bogach A., Lyashenko A., et al. Superconductivity in ZrB_{12} and LuB_{12} with Various Boron Isotopes // *J. Supercond. Nov. Magn.* 2013. V. 26. № 5. P. 1663–1667.
10. Случанко Н.Е., Азаревич А.Н., Богач А.В., Власов И.И., Глушков В.В., Демисhev С.В., Максимов А.А., Тартаковский И.И., Филатов Е.В., Флахбарт К., Габани С., Филиппов В.Б., Шицевалова Н.Ю., Моцалков В.В. LuB_{12} : эффекты беспорядка и изотопического замещения в теплоемкости и комбинационном рассеянии света // *ЖЭТФ*. 2011. Т. 140. № 3. С. 468.
11. Красиков К.М., Азаревич А.Н., Глушков В.В., Демисhev С.В., Хорошилов А.Л., Богач А.В., Шицевалова Н.Ю., Филиппов В.Б., Случанко Н.Е. Нарушение кубической симметрии в редкоземельных додекаборидах с динамическими зарядовыми страйпами // *Письма в ЖЭТФ*. 2020. Т. 112. № 7. С. 451.
12. Sluchanko N., Azarevich A., Bogach A., Demishev S., Krasikov K., Voronov V., Filippov V., Shitsevalova N., Glushkov V. Hall effect and symmetry breaking in the nonmagnetic metal LuB_{12} with dynamic charge stripes // *Phys. Rev. B*. 2021. V. 103. № 3. 035117.
13. Lifshitz I.M., Peshchansky V.G. Galvanomagnetic characteristics of metals with open Fermi surfaces. I // *Sov. Phys. JETP*. 1959. V. 8. № 5. P. 875–883.
14. Lifshitz I.M., Peshchansky V.G. Galvanomagnetic characteristics of metals with open Fermi surfaces. II // *Sov. Phys. JETP*. 1960. V. 11. № 1. P. 137–141.
15. Shoenberg D. *Magnetic Oscillations in Metals*. Cambridge University Press, 2009.
16. Gasparov V.A., Sheikin I., Levy F., Teyssier J., Santi G. Study of the fermi surface of ZrB_{12} using the de Haas-van Alphen effect // *Phys. Rev. Lett.* 2008. V. 101. № 9. 097006
17. Heinecke M., Winzer K., Noffke J., Kranefeld H., Grieb H., Flachbart K., Paderno Y.B. Quantum oscillations and the Fermi surface of LuB_{12} // *Zeitschrift fur Phys. B Condens. Matter*. 1995. V. 98. № 2. P. 231–237.
18. Liu H., Hartstein M., Wallace G.J., Davies A.J., Hatanen M.C., Johannes M.D., Shitsevalova N., Balakrishnan G., Sebastian S.E. Fermi surfaces in Kondo insulators // *J. Phys. Condens. Matter*. 2018. V. 30. № 16. P. 1–8.
19. Persson K. *Materials Data on ZrB_{12} (SG:225)* // *Materials Project*. 2015.
20. Azarevich A., Bogach A., Glushkov V., Demishev S., Khoroshilov A., Krasikov K., Voronov V., Shitsevalova N., Filippov V., Gabani S., Flachbart K., Kuznetsov A., Gavrilkin S., Mitsen K., Blundell S.J., Sluchanko N.E. Inhomogeneous superconductivity in $\text{Lu}_x\text{Zr}_{1-x}\text{B}_{12}$ do-decaborides with dynamic charge stripes // *Phys. Rev. B*. 2021. V. 103. № 10. 104515.

INFLUENCE OF FERMI SURFACE SHAPE ON MAGNETORESISTANCE ANISOTROPY IN ZrB_{12}

**K. M. Krasikov^a, M. A. Makrushin^{a,b}, S. V. Demishev^{a,c}, V. B. Filippov^d,
N. Yu. Shitsevalova^d, and N. E. Sluchanko^a**

^a *Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation*

^b *Moscow State University, Moscow, Russian Federation*

^c *HSE University, Moscow, Russian Federation*

^d *Frantsevich Institute for Problems of Materials Science, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine*

Presented by Academician of the RAS I.A. Shcherbakov

In a strongly correlated metal ZrB_{12} (zirconium dodecaboride) with an electronic phase separation (dynamic charge stripes), an analysis of the Fermi surface topology is carried out and a map of the open/closed trajectories of charge carriers is constructed. We propose an explanation for the suppression of the charge transport anisotropy in ZrB_{12} comparing the obtained theoretical results with experimental magnetoresistance data at liquid helium temperatures in a magnetic field up to 80 kOe.

Keywords: Fermi surface topology, magnetoresistance anisotropy, open trajectories in metals