

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Национальный исследовательский технологический
университет «МИСИС»

На правах рукописи

Морочо Амбойя Александер Альфредо

**Изучение волн зарядовой плотности в полителлуридах
редкоземельных металлов**

Специальность 1.3.8 —
«Физика конденсированного состояния»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук
Григорьев Павел Дмитриевич

Москва — 2026

Оглавление

	Стр.
Введение	4
Глава 1. Волна зарядовой плотности в полителлуридах редкоземельных элементов $R\text{Te}_n$	14
1.1 Особенности кристаллической структуры $R\text{Te}_n$	14
1.2 Переход в состояние ВЗП в $R\text{Te}_n$	15
1.3 Заключение главы	21
Глава 2. Влияние направленной деформации на температуру волны зарядовой плотности в трителлуридах редкоземельных элементов	23
2.1 $R\text{Te}_3$ как модельные системы для изучения направленных деформаций	23
2.2 Однонаправленные волны зарядовой плотности и симметрия при равноосной деформации	24
2.3 Восприимчивость Линдхарда и уровень Ферми при деформации	28
2.4 Зависимость температуры перехода ВЗП от деформации	30
2.5 Заключение главы	33
Глава 3. Роль слоёв Te в формировании температурного гистерезиса в $R\text{Te}_4$	35
3.1 Гистерезис в тетрателлуридах редкоземельных элементов	35
3.2 Реконструкция поверхности Ферми в $R\text{Te}_4$	37
3.3 Электронная восприимчивость и аппроксимация ширины гистерезиса	41
3.4 Интерпретация и особенности гистерезиса $R\text{Te}_4$	44
3.5 Заключение главы	48
Глава 4. Анализ электронной структуры $R\text{Te}_3$ в состоянии ВЗП	50
4.1 О методе ФЭСУР и его недостатке применительно к состоянию с ВЗП в $R\text{Te}_3$	50

4.2	Определение размеров остаточных электронных карманов по данным ФЭСУР	52
4.3	Определение частотного диапазона остаточных карманов в диапазоне медленных осцилляций $f < 20$ Тл	56
4.4	Определение частотного диапазона остаточных карманов в диапазоне медленных осцилляций $f = 20 - 120$ Тл	59
4.5	Заключение главы	62
	Заключение	64
	Список сокращений и условных обозначений	66
	Список литературы	67
	Приложение А. Модификация закона дисперсии	77
	Приложение Б. Параметры обратного радиуса экранирования Дебая	78
	Приложение В. Изменение поверхности Ферми	79
	Приложение Г. Электрон-фононное взаимодействие	82
	Приложение Д. Квантование изображения	85
	Приложение Е. Фильтрация	88
	Приложение Ж. Сегментация	92

Введение

Волны зарядовой плотности (ВЗП, CDW) представляют собой электронную нестабильность металлического состояния, обычно наблюдаемую в низкоразмерных материалах с сильно анизотропной электронной структурой [1]. В металлах электронная плотность, как правило, является однородной, а равновесные положения ионов формируют идеально периодическую кристаллическую решётку. Однако при понижении температуры поверхность Ферми металла может становиться нестабильной ниже некоторой критической температуры перехода в состояние ВЗП T_{CDW} (температура Пайерлса). В ряде металлов такая нестабильность поверхности Ферми приводит к перераспределению электронной плотности и формированию периодической пространственной модуляции заряда. Подобная модуляция электронной плотности называется волной зарядовой плотности.

Состояние ВЗП связано со сложной физикой коллективных взаимодействий и часто конкурирует с другими упорядоченными состояниями, такими как магнитное упорядочение [2; 3], сверхпроводимость [2–6], а также недавно предложенный механизм антипересечения зон (anticrossing) [7]. Основное состояние с волной зарядовой плотности в частности наблюдается в квазидвумерных слоистых материалах, состоящих из проводящих плоскостей со сравнительно слабым взаимодействием между ними. Среди таких систем можно выделить высокотемпературные сверхпроводящие купраты [8], интеркалированные графитовые соединения [9; 10], а также халькогениды переходных [11–13] и редкоземельных элементов [14; 15].

Халькогениды редкоземельных элементов обладают богатым химическим составом и широким спектром необычных физических свойств [16–21]. Среди халькогенидов теллуриды обычно отличаются от сульфидов и селенидов кристаллической и электронной структурами, а также физическими свойствами, что обусловлено более делокализованной природой валентных орбиталей теллура [22]. В настоящее время полителлуриды редкоземельных элементов RTe_n (R — ион редкоземельного элемента, $n = 2, 3, 4$) привлекают значительное внимание благодаря таким необычным свойствам, как волны зарядовой плотности [15; 23–25], сверхпроводимость [26–28] и магнитосопротивление [29–31].

Полителлуриды редкоземельных элементов демонстрируют собой низко-размерные системы, состоящие из гофрированных слоев $R\text{Te}$, разделённых однослойными и/или двухслойными плоскостями Te [32; 33]. Системы $R\text{Te}_n$ представляют особый интерес для изучения конкурирующих типов электронного упорядочения. Несмотря на относительную структурную простоту Te -плоскостей, характерных для серии $R\text{Te}_n$ и несущих практически двумерные проводящие электроны, фазовая диаграмма и физические свойства этих материалов оказываются весьма богатыми.

Температуру перехода в состояние волны зарядовой плотности и физические свойства семейства $R\text{Te}_n$ можно точно настраивать путём выбора различных лантаноидных элементов, таких как $R = \text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}$ и Tm [15; 34–36]. Параметры решётки монотонно изменяются с изменением атомного номера элемента R , что приводит к систематическому изменению целого ряда свойств системы: анизотропии в плоскости слоёв, векторов ВЗП, температур ВЗП-переходов и даже стабильности в атмосфере. Эти закономерности настолько устойчивы, что управление фазами ВЗП возможно без введения дефектов в систему; благодаря этому квантовые осцилляции могут наблюдаться вплоть до слабых магнитных полей для всех представителей ряда R [37]. Таким образом, замена редкоземельного атома на более лёгкий или более тяжёлый аналог фактически эквивалентна созданию так называемого химического давления в системе и позволяет тонко настраивать свойства соединений $R\text{Te}_n$, включая параметры состояния волны зарядовой плотности.

Поскольку состояние ВЗП в системах $R\text{Te}_n$ в основном определяется вложением (нестингом) поверхности Ферми (ПФ), оно особенно чувствительно к изменениям электронной структуры, вызванным давлением (гидростатическим давлением, химическим давлением или одно- и двухосным напряжением) [23; 26; 27]. При этом большинство соединений остаются металлическими даже в состоянии ВЗП из-за несовершенного вложения ПФ [38; 39]. Механизм вложения ПФ заключается в том, что один участок поверхности Ферми может совпадать с другим после трансляции на волновой вектор Q_{CDW} , что приводит к перераспределению электронной плотности в новом периодическом поле и открытию энергетической щели на ПФ [40]. Однако в двумерных (2D) и трёхмерных (3D) системах практически не реализуется идеальное вложение поверхности Ферми, поэтому такие системы могут оставаться металлическими в состоянии ВЗП, как это наблюдается в соединениях $R\text{Te}_n$ [38; 39].

Несовершенное вложение ПФ приводит к частичному открытию энергетической щели и реконструкции поверхности Ферми, в результате чего сохраняются остаточные электронные карманы. Именно поэтому системы $R\text{Te}_3$ сохраняют металлическое поведение вплоть до низких температур [39; 41]. Исследования системы $R\text{Te}_3$ включают измерения электрического сопротивления и магнитной восприимчивости вдоль двух кристаллографических осей при различных температурах [42], а также изучение температурной зависимости удельной теплоёмкости [43]. В работе [43] сообщается об анизотропии магнитной восприимчивости и наличии аномалий как в магнитной восприимчивости, так и в удельном сопротивлении. Интересной особенностью этих систем является то, что некоторые из них обладают ограниченной устойчивостью к воздействию окружающей среды, однако свойства состояния ВЗП при этом остаются неизменными [14; 44]. Таким образом, соединения полителлуридов редкоземельных элементов $R\text{Te}_n$ обеспечивают не только относительно простую электронную структуру для более глубокого понимания состояния ВЗП, но и уникальную возможность управлять их электрическими транспортными свойствами с помощью внешних воздействий.

Редкоземельные полителлуриды $R\text{Te}_n$ можно разделить на несколько классов соединений, характеризующихся определённым распределением теллуридных слоёв Te [45; 46]. Несмотря на то, что соединения $R\text{Te}_2$ и $R\text{Te}_3$ кристаллизуются соответственно в антиструктуре Cu_2Sb и структуре NdTe_3 , они имеют общую базовую кристаллическую архитектуру с $R\text{Te}_4$, состоящую из чередующихся слоёв тетрагональных плоскостей Te .

На первый взгляд может показаться, что эти системы должны обладать сходными характеристиками, однако в действительности это далеко не так. В соединениях с $n = 2$ и 3 редкоземельный элемент R обычно находится в трёхвалентном состоянии, отдавая системе три электрона. Эти электроны полностью заполняют p -орбитали Te в слоях $R\text{Te}$, но лишь частично заполняют p -орбитали Te в плоских слоях Te . Напротив, в соединениях $R\text{Te}_4$ редкоземельный элемент R находится в двухвалентном состоянии и не передаёт электроны плоскостям Te , вследствие чего они остаются номинально нейтральными [47].

Проводящие свойства соединений $R\text{Te}_3$, а также фазовые переходы, связанные с образованием волн зарядовой плотности, подробно обсуждаются в работах [45; 48]. Фундаментальной особенностью этих систем является существование однонаправленной волны зарядовой плотности и выраженной

анизотропии электрического сопротивления между направлением вдоль оси b и плоскостью (a, c) [14; 45] при температурах ниже температуры перехода Пайерлса $T_{\text{CDW}1}$. Известно, что в системах $R\text{Te}_3$ с более тяжёлыми редкоземельными элементами ($R = \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}, \text{Tm}$, например) при более низких температурах $T_{\text{CDW}2} \leq T_{\text{CDW}1}$ возникает вторая волна зарядовой плотности с волновым вектором $Q_{\text{CDW}2}$, перпендикулярным первому волновому вектору $Q_{\text{CDW}1}$ ($Q_{\text{CDW}1} \perp Q_{\text{CDW}2}$) [23]. Напротив, температура перехода ВЗП в EuTe_4 до сих пор остаётся предметом дискуссий. Хотя первоначально по результатам измерений электрического сопротивления она оценивалась примерно в 255 К [25], недавние исследования с использованием фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР, ARPES) и рентгеновской дифракции показали, что переход ВЗП происходит при значительно более высокой температуре — выше 400 К [47; 49]. Удивительные результаты, представленные в работе [49], демонстрируют, что щель ВЗП в EuTe_4 обладает сильной импульсной и температурной зависимостью. Более того, щель ВЗП в этой системе сохраняется даже при комнатной температуре и демонстрирует немонотонную температурную зависимость, что заметно отклоняется от предсказаний традиционной теории ВЗП.

Необходимо отметить, что, хотя со времени обнаружения второго перехода ВЗП в TbTe_3 с помощью высокоразрешающей синхротронной рентгеновской дифракции при температурах ниже $T_{\text{CDW}2} = 41$ К прошло уже более десяти лет [50], природа второго перехода ВЗП в GdTe_3 до сих пор остаётся не до конца понятной. Ситуация усложняется тем, что помимо ранее обнаруженных двух взаимно перпендикулярных волн зарядовой плотности, исследования оптической проводимости [34] неожиданно выявили наличие третьего порядка ВЗП в системах $R\text{Te}_3$, параметры которого систематически изменяются с увеличением атомного радиуса редкоземельного элемента R . С другой стороны, некоторые соединения $R\text{Te}_3$ демонстрируют выраженный температурный гистерезис вблизи второго перехода Пайерлса, как показано в работе [7].

Недавние исследования соединений $R\text{Te}_4$ [25; 47] выявили полупроводниковое поведение при низкой концентрации носителей заряда. Это хорошо согласуется с детальными измерениями фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением, представленными в работе [49], где было показано, что большая анизотропная щель ВЗП полностью открывается по всей поверхности Ферми. В результате спектральный вес вблизи уровня Ферми E_F практически

отсутствует, что и приводит к проявлению полупроводниковых свойств. Кроме того, семейство соединений $R\text{Te}_4$ может быть расширено до более сложных слоистых соединений типа $AMR\text{Te}_4$ ($A = \text{K}, \text{Na}$; $M = \text{Cu}, \text{Ag}$; $R = \text{La}, \text{Ce}$) [51]. Эти соединения обладают слоистой кристаллической структурой, состоящей из двух типов слоёв: полупроводниковых слоёв $[\text{NaCuTe}]$ и металлических слоёв $R\text{Te}$. Такие сложные структуры демонстрируют новые типы модуляций ВЗП, отличающиеся от тех, которые наблюдаются в бинарных соединениях серии $R\text{Te}_3$.

В работе [52] исследовано влияние одноосного напряжения в плоскости на однонаправленные состояния волны зарядовой плотности в ErTe_3 и TmTe_3 с использованием как эласторезистивных, так и эластокалорических методов. Однако отсутствие прямых измерений параметров решётки соединений $R\text{Te}_3$ затрудняет применение каких-либо корректных количественных поправок. Более полная информация представлена в работе [53], где двухосное растягивающее напряжение в плоскости используется для независимого контроля деформации и измерения удельного сопротивления вдоль главных кристаллографических осей.

В работах [25; 47] сообщается о необычном типе метастабильности в слоистом соединении $R\text{Te}_4$, где наблюдается аномальный гистерезис, охватывающий температурный диапазон более 400 К. В отличие от большинства систем с волнами зарядовой плотности, этот гистерезис проявляется без заметного изменения волнового вектора модуляции. Измерения температурной зависимости электрического сопротивления и дифференциальной сканирующей калориметрии, выполненные на большом количестве кристаллов, указывают на фазовый переход первого рода при температуре около ~ 255 К, который расположен внутри самой петли гистерезиса [47]. В работе [54] проанализированы возможные причины температурного гистерезиса холловской и диагональной компонент тензора удельного сопротивления в системах $R\text{Te}_3$ и $R\text{Te}_4$ соответственно. В обоих случаях ширина гистерезиса превышает 100 К.

Тайны, скрытые в этих материалах, становятся ещё более очевидными при детальном анализе результатов экспериментов ФЭСУР и магнитных квантовых осцилляций (МКО). Недавнее обнаружение медленных осцилляций в системах $R\text{Te}_3$ вызвало дискуссию об их возможной природе: присутствие этих низкочастотных осцилляций объяснялось либо двухслойным расщеплением электронного спектра, либо реконструкцией поверхности Ферми, вызванной формированием волн зарядовой плотности [55]. При этом возможная связь

между состоянием ВЗП и медленными осцилляциями остаётся недостаточно изученной. Это связано, в частности, с отсутствием прямых измерений размеров остаточных электронных карманов с помощью ФЭСУР для соединений $R\text{Te}_3$. Кроме того, из-за ограниченного разрешения ФЭСУР границы поверхности Ферми часто оказываются размытыми, что затрудняет однозначное определение электронных карманов, возникающих после второго перехода ВЗП, как можно видеть, например, в работе [56].

Методы ФЭСУР и МКО являются одними из основных экспериментальных инструментов для исследования электронной структуры твёрдых тел, поскольку позволяют эффективно визуализировать фазовое пространство энергии и импульса электронов и часто дополняют друг друга. Однако их результаты не всегда оказываются согласованными, а исследования квазидвумерных соединений нередко выявляют противоречия между данными, полученными методами ФЭСУР и квантовых осцилляций. Хотя в работе [57] была предпринята попытка согласовать результаты экспериментов МКО и ФЭСУР для систем $R\text{Te}_3$, обнаруженные чрезвычайно малые электронные карманы с предполагаемым размером всего 0.1–0.16% площади зоны Бриллюэна (ЗБ) не могут объяснить весь спектр гармоник, наблюдаемых в диапазоне частот 0–120 Тл после второго перехода ВЗП [30; 37; 55; 58]. Подобная проблема возникает и в ряде других материалов. Например, в купратных сверхпроводниках YBCO данные ФЭСУР указывают на реконструкцию поверхности Ферми с образованием замкнутых карманов площадью около 6% зоны Бриллюэна [59; 60], тогда как анализ квантовых осцилляций даёт значительно меньшую величину — около 2% площади зоны Бриллюэна [61–70]. Таким образом, между результатами ФЭСУР и МКО по-прежнему сохраняется заметное несоответствие. Ещё одно важное наблюдение в этих системах было сделано сравнительно недавно, когда соединения $R\text{Te}_3$ рассматривались как возможные кандидаты для исследования увеличения эффективной массы носителей заряда вблизи квантовой критической точки, связанной с переходом ВЗП [37]. Однако, вопреки ожиданиям, никаких признаков существенного роста эффективной массы, связанного с остаточными электронными карманами при приближении ко второму переходу ВЗП, обнаружено не было.

Таким образом, возникает парадоксальная ситуация: два из наиболее мощных экспериментальных методов исследования электронной структуры материалов — ФЭСУР и квантовые осцилляции — приводят скорее к появлению

новых вопросов, чем к окончательным ответам. Очевидно, что либо существующие эксперименты всё ещё недостаточно точны, либо в этих системах реализуются физические механизмы, которые пока остаются недостаточно понятыми.

Целью исследования является выявление и теоретическое описание механизмов формирования волн зарядовой плотности и электронной структуры в состоянии с волной зарядовой плотности в полителлуридах редкоземельных элементов $R\text{Te}_n$ ($n = 3, 4$), включая влияние направленных деформаций, вклад теллуридных слоёв, реконструкцию поверхности Ферми и интерпретацию квантовых осцилляций на основе современных методов анализа электронной структуры.

Учитывая вышеупомянутые пробелы в области, для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Оценить изменение температуры ВЗП при двух- и одноосных деформациях в $R\text{Te}_3$.
2. Оценить изменение поверхности Ферми при деформации в $R\text{Te}_3$.
3. Оценить вклад слоёв теллурида в величину аномального температурного гистерезиса в $R\text{Te}_4$.
4. Определить взаимосвязь и конкуренцию различных видов нестабильностей внутри аномального температурного гистерезиса в $R\text{Te}_4$.
5. Определить размер остаточных электронных карманов в $R\text{Te}_3$.
6. Объяснить появление различных гармоник медленных осцилляций в $R\text{Te}_3$ и отсутствие увеличения эффективной массы вблизи квантовой критической точки ВЗП.

Научная новизна: все результаты, представленные в данной работе, получены впервые. Основными новыми результатами являются:

1. Оценка вклада различных слоёв теллурида в величину аномального температурного гистерезиса в $R\text{Te}_4$. Кроме того, в этих системах изучалось взаимодействие между ВЗП и антипересечением зон на поверхности Ферми.
2. Изучение теоретических основ различных видов деформации и их влияния на изменение температуры ВЗП в $R\text{Te}_3$. В этих системах также исследовалось изменение поверхности Ферми при деформации.
3. Получение приближённой оценки размера остаточных электронных карманов после второго перехода ВЗП в $R\text{Te}_3$. Впервые предпринята

попытка согласовать данные ФЭСУР и МКО с использованием методов обработки изображений для системы $R\text{Te}_3$.

Практическая значимость данной работы заключается в детальном исследовании ранее наблюдавшихся экзотических явлений в полителлуридах редкоземельных элементов $R\text{Te}_n$ ($n = 2, 3$). В настоящее время эти системы представляют значительный интерес для физики квазидвумерных материалов благодаря наличию волны зарядовой плотности и богатству связанных с ней коллективных электронных состояний. Системы $R\text{Te}_n$ ($n = 2, 3$) являются слоистыми материалами, демонстрирующими широкий диапазон температур перехода ВЗП и разнообразие квантовых свойств. Это делает их удобной модельной системой для исследования взаимодействия различных электронных нестабильностей металлического состояния, а также для изучения механизмов формирования коллективных состояний в низкоразмерных системах.

Высокая чувствительность систем $R\text{Te}_n$ к внешним воздействиям, таким как направленные деформации и магнитное поле, открывает возможности для контролируемого изменения их электронных свойств. Это делает полителлуриды редкоземельных элементов перспективной платформой для изучения новых квантовых эффектов и потенциальных приложений в квантовых технологиях следующего поколения. Возможность управления свойствами систем $R\text{Te}_n$ с помощью направленных деформаций и понимание механизмов их влияния представляют собой не только новую область исследований, но и открывают перспективы изучения других соединений, принадлежащих к семейству халькогенидов редкоземельных элементов. Также в данной работе рассматриваются методы обработки результатов ФЭСУР, направленные на поиск соответствия между данными ФЭСУР и МКО в квазидвумерных системах. Несмотря на ряд преимуществ метода ФЭСУР, получение точной двумерной карты зонной структуры в импульсном пространстве остаётся сложной задачей в этих системах. Поэтому в данной работе используются методы обработки изображений на основе данных ФЭСУР для более точного определения размеров остаточных электронных карманов в соединениях $R\text{Te}_3$. Представленные методы могут применяться и к другим квазидвумерным материалам, таким как высокотемпературные сверхпроводящие купраты.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. На основе вычисления электронной восприимчивости получены оценки изменения температуры перехода в волну зарядовой плотности (ВЗП).

- ВЗП изменяется в трителлуридах редкоземельных металлов при различных режимах направленных деформаций. При одно- и двухосных деформациях изменение поверхности Ферми может быть описано как линейная деформация в импульсном пространстве. Температура ВЗП перехода изменяется в основном из-за сдвига волнового вектора ВЗП и соответствующего изменения силы взаимодействия, а не из-за влияния нестинга поверхности Ферми.
2. Температурный гистерезис проводимости в тетрателлуридах редкоземельных металлов возникает из-за конкуренции ВЗП и антипересечения электронных зон, усиленного электрон-электронным взаимодействием. Полученные в рамках этой модели оценки ширины этого гистерезиса на основе вычисления электронной восприимчивости, с учетом изменения спектра электронов вызванного отталкиванием зон в области их пересечения на уровне Ферми, согласуются с экспериментом.
 3. Вычислен вклад различных проводящих слоёв теллура и межслоевого взаимодействия в электронную восприимчивость и температуру ВЗП перехода в тетрателлуридах редкоземельных металлов, в том числе комбинации моно- и бинарных слоёв теллура при различных температурах. Хорошее согласие с экспериментом по температурной ширине гистерезиса достигается только при учёте вклада комбинации моно- и бислойных p -орбиталей Те в электронную восприимчивость и антипересечения зон.
 4. Вычислена площадь электронных карманов поверхности Ферми в трителлуридах редкоземельных металлов на основе разработанного автором метода обработки данных фотоэмиссии электронов с угловым разрешением (ARPES). Полученные результаты согласуются с измерениями частоты магнитных квантовых осцилляций.

Достоверность полученных в диссертации результатов подтверждается следующими факторами. Результаты, достигнутые в рамках исследования направленных деформаций в теллуридных слоях, дополняются экспериментальными исследованиями одно- и двухосных деформаций. Настоящие результаты, касающиеся появления аномального температурного гистерезиса, согласуются с экспериментальными данными по сопротивлению в $R\text{Te}_4$. Предложенный новый метод определения размера остаточных электронных карманов в системе

RTez даёт результаты в диапазоне медленных квантовых колебаний и может быть использован для анализа мелких деталей поверхности Ферми во многих других соединениях, для которых доступны экспериментальные данные ФЭСУР и МКО. Это особенно важно для соединений с упорядочением волны зарядовой плотности или антиферромагнитным упорядочением с конечным волновым вектором Q , где перестройка поверхности Ферми, вызванная рассеянием электронов на Q , приводит к образованию небольших карманов на поверхности Ферми. Предлагаемый метод обработки данных может способствовать достижению лучшего согласия между результатами ФЭСУР и МКО в таких квазидвумерных системах.

Апробация работы. Основные результаты, представленные в диссертации, докладывались на:

1. XXI Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления», 23.05.2024, Москва, Россия.
2. XVI Российской конференции по физике полупроводников, 07.10.2024 – 11.10.2024, Санкт-Петербург, Россия.
3. XXIX Симпозиум «Нанозифика и нанозлектроника», 10.03.2025 – 14.03.2025, Нижний Новгород, Россия.
4. 67-я Всероссийская научная конференция МФТИ, 30.03.2025, Москва, Россия.
5. Международная школа «Сложные системы и перспективные материалы», 30.06.2024 – 04.07.2024, Дубна, Россия.

Личный вклад. Все новые теоретические и численные результаты, приведённые в данной диссертационной работе, получены лично автором, либо при его непосредственном участии.

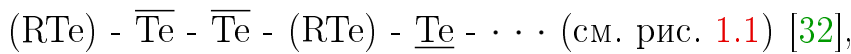
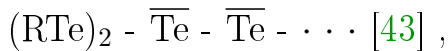
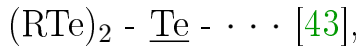
Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 4 научных статьях [55; 71–73], которые изданы в журналах, рекомендованных ВАК и индексируемых Web of Science и Scopus.

Объём и структура работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и 7 приложений. Полный объём диссертации составляет 93 страницы, включая 32 рисунка. Список литературы содержит 136 наименований.

Глава 1. Волна зарядовой плотности в полителлуридах редкоземельных элементов $R\text{Te}_n$

1.1 Особенности кристаллической структуры $R\text{Te}_n$

Полителлуриды редкоземельных элементов $R\text{Te}_n$ (R — ион редкоземельного элемента, $n = 2, 3$ и 4) представляют собой квазидвумерные системы, состоящие из гофрированных слоёв $R\text{Te}$, разделённых моно- и/или двухслойными плоскостями Te [32; 33]. Для $n = 2, 3$ и 4 схемы укладки, перпендикулярные плоскостям Te , имеют следующий вид:



Подчёркнутые и надчёркнутые символы обозначают атомы Te в монослоях и бислоях соответственно, а "..." означает, что последовательность слоёв перед точками повторяется. Несмотря на то, что $R\text{Te}_2$ и $R\text{Te}_3$ кристаллизуются в анти- Cu_2Sb и NdTe_3 структурах соответственно [43], они имеют общую базовую кристаллическую структуру, состоящую из чередующихся слоев тетрагонального слоя Te . В сериях $n = 2$ и 3 , атом редкоземельного элемента R обычно отдаёт три электрона системе. Эти электроны полностью заполняют p -орбитали Te в слоях $R\text{-Te}$, но частично заполняют p -орбитали Te в плоских слоях Te [25]. В отличие от этого, в случае $n = 4$, R имеет двухвалентное состояние и не принимает и не отдаёт электроны плоскостям Te . Таким образом, плоскости Te остаются формально нейтральными [47].

Хорошо известно, что свойства $R\text{Te}_3$ можно регулировать различными способами: приложением давления [74], изменением редкоземельного элемента [75; 76], а также внедрением атомов металлов или органических молекул [75; 76] в промежутки между слоями Te , которые связаны между собой слабыми Ван-дер-ваальсовыми силами [75], подобно графиту.

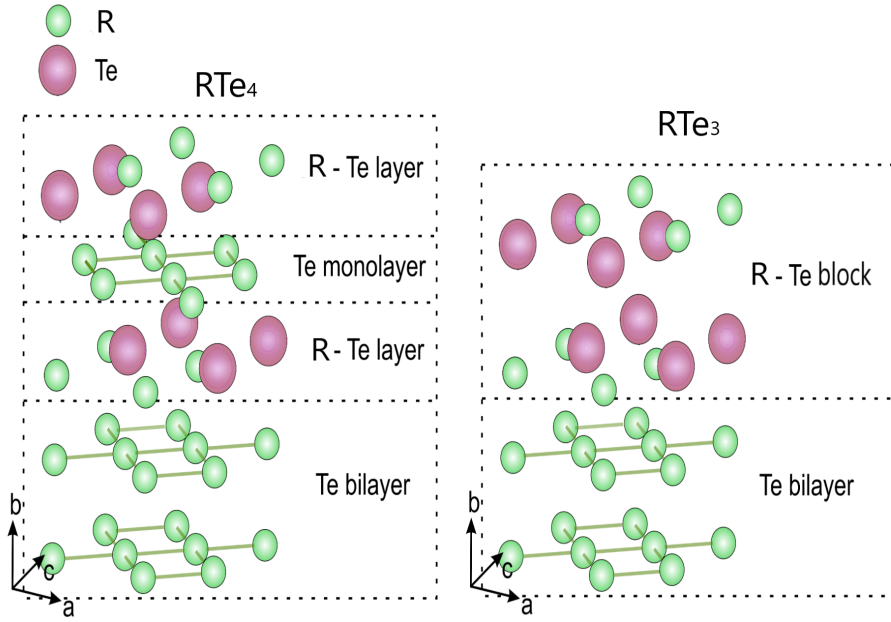


Рисунок 1.1 — Кристаллическая структура систем $R\text{Te}_3$ и $R\text{Te}_4$.

В соединениях $R\text{Te}_4$ моно- и бислоиные ВЗП имеют одинаковый волновой вектор, однако демонстрируют различные искажения плоскостей Te [25]. Это может приводить к существенным различиям характеристик $R\text{Te}_4$, связанных с ВЗП, по сравнению с соединениями $R\text{Te}_2$ и $R\text{Te}_3$ [49].

Слоистая кристаллическая структура этих материалов позволяет с высокой точностью изучать их электронную структуру с помощью различных экспериментальных методов. Измерения, проведённые методами рентгеновской дифракции [23; 50; 77], просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) [75] и спектроскопии фотоэлектронной эмиссии с угловым разрешением [47; 75] на соединениях $R\text{Te}_n$, продемонстрировали наличие несоизмеримых и соизмеримых искажений ВЗП в квадратных слоях Te. Эти искажения можно объяснить в рамках теории нестинга поверхности Ферми.

1.2 Переход в состояние ВЗП в $R\text{Te}_n$

Переход с образованием волны зарядовой плотности возникает вследствие неустойчивости металлического состояния и приводит к открытию щели на уровне Ферми E_F , что вызывает уменьшение электронной энергии системы [78; 79]. Большинство состояний ВЗП обусловлено свойством нестинга поверхности

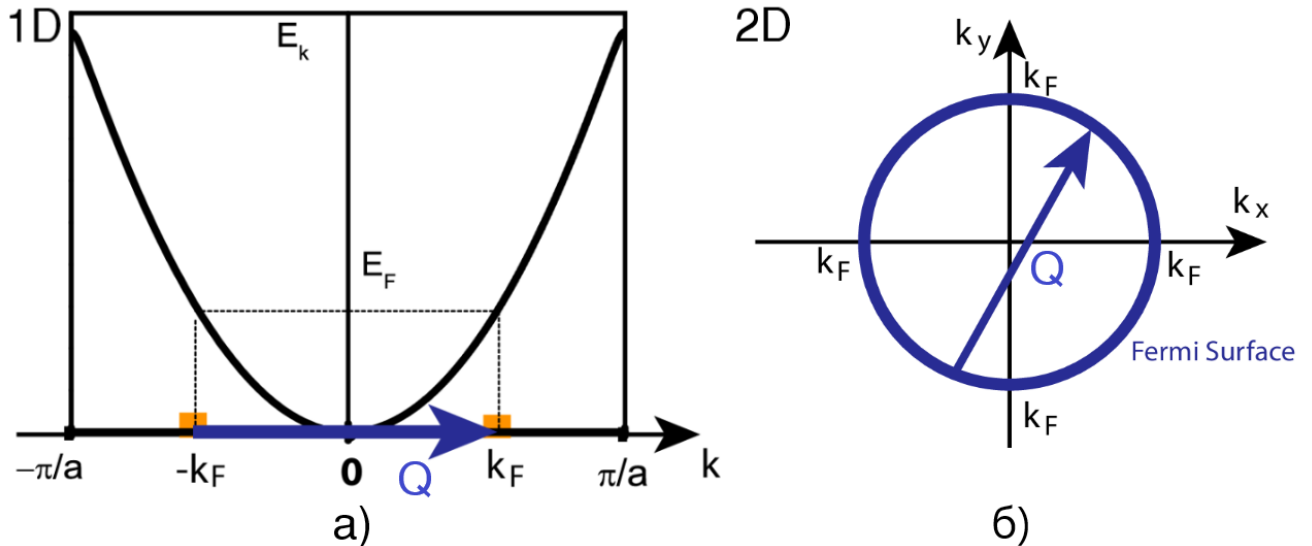


Рисунок 1.2 — Схематическое представление физических явлений, связанных с эффектом «нестинга» поверхности Ферми. (а) График одномерной зонной структуры свободных электронов для цепочки атомов с расстоянием между ними a и одним электроном на атом. (б) Контур Ферми двумерной системы свободных электронов [80].

Ферми, при котором различные участки ПФ могут быть совмещены при переносе на вектор Q (см. рис. 1.2).

Это приводит к расходимости восприимчивости Линдхарда $\chi(Q)$ при понижении температуры (см. рис. 1.3). В присутствии электрон-фононного или электрон-электронного (эл-эл) взаимодействия $U(Q)$ на этом волновом векторе, когда произведение

$$U(Q)\chi(T,Q) = 1, \quad (1.1)$$

металлическое состояние неустойчиво и образуется ВЗП [1]. В отличие от вигнеровской кристаллизации, возникающей только при низкой электронной плотности, когда потенциальная (кулоновская) энергия электронного газа значительно превышает его кинетическую энергию, волна зарядовой плотности может возникать даже при высокой металлической плотности электронов.

Волны зарядовой плотности представляют собой электронные неустойчивости, часто наблюдаемые в низкоразмерных материалах, обладающих сильно анизотропной электронной структурой. Условие нестинга легко реализуется в низкоразмерных электронных системах. Идеальный нестинг может быть достигнут в одномерных (1D) системах с ВЗП, где поверхность Ферми может

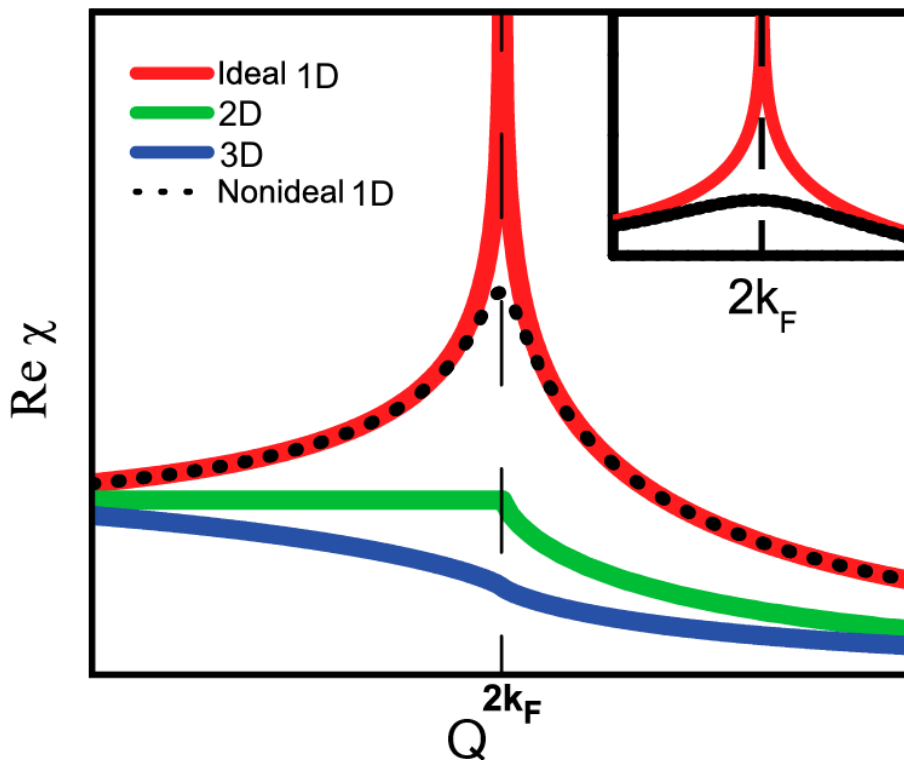


Рисунок 1.3 — Функция Линдхарда как функция размерности. Пунктирная линия показывает эффект 2% отклонения от идеального нестинга, а на вставке показана небольшая релаксация Друде [80].

быть полностью совмещена (см. рис. 1.2). Такие 1D-системы становятся изоляционными или полупроводниковыми в фазе ВЗП. Для 2D- или 3D систем с ВЗП идеальный нестинг всей поверхности Ферми практически невозможен. В этом случае энергетическая щель ВЗП образуется только в областях поверхности Ферми, удовлетворяющих условию нестинга, и система остаётся металлической даже в состоянии ВЗП.

Квазидвумерные бинарные полителлуриды редкоземельных элементов $R\text{Te}_n$ являются хорошо известными системами с состояниями ВЗП, обусловленными нестингом поверхности Ферми (ПФ) [34; 38; 39]. Системы $R\text{Te}_2$ обладают рядом общих черт и схожих свойств с родственными двухслойными материалами $R\text{Te}_3$ [81]. Тем не менее между ними существуют и важные различия. Прежде всего, рассчитанная восприимчивость Линдхарда $\chi(Q)$ для $R\text{Te}_2$ не имеет одного выраженного максимума, а демонстрирует скорее широкий диапазон максимумов, соответствующих вложений различных областей ПФ. В отличие от этого, аналогичные расчёты для $R\text{Te}_3$ показывают очень чётко выраженный максимум $\chi(Q)$ [82].

Одним из следствий этого различия между RTe_2 и RTe_3 является то, что модуляция решётки несколько отличается для каждого члена семейства теллуридных соединений, тогда как для всех представителей семейства трителлуридов она по существу одинакова и характеризуется простым однонаправленным волновым вектором [83].

В состоянии ВЗП соединения RTe_n ($n = 2, 3$) остаются металлическими из-за идеального нестинга ПФ. Среди соединений серии RTe_n LaTe_2 рассматривался как потенциальный пример полупроводника в состоянии ВЗП. Однако сообщаемые свойства переноса заряда указывают на то, что LaTe_2 является скорее плохим металлом, чем изолятором [82; 84; 85]. Подробные исследования инфракрасной спектроскопии LaTe_2 также согласуются с таким поведением LaTe_2 в состоянии ВЗП [83; 86]. Измеренная ПФ CeTe_2 с помощью ФЭСУР аналогична ПФ LaTe_2 , что указывает на то, что состояния $\text{Ce } 4f$ вносят незначительный вклад в формирование ВЗП в CeTe_2 [87].

В зависимости от дисперсии электронов $\varepsilon(k)$ в полителлуридах возможны два различных состояния ВЗП. Первое из них, называемое идеальным нестингом поверхности Ферми, реализуется в случае, когда

$$\varepsilon(k + Q) + \varepsilon(k) < \Delta_0, \quad (1.2)$$

где Δ_0 — параметр порядка волны зарядовой плотности (щель). Если вся поверхность Ферми удовлетворяет свойству нестинга, образование ВЗП приводит к фазовому переходу металл-полупроводник, как это наблюдается во многих материалах [78; 79], включая тетрателлуриды редкоземельных элементов RTe_4 [25; 49]. В противном случае, когда нестинг ПФ несовершенен и ограничивается лишь отдельными участками ПФ, т.е.

$$\varepsilon(k + Q) + \varepsilon(k) > \Delta_0, \quad (1.3)$$

металлическая проводимость сохраняется в состоянии ВЗП, что наблюдается, например, в различных редкоземельных трителлуридах RTe_3 [14]

Как было показано в разделе 1.1, трителлуриды редкоземельных элементов являются квазидвумерными материалами, характеризующимися чередующимся расположением проводящих квадратных плоскостей теллура, разделенных изолирующими слоями редкоземельных блоков [88]. Ниже критической температуры $T_{\text{CDW}1}$ соединения RTe_3 демонстрируют однонаправленное

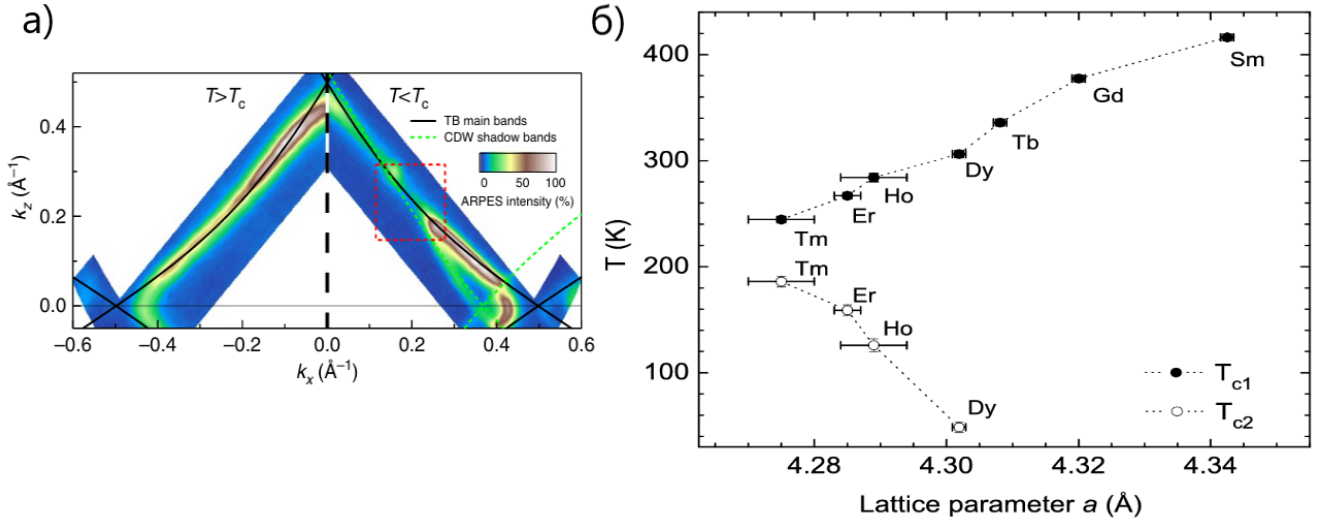


Рисунок 1.4 — (а) Поверхности Ферми $R\text{Te}_3$ при $T > T_{\text{CDW}1}$ (слева) и $T < T_{\text{CDW}1}$ (справа) [41]. (б) $T_{\text{CDW}1}$ и $T_{\text{CDW}2}$ в зависимости от параметра решетки a при 300 К [23].

несоизмеримое состояние ВЗП (см. рис. 1.4 и рис. 1.5), характеризующееся единственным волновым вектором в плоскости Te приблизительно $Q_{\text{CDW}1} \approx (2/7)c^*$. Однако более тяжелые ионы редкоземельных элементов в соединениях $R\text{Te}_3$ ($R = \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}, \text{Tm}$ и Tb) претерпевают второй переход ВЗП при более низких температурах $T_{\text{CDW}2}$. Этот переход приводит к установлению состояния ВЗП вдоль оси a $Q_{\text{CDW}2} \approx (1/3)a^*$, которое сосуществует с ВЗП вдоль оси c (см. рис. 1.5) [23]. Открытие и сосуществование этих двух перпендикулярных состояний ВЗП в более тяжёлых соединениях $R\text{Te}_3$ представляет особый интерес. Экспериментально сосуществование этих фаз ранее наблюдалось с помощью ФЭСУР [56]. Низкотемпературные измерения выявляют две несоизмеримые энергетические щели ВЗП, возникающие вследствие нестинга поверхности Ферми вдоль перпендикулярных направлений. К ним относятся большая щель ВЗП ($\Delta_1 = 175$ мэВ), возникающая в результате ВЗП с волновым вектором $Q_{\text{CDW}1} \approx 0.70(0)c^*$, и меньшая щель ($\Delta_2 = 50$ мэВ), связанная со вторым состоянием ВЗП с $Q_{\text{CDW}2} \approx 0.68(5)a^*$ (см. рис. 1.5).

Как видно на рис. 1.5, переход в состояние ВЗП сопровождается появлением остаточных электронных карманов, которые могут быть проанализированы совместно с измерениями МКО [57; 89]. Однако после второго перехода в состояние ВЗП такой анализ существенно затрудняется из-за появления дополнительных гармоник [37; 55] в области медленных осцилляций, а также вследствие малого размера карманов во второй фазе ВЗП (см. рис. 1.5). Это

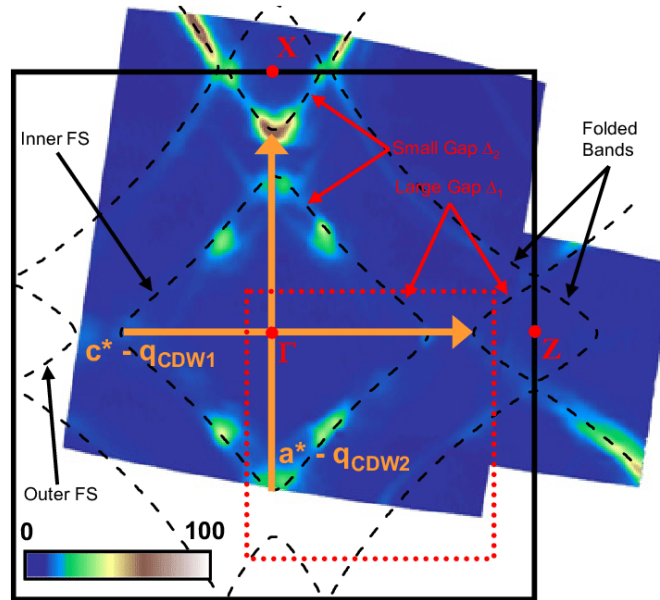


Рисунок 1.5 — ПФ ErTe_3 определена с помощью ФЭСУР при 10 Т [56]

может приводить к противоречиям между результатами различных экспериментальных методов, используемых для изучения электронной структуры в системах RTe_3 , что указывает на необходимость дальнейшего теоретического и экспериментального исследования этих систем.

В отличие от трехвалентных соединений редкоземельных элементов, которые проявляют металлическое поведение ниже перехода Пайерлса с более высокими концентрациями носителей заряда [45; 84; 90], недавние исследования EuTe_4 [25; 75] выявили полупроводниковые свойства с низкими концентрациями носителей заряда. Эти результаты согласуются с детальными измерениями ФЭСУР, проведенными в работах [47; 49], в которых было установлено, что большая анизотропная щель ВЗП полностью открыта на всей ПФ (см. рис. 1.6). Отсутствие электронов проводимости вблизи E_F объясняет полупроводниковые свойства этих материалов. Фаза ВЗП в EuTe_4 была подтверждена с помощью ПЭМ и рентгеновской дифракции, которые выявили несоизмеримый волновой вектор $Q_{\text{CDW}} = 0,643(3)c^*$ [47]. В тетрателлуридах RTe_4 также предполагается, что несовершенный нестинг на ПФ приводит к образованию состояния ВЗП [25; 49].

В RTe_4 моно- и бислоиные ВЗП имеют одинаковый волновой вектор, но демонстрируют различные искаженные плоскости Те [25]. Это может привести к значительному различию характеристик RTe_4 , связанных с ВЗП, по сравнению с характеристиками RTe_2 и RTe_3 .

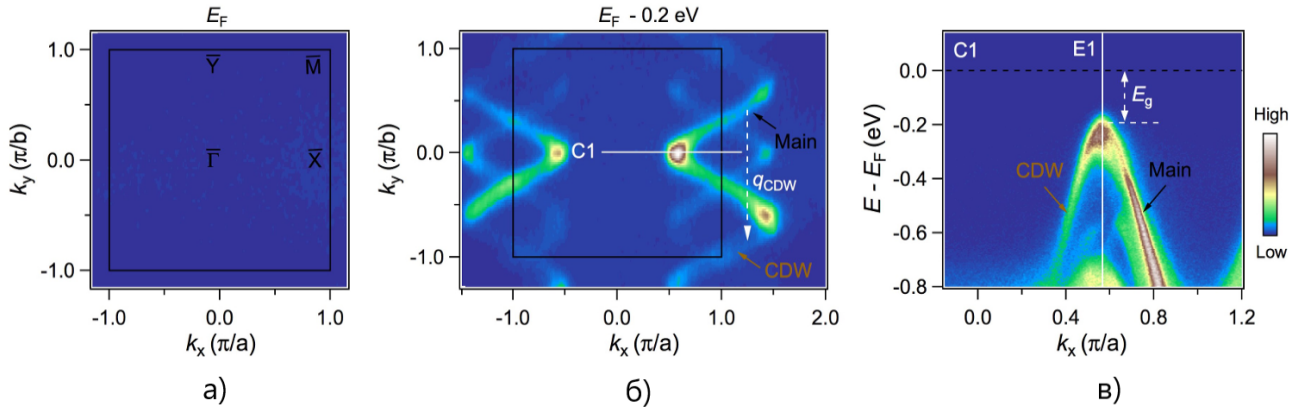


Рисунок 1.6 — Несоизмеримая ВЗП в EuTe_4 . (а) Поверхности Ферми при комнатной температуре, не показывающая контраста интенсивности. (б) Контур постоянной энергии ФЭСУР на 0.2 эВ ниже E_F , измеренный при $T = 20$ К. (в) Дисперсия зон при 55 К, соответствующая срезу C1 [47].

1.3 Заключение главы

В данной главе рассмотрены основные физические принципы, лежащие в основе формирования волн зарядовой плотности в полителлуридах редкоземельных элементов RTe_n . Показано, что данные соединения представляют собой квазидвумерные слоистые системы, в которых проводящие свойства определяются теллуридными плоскостями, обладающими выраженной анизотропией электронной структуры.

Установлено, что ключевым механизмом возникновения состояния волны зарядовой плотности является нестабильность поверхности Ферми, обусловленная эффектом нестинга. В зависимости от степени вложения поверхности Ферми формируется либо частичное, либо полное открытие энергетической щели, что определяет металлический или полупроводниковый характер проводимости в состоянии ВЗП. В частности, показано, что в соединениях RTe_3 реализуется несовершенный нестинг, приводящий к сохранению металлического поведения, тогда как в RTe_4 возможно формирование полной щели и переход к полупроводниковому состоянию.

Рассмотрены особенности кристаллической и электронной структуры соединений RTe_n , а также влияние валентного состояния редкоземельного элемента на заполнение орбиталей теллура и формирование проводящих состояний. Показано, что различия в электронной конфигурации и структуре

слоёв приводят к качественно различным проявлениям ВЗП в соединениях с $n = 2, 3$ и 4 .

Продемонстрированы экспериментальные данные, полученные методом ФЭСУР, и показано, что реконструкция поверхности Ферми в состоянии ВЗП сопровождается образованием остаточных электронных карманов в соединениях $R\text{Te}_3$, которые могут быть проанализированы совместно с измерениями МКО. Однако отмечено, что после второго перехода в состояние ВЗП такой анализ может быть затруднён.

Таким образом, полителлуриды редкоземельных элементов представляют собой удобную модельную платформу для изучения волн зарядовой плотности и связанных с ними коллективных электронных состояний. Полученные в данной главе результаты создают основу для дальнейшего анализа влияния внешних воздействий, таких как деформация, а также для исследования более сложных эффектов, рассматриваемых в последующих главах.

Глава 2. Влияние направленной деформации на температуру волны зарядовой плотности в теллуридах редкоземельных элементов

2.1 RTe_3 как модельные системы для изучения направленных деформаций

Хорошо известно, что слоистые квазидвумерные материалы с тетрагональной симметрией C_4 могут проявлять два типа основного состояния с ВЗП: либо шахматные (двунаправленные) структуры, сохраняющие симметрию решётки, либо однонаправленные полосчатые фазы с пониженной симметрией. Следовательно, одноосное давление может играть ключевую роль в выборе реализуемого типа порядка, способствуя формированию доменов ВЗП с зарядовой модуляцией вдоль осей x или y . Это, в свою очередь, приводит к возникновению полос с однородной ВЗП, ориентированных вдоль соответствующих направлений, как это было экспериментально продемонстрировано в соединении $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.67}$ [91].

Экспериментальные исследования влияния одноосного давления на ВЗП в плоскости CuO_2 соединения $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.67}$ показывают, что давление, приложенное вдоль одной из кристаллографических осей, приводит к увеличению интенсивности упругого рассеяния и уменьшению ширины отражений, соответствующих ВЗП, ориентированной вдоль перпендикулярного направления приложенного давления (практически не затрагивая компоненту ВЗП, ориентированную вдоль приложенного давления) [91]. Такое поведение указывает на то, что ВЗП с ортогональными направлениями модуляции эволюционируют независимо друг от друга под воздействием одноосного давления.

Теоретическое описание полосчатых структур в квазидвумерных теллуридах редкоземельных элементов было предложено в работе [92], тогда как их экспериментальное наблюдение представлено в [93; 94]. В соединениях RTe_3 с тяжёлыми редкоземельными элементами реализуется двунаправленный порядок ВЗП, который может быть интерпретирован как суперпозиция двух зарядовых модуляций с взаимно перпендикулярными волновыми векторами, направленными вдоль кристаллографических осей x и y . Однако такое двунаправленное состояние может конкурировать с однонаправленными полосчатыми фазами

при одноосных деформациях. Это связано с тем, что двунаправленная ВЗП оказывается чрезвычайно чувствительной к объёму решётки, который определяется типом редкоземельного элемента R. При уменьшении ионного радиуса или повышении температуры двунаправленная ВЗП, как правило, уступает место однонаправленной ВЗП [23; 95].

Это ставит принципиально важный вопрос о том, каким образом различные режимы деформации влияют на температуру перехода ВЗП и могут ли они индуцировать двунаправленный порядок в наиболее лёгких представителях серии RTe₃. Таким образом, соединения RTe₃ представляют собой удобные модельные системы для изучения влияния направленной деформации на ВЗП, поскольку температурой перехода и свойствами состояния ВЗП можно управлять, варьируя параметры решетки в плоскости слоев Te посредством химического давления и внешнего давления [23; 26; 27].

2.2 Однонаправленные волны зарядовой плотности и симметрия при равноосной деформации

Кристаллическая структура RTe₃ принадлежит к орторомбической пространственной группе C_{mcm} . В стандартной кристаллографической ориентации ось b направлена перпендикулярно плоскости (a, c) (см. рис. 2.1). Внутри-слоевая (in-plane) электронная дисперсия плоскостей Te хорошо описывается двумерной моделью сильной связи (СС), которая учитывает только две взаимно перпендикулярные цепочки p_x и p_y -орбиталей с амплитудами перескока t_{\parallel} и t_{\perp} , параллельными и перпендикулярными направлению рассматриваемой цепочки соответственно. В рамках этой модели электронные дисперсии имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,2}(k_x, k_y) = & -2t_{\parallel} \cos[(k_x \pm k_y)a/2] \\ & -2t_{\perp} \cos[(k_x \mp k_y)a/2] \end{aligned} \quad (2.1)$$

Одноосные и двухосные возмущения представляют собой новую особенность — возможность переключения ориентации волны зарядовой плотности с оси a на ось c . Однонаправленные состояния ВЗП нарушают как трансляционную, так и вращательную симметрию, а семейство RTe₃ является перспективной

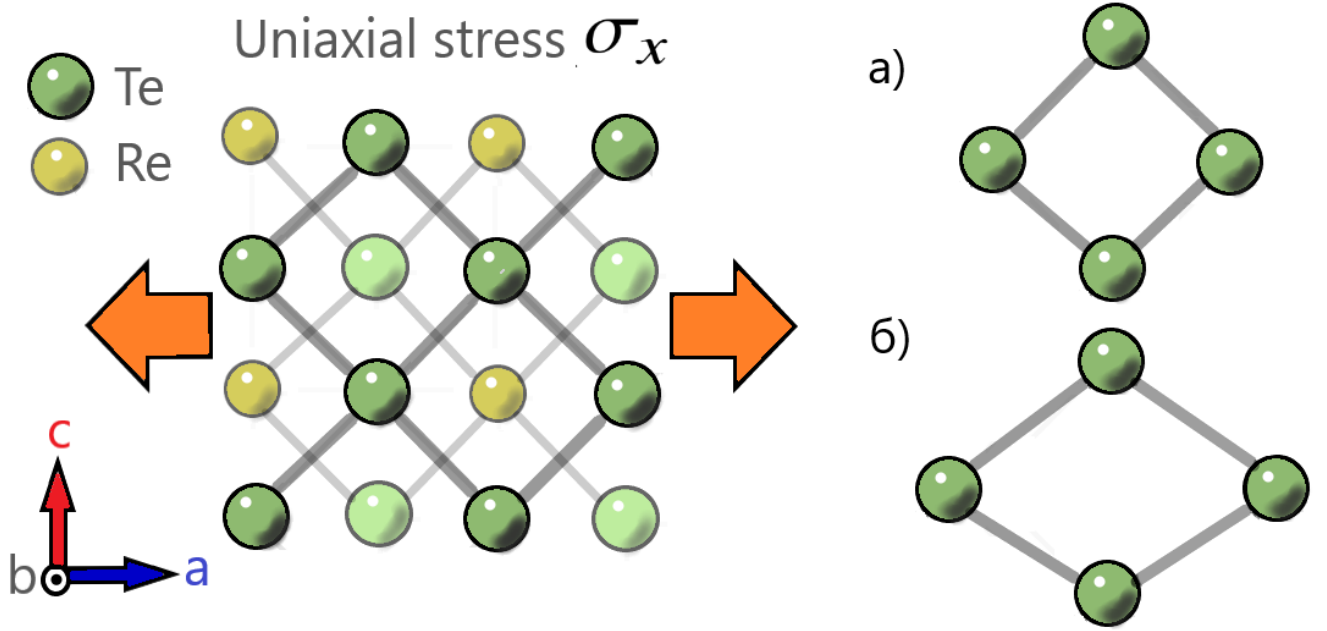


Рисунок 2.1 — Кристаллическая структура, рассматриваемая вдоль оси b , перпендикулярной плоскости образца. Растягивающее напряжение вдоль оси x может обратить исходную орторомбическую деформацию ($a \approx 0.999c$).

модельной системой для изучения взаимодействия деформации и ВЗП, поскольку изменения межатомных расстояний оказывают прямое влияние на электрические свойства материалов. Следовательно, равновесное соотношение параметров решётки $a \approx c$ смещается под действием одноосного напряжения вдоль одной из главных плоскостных осей $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y)$ (см. рис. 2.1), что влияет на электрические характеристики и может приводить к переходам ВЗП [52; 53].

Поскольку состояние ВЗП в основном обусловлено слоями Te, при деформации решётки таким образом, что $a > c$, направление ВЗП может измениться, даже если симметрия плоскости скольжения остаётся неизменной. Такое изменение направления ВЗП недавно было продемонстрировано в работе [52; 53] и является дополнительным доказательством тесной связи между направлением упорядочения ВЗП и орторомбичностью решётки. Кроме того, различие между параметрами решётки вдоль двух осей указывает на то, что первый переход ВЗП T_{CDW1} всегда происходит вдоль оси c .

Соотношения между деформацией и смещением в направлениях a и c определяют изменение постоянных решетки в деформированном состоянии:

$$\delta a = \varepsilon_1 a, \delta c = \varepsilon_2 c. \quad (2.2)$$

Деформация, определяемая через бесконечно малые компоненты смещения относительно точки равновесия [96], может быть использована для оценки влияния одноосного и двухосного напряжения на соединения RTe_3 . Как показано в приложении А, введение компонентов деформации не изменяет электронную дисперсию, описываемую уравнением (2.1), которая сохраняет ту же форму и в деформированном состоянии:

$$\begin{aligned} \varepsilon'_{1,2}(k_x, k_y) = & -2t_{\parallel} \cos \left[\frac{a(k_x \varepsilon'_1) \pm c(k_y \varepsilon'_2)}{2} \right] \\ & -2t_{\perp} \cos \left[\frac{a(k_x \varepsilon'_1) \mp c(k_y \varepsilon'_2)}{2} \right]. \end{aligned} \quad (2.3)$$

В общем случае, поверхность Ферми RTe_3 рассчитывается в рамках модели СС с использованием $t_{\parallel} = -1.9$ эВ и $t_{\perp} = 0.35$ эВ. Уровень Ферми устанавливается равным $E_F = 1.45$ эВ, что является результатом условия наличия 1.25 электрона на каждую орбиталь p_x и p_y , заданного формулой $E_F = -2t_{\parallel} \sin(\pi/8)$. Как видно на рис. 2.2, равноосное деформированное состояние¹ приводит к появлению двух векторов ВЗП, перпендикулярных друг другу, величина которых изменяется одинаково по мере роста растягивающего напряжения в одном из основных направлений. Следовательно, в равноосном деформированном состоянии мы имеем следующие векторы ВЗП:

- а) векторы ВЗП, параллельные приложенному напряжению σ_x : $Q_a < Q_0$;
 - б) векторы ВЗП, перпендикулярные приложенному напряжению σ_x : $Q_c > Q_0$,
- где Q_0 соответствует недеформированному состоянию. В силу симметрии выполняется соотношение $(Q_a + Q_c)/2 \approx Q_0 \approx 10\pi/7$.

Используя модель СС для квадратной решётки и рассматривая только невзаимодействующие p_x - и p_y -зоны Те, было показано, что при достаточно больших значениях электрон-фононного взаимодействия (и, следовательно, высокой температуре перехода T_{CDW}) однонаправленное состояние ВЗП является энергетически более устойчивым по сравнению с двунаправленным состоянием [92]. В рамках этой модели энергетическая щель, возникающая вследствие ВЗП, перекрывает значительную часть поверхности Ферми в одном из двух эквивалентных направлений импульсного пространства RTe_3 , что приводит к естественному нарушению симметрии между осями a и c . Иными словами, слабая орторомбичность кристаллической решётки RTe_3 обеспечивает естественное

¹В данном состоянии при приложении контролируемой внешней силы деформации в двух взаимно перпендикулярных направлениях равны по модулю и противоположны по знаку, т.е. $\varepsilon_x = -\varepsilon_y$.

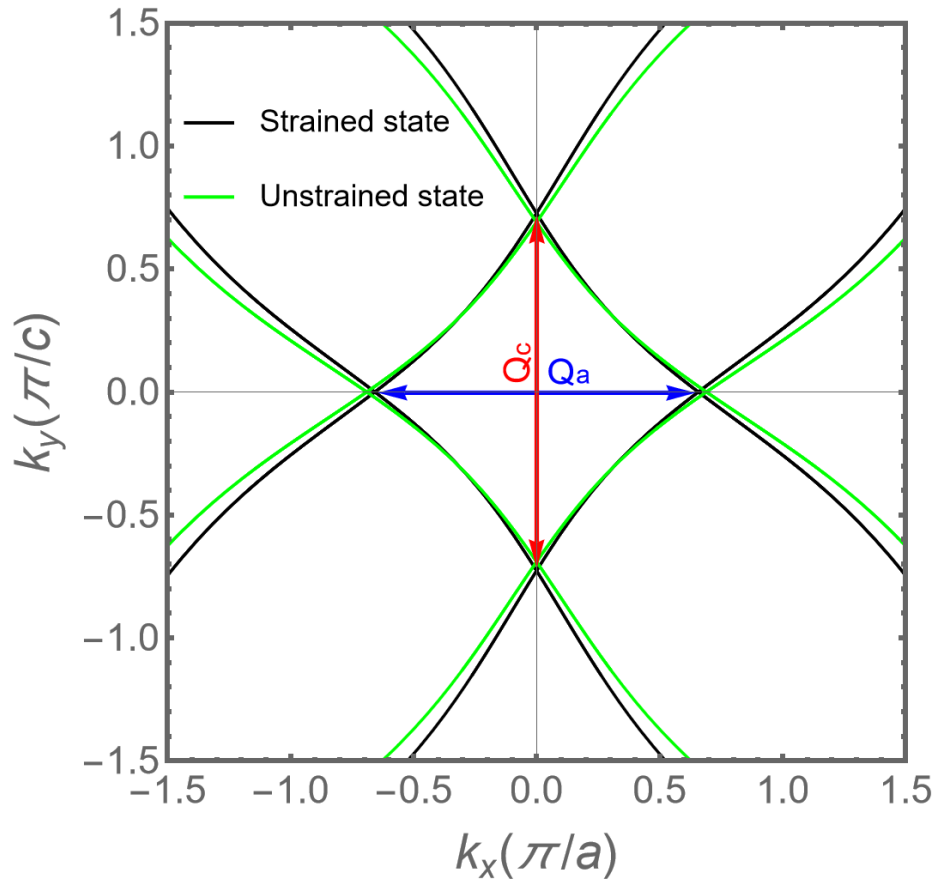


Рисунок 2.2 — Изменение поверхности Ферми RTe_3 при равноосной деформации $\varepsilon_x = -\varepsilon_y$ при приложении растягивающего напряжения вдоль оси x . Сплошная зеленая линия обозначает ненапряженное состояние, а сплошная черная линия — деформированное состояние.

нарушение симметрии между осями a и c , так что для самых лёгких членов серии однонаправленное состояние ВЗП всегда наблюдается вдоль оси c и никогда вдоль оси a . Это предпочтительное направление напрямую связано с падением проводимости, которое значительно больше вдоль оси a , перпендикулярной волновому вектору ВЗП. В результате возникает сильная анизотропия проводимости в плоскости Te [45]. Следовательно, изменения волнового вектора Q_{CDW} , вызванные одноосной или двухосной деформацией, могут приводить к следующим последствиям:

- 1) изменению величины щели ВЗП;
- 2) подавлению состояния ВЗП вдоль направления c , что является прямым следствием изменения температуры перехода.

2.3 Восприимчивость Линдхарда и уровень Ферми при деформации

Известно, что низкоразмерные электронные системы очень восприимчивы к неустойчивости Пайерлса, приводящей к образованию состояния волны зарядовой плотности, обусловленной электрон-фононным и электрон-электронным взаимодействием [1]. Возникновение искажений решётки обычно приводит к снижению электронной энергии системы, и когда это снижение превышает увеличение энергии упругой деформации решётки, происходит переход Пайерлса [97]. Температура перехода ВЗП определяется условием, задаваемым уравнением (1.1) [1].

Восприимчивость Линдхарда χ задаётся выражением:

$$\chi(Q) = \sum_{\alpha, \alpha'} \int \frac{4d^d k}{(2\pi)^d} \frac{n_F(E_{k, \alpha}) - n_F(E_{k+Q, \alpha'})}{E_{k+Q, \alpha'} - E_{k, \alpha}}, \quad (2.4)$$

где n_F — функция распределения Ферми–Дирака, α и α' обозначают подзоны, $d = 2$ — размерность пространства, а $E_{k, \alpha}$ отличается от ур. (2.3) только вблизи точек пересечения двух зон в импульсном пространстве [7].

Чтобы продемонстрировать, что равноосное деформированное состояние (см. рис. 2.2) не влияет на симметрию восприимчивости Линдхарда относительно осей x и y , мы вычисляем восприимчивость, используя уравнение (2.4), вдоль обоих перпендикулярных направлений при $|\epsilon_x| = |-\epsilon_y| = 0.4\%$ (см. рис. 2.3а). Результаты показывают одинаковое смещение максимума от положения равновесия (пунктирная кривая). Следовательно, можно предположить, что основное различие в температуре перехода ВЗП не связано с различием в волновых векторах ($Q_a \neq Q_c$).

Для определения основной причины изменения температуры перехода в RTe_3 при равноосной деформации мы выполняем преобразование Фурье экранированного кулоновского потенциала U , как подробно описано в работе [53]:

$$U(Q_a) = 4e^2 / (Q_a^2 + \zeta^2). \quad (2.5)$$

Здесь связь $U(Q)$ возникает в основном за счёт электрон-электронного кулоновского взаимодействия, экранируемого проводящими электронами:

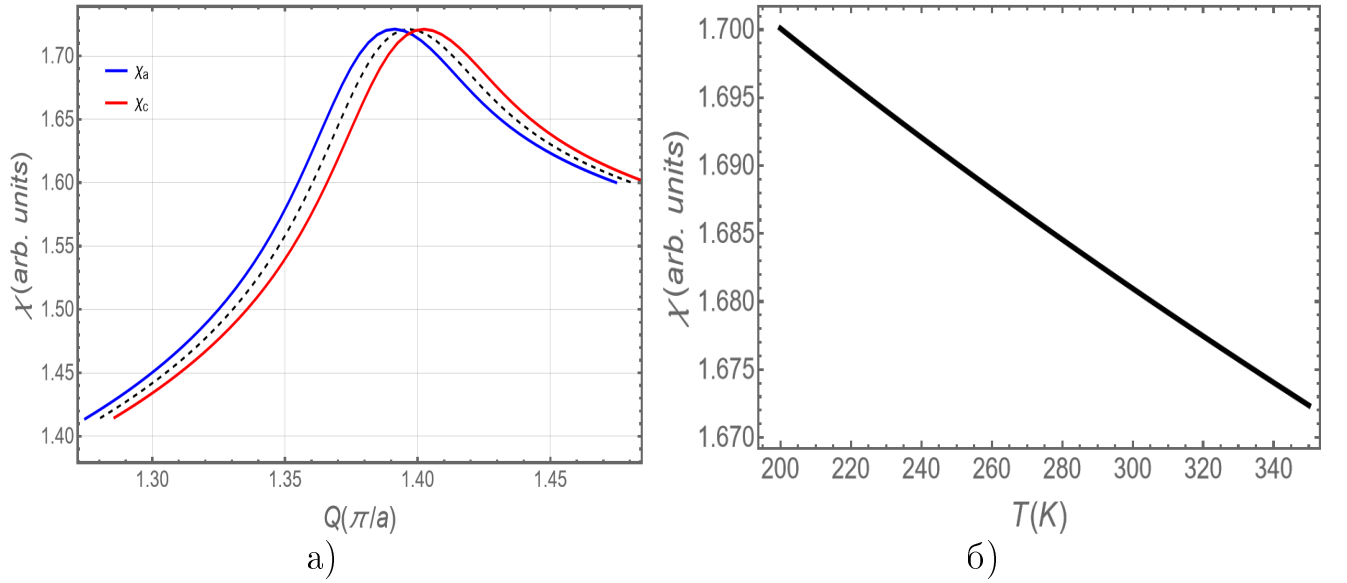


Рисунок 2.3 — (а) Восприимчивость Линдхарда χ как функция волнового вектора Q при равноосной деформации. (б) Температурная зависимость максимальной суммарной магнитной восприимчивости в ненапряженном состоянии. Чёрная пунктирная линия соответствуют восприимчивости в недеформированном состоянии.

$U(r) = e^2 \exp(-\zeta r)/r$, где $\zeta = \sqrt{4\pi e^2 \rho_F}$ — обратный радиус дебаевского экранирования, а ρ_F — плотность состояний на уровне Ферми (подробности приведены в приложении В). Уравнение (2.5) показывает, что увеличение постоянной решётки a усиливает взаимодействие ВЗП $U(Q_a)$. Например, в условиях равноосной деформации, увеличение постоянной решётки на 0.1%, обозначаемое как $\delta a = 0.001, a$, приводит к уменьшению волнового вектора Qa на $\delta Qa/Qa = 0.1\%$ и, соответственно, к увеличению U на $\delta U/U \approx 0.1\%$, поскольку $\zeta \ll Q_a$.

Учитывая, что электронная проводимость в соединениях $R\text{Te}_3$ в основном определяется слоями Te , электронную структуру можно анализировать в рамках двумерной структуры Te . Следовательно, любое несимметричное изменение в слоях Te будет напрямую влиять на площадь поверхности Ферми. Это означает, что при равноосной деформации площадь ПФ остается неизменной, тогда как в двухосном/одноосном деформированном состоянии изменение ПФ можно оценить как линейное изменение в пространстве импульсов (см. приложение В):

$$\frac{\delta A_F}{A_F} = \frac{\delta k}{k}, \quad (2.6)$$

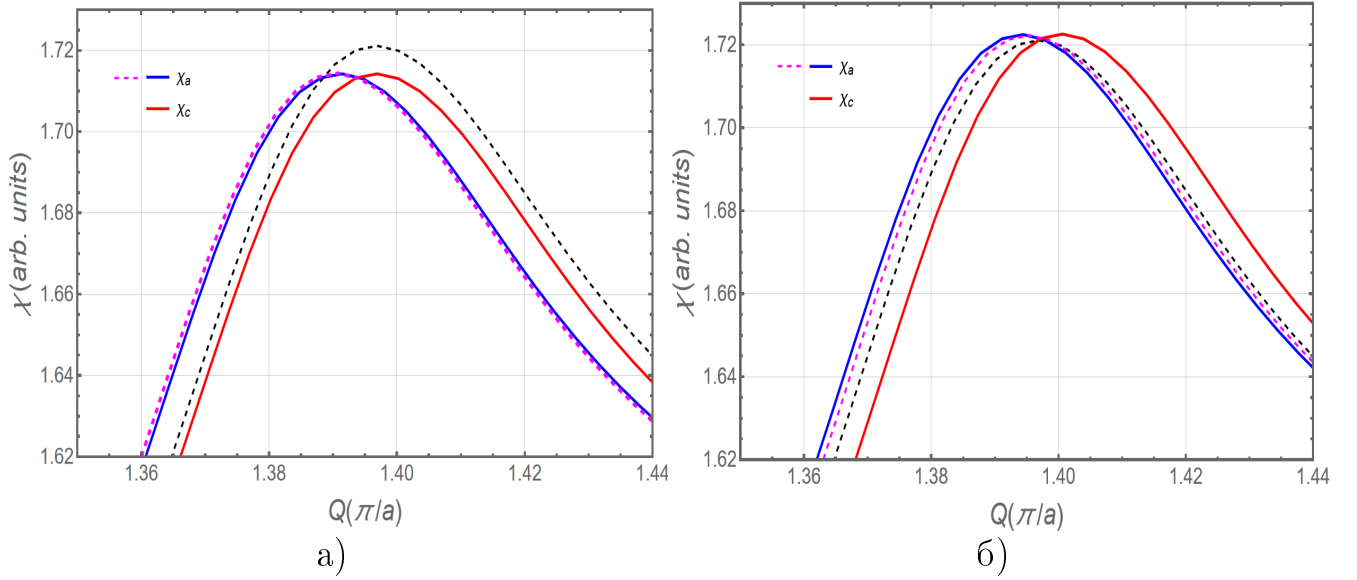


Рисунок 2.4 — Восприимчивость Линдхарда χ в зависимости от волнового вектора Q при (а) одноосной деформации $\varepsilon_x = 0.4\%$ и (б) двухосной деформации. Линия двухосной деформации построена с учётом изменения постоянных решётки в TbTe_3 под действием приложенной силы, данные для которой взяты из работы [53]. Чёрные пунктирные линии соответствуют восприимчивости в недеформированном состоянии, тогда как пурпурные пунктирные линии отражают линейную зависимость уровня Ферми от импульса при деформации, описанную уравнением (2.7).

что приводит к следующей поправке к уровню Ферми:

$$E'_F = E_F \left(1 \pm \left(\frac{k - k'}{k} \right) \right). \quad (2.7)$$

На рис. 2.4 показана восприимчивость при одноосной и двухосной деформации в системах RTe_3 с учетом изменения E_F , согласно ур. (2.7).

2.4 Зависимость температуры перехода ВЗП от деформации

Согласно уравнению (1.1), изменение температуры перехода можно определить по наклону температурной зависимости восприимчивости, показанной на рис. 2.36. Для недеформированного состояния это даёт следующее приближение:

$$\eta = \frac{d[\ln\chi(T, Q)]}{dT} = \chi^{-1} \frac{d\chi}{dT} \approx -1.1 \cdot 10^{-4}. \quad (2.8)$$

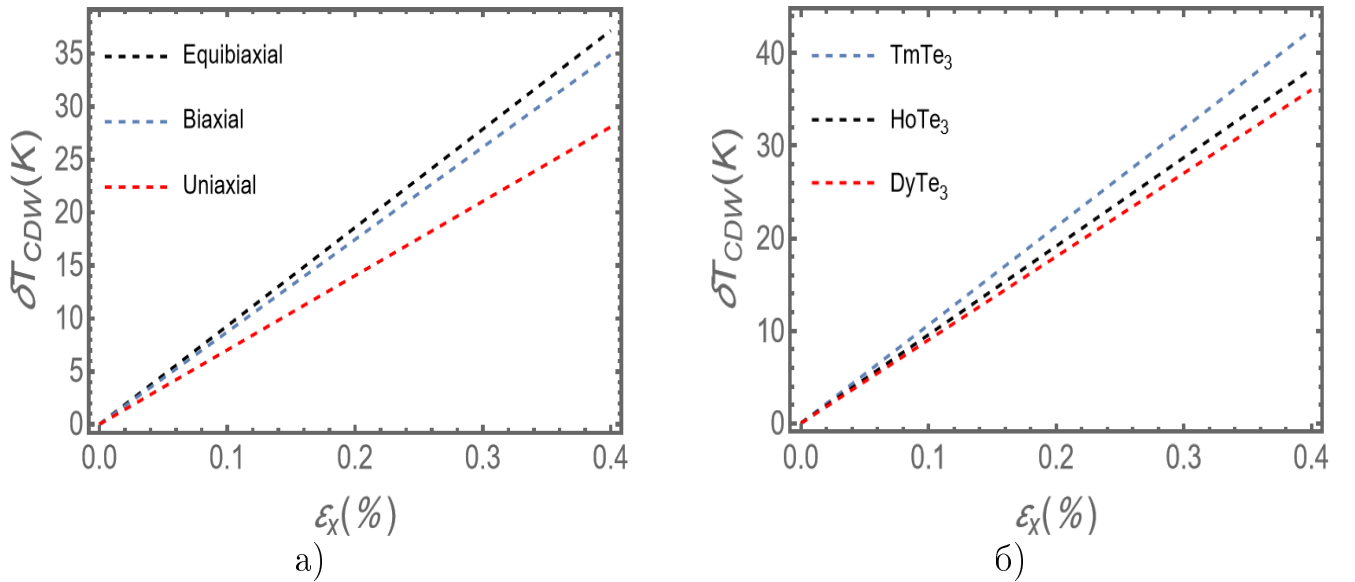


Рисунок 2.5 — (а) Изменение температуры перехода ВЗП как функции деформации ϵ_x в равноосном (equibiaxial), двухосном (biaxial) и одноосном (uniaxial) состояниях. В отличие от рассчитанных режимов деформации (равноосной и одноосной), двухосная линия получена на основе экспериментальной зависимости параметров решётки TbTe_3 от приложенной силы [53]. (б) Изменение температуры перехода ВЗП при равноосной деформации для соединений RTe_3 ($\text{R} = \text{Dy}$, Ho и Tm).

Следовательно, увеличение эл–эл взаимодействия $U(Q_a)$ на $\delta U(Q_a)$ повышает переход ВЗП на δT_{CDW} следующим образом:

$$\delta T_{\text{CDW}} = \frac{\delta U}{\eta U(Q)}. \quad (2.9)$$

Аналогично, одновременное уменьшение постоянной решетки c на δc приводит к уменьшению соответствующей T_{CDW} вдоль оси y . Тогда, при $a > c$ выполняется соотношение $T_{\text{CDW}a} > T_{\text{CDW}c}$, что указывает на выравнивание волнового вектора ВЗП Q вдоль оси x . Это объясняет увеличение T_{CDW} при $a > c$, наблюдаемое в работах [52; 53].

На рис. 2.5а мы сравниваем δT_{CDW} для различных деформированных состояний. Согласно уравнению (2.7), при одноосном растяжении E_F понижается, что приводит к меньшим значениям δT_{CDW} . Коррекция, учитываемая уравнением (2.7), позволяет приблизить результаты к данным, представленным в работе [52], несмотря на отсутствие прямых измерений изменения параметров решётки RTe_3 под напряжением. В отличие от этого, более полные измерения,

представленные в работе [53], позволяют проследить реальную двухосную механическую деформацию, при которой $|\epsilon_c| > |\epsilon_a|$. По сравнению с одноосным напряжением такая контролируемая деформация приводит к увеличению площади поверхности Ферми и, следовательно, температуры перехода T_{CDW} (см. рис. 2.5a).

Кроме того, линия двухосной деформации демонстрирует меньшие значения δT_{CDW} , чем линия равноосной деформации, поскольку поправка на плотность состояний (ПС) даёт $\rho_{F,\text{biaxial}} > \rho_{F,\text{equibiaxial}}$ в деформированном состоянии (см. приложение Б), что делает полученные результаты сопоставимыми с экспериментальными данными работы [53]. Стоит отметить, что рассматриваемые модели не учитывают изменения интегралов перескока, вызванные деформацией.

Как показано на рис. 2.5a, равноосная модель очень точно аппроксимирует линию двухосной деформации. Поэтому мы используем данные из таблицы 1 приложения Б для отслеживания изменения T_{CDW} при равноосной деформации для серии $R\text{Te}_3$ ($R = \text{Dy}, \text{Ho}$ и Tm). По сравнению с теоретическим расчётом для TbTe_3 , представленным в работе [53], расчёт для серии $R\text{Te}_3$ предсказывает более низкие значения δT_{CDW} при $\epsilon \approx 0.2\%$. Это расхождение возникает из-за того, что параметры модели СС были скорректированы для согласования с экспериментальными результатами в работе [53].

С другой стороны, результаты, представленные на рис. 2.5, демонстрируют заметное согласие с экспериментальными исследованиями $R\text{Te}_3$ [52], где увеличение растягивающей деформации приводит лишь к незначительному росту T_{CDW} , формируя слабый минимум при $\epsilon_x \rightarrow -\epsilon_x$. Это не только показывает, что симметричная внутриплоскостная компонента деформации ϵ_x является параметром настройки температуры перехода ВЗП, но и демонстрирует, что основной эффект равноосной, двухосной и одноосной деформации в соединениях $R\text{Te}_3$ обусловлен изменением эл—эл взаимодействия U . Этот эффект является общим для соединений $R\text{Te}_3$, поскольку константа взаимодействия U слабо зависит от атома редкоземельного элемента [48], а также от электрон-фононного взаимодействия (см. приложение Г). Влияние электрон-фононного взаимодействия было учтено и проанализировано для равноосного состояния на рис. 2.6.

В точке вырождения, где $a \rightarrow c$, температуры перехода двух состояний волны зарядовой плотности совпадают, т.е. $T_{\text{CDW}a} \approx T_{\text{CDW}c}$. Это может приводить к пространственному фазовому разделению между состояниями ВЗП_{*a*}

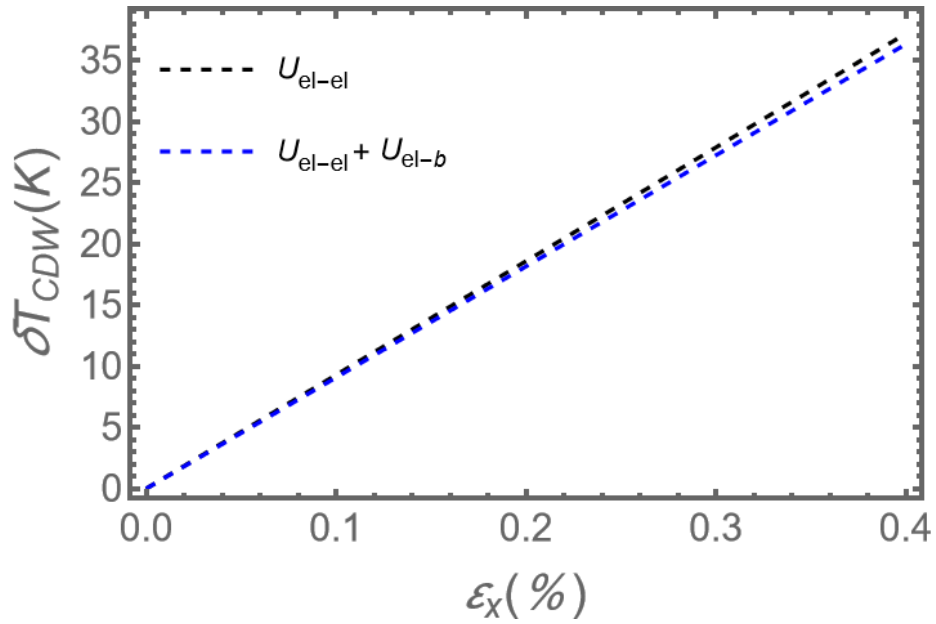


Рисунок 2.6 — Изменение температуры перехода ВЗП T_{CDW} при равноосном напряжении с учетом и без учета электрон-фононного взаимодействия.

и ВЗП_c, а также к усилению флуктуаций, вызывающих нестабильные состояния при $\epsilon_x \rightarrow -\epsilon_x$.

Учитывая, что термический гистерезис часто наблюдается в материалах с ВЗП в метастабильных состояниях [98–100], появление гистерезиса при одноосной или двухосной деформации указывает на фазовый переход первого порядка, при котором направление волнового вектора ВЗП переключается с Q_a на Q_c .

2.5 Заключение главы

В данной главе исследовано влияние направленных деформаций на состояние волны зарядовой плотности в трителлуридах редкоземельных элементов RTe₃. Показано, что эти соединения являются удобной модельной системой для изучения взаимодействия между кристаллической решёткой и электронными нестабильностями благодаря квазидвумерной природе и высокой чувствительности к внешним воздействиям.

Установлено, что деформация решётки приводит к изменению геометрии поверхности Ферми и, как следствие, к перестройке параметров волны зарядовой плотности. Показано, что при равноосной деформации симметрия системы сохраняется, а площадь поверхности Ферми остаётся неизменной, тогда как

одноосные и двухосные деформации приводят к анизотропным изменениям в импульсном пространстве, которые могут быть описаны как линейная деформация поверхности Ферми.

Продемонстрировано, что изменение температуры перехода ВЗП определяется не только смещением волнового вектора, но и изменением эффективного электронного взаимодействия, зависящего от параметров решётки. Получены аналитические оценки зависимости температуры перехода от деформации, показывающие, что увеличение постоянной решётки приводит к усилению взаимодействия и росту температуры перехода ВЗП.

Показано, что одноосные и двухосные деформации по-разному влияют на электронную структуру системы: одноосная деформация приводит к снижению уровня Ферми и меньшему изменению температуры перехода, тогда как двухосная деформация может увеличивать площадь поверхности Ферми и усиливать состояние ВЗП. Полученные результаты качественно согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

Хотя полученные результаты дают удовлетворительное описание рассматриваемых эффектов, для более глубокого понимания состояния ВЗП в $R\text{Te}_3$, индуцированного напряжением, а также взаимодействия между нестабильностью ВЗП и сверхпроводимостью необходимы дальнейшие исследования деформированных соединений $R\text{Te}_3$ с использованием методов ФЭСУР и рентгеновского рассеяния, а также проведение измерений при низкотемпературных механических деформациях.

Продемонстрировано, что направленные деформации являются эффективным инструментом управления параметрами волны зарядовой плотности в системах $R\text{Te}_3$. Полученные результаты важны для понимания механизмов формирования анизотропных электронных состояний и создают основу для анализа более сложных эффектов, связанных с конкуренцией различных фаз и метастабильностью, рассматриваемых в сильно коррелированных электронных системах.

Глава 3. Роль слоёв Те в формировании температурного гистерезиса в $R\text{Te}_4$

3.1 Гистерезис в тетрателлуридах редкоземельных элементов

Помимо ярко выраженной анизотропии в сопротивлении вдоль оси b по отношению к плоскости (a, c) ниже первого перехода Пайерлса T_{CDW1} [23; 45], некоторые соединения $R\text{Te}_3$ проявляют сильный гистерезис в температурном диапазоне вокруг второго перехода Пайерлса T_{CDW2} (см. рис. 3.1). Как было предложено в работе [7], возможное объяснение этого эффекта связано с взаимодействием ВЗП₂ и антипересечения электронных зон на E_F . Подобное взаимодействие также наблюдалось в других соединениях, где электронные зоны пересекаются в областях нестинга ПФ. Семейство $R\text{Te}_4$ также перспективно для применения этой модели взаимодействия электронных нестабильностей, поскольку недавно в EuTe_4 наблюдался гигантский температурный гистерезис сопротивления шириной ≈ 150 К в диапазоне температур ~ 400 К [25; 47] (см. рис. 3.2).

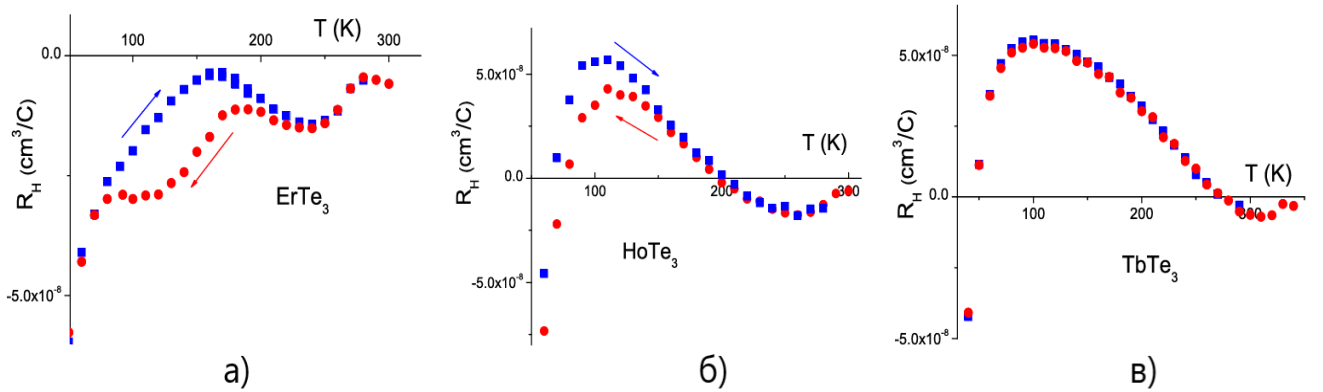


Рисунок 3.1 — Постоянная Холла R_H для соединений (a), HoTe_3 (b) и TbTe_3 (c) в зависимости от температуры. Красные кружки соответствуют охлаждению, а синие квадраты — нагреванию [7].

Наличие этого гистерезиса представляет собой уникальный случай для кристаллических твердых тел. В отличие от других систем с ВЗП, EuTe_4 имеет две основные особенности: гистерезис проявляется (i) внутри фазы ВЗП [25; 101], где ПФ полностью покрыта щелью ВЗП и система демонстрирует полу-

проводниковые свойства, и (ii) без какого-либо влияния на волновой вектор ВЗП [47].

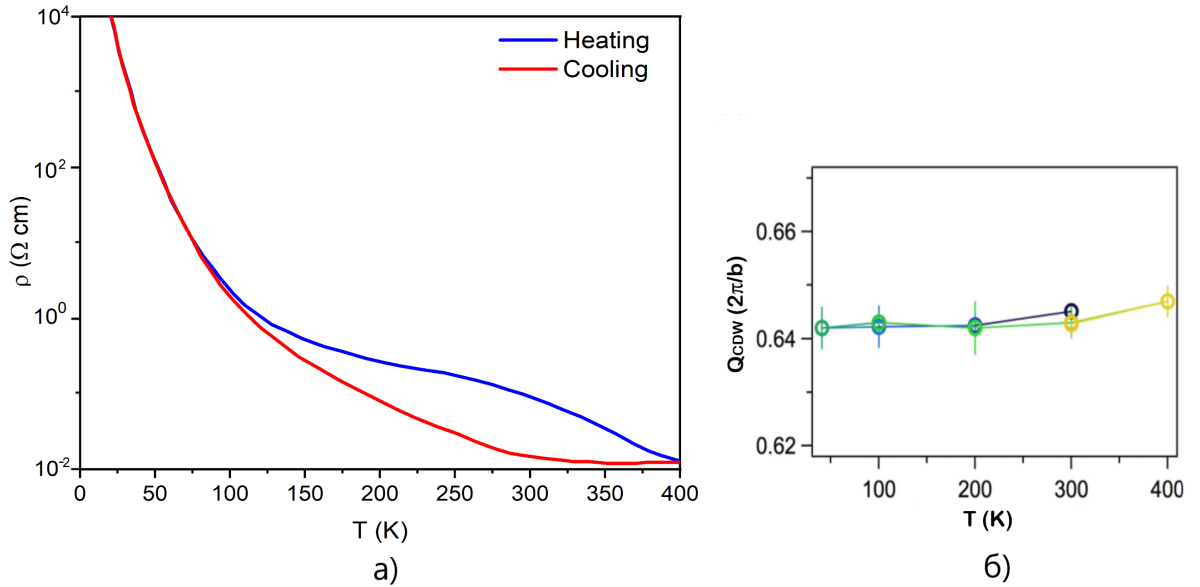


Рисунок 3.2 — (а) Температурная зависимость электрического сопротивления EuTe_4 . (б) Температурная эволюция волнового вектора волны зарядовой плотности по данным рентгеновской дифракции [47].

По сравнению с RTe_3 , дополнительный монослой в RTe_4 обеспечивает дополнительную степень свободы для равновесного состояния ВЗП. Относительная разность фаз искажения ВЗП между соседними бислоями Te и монослоями Te может быть равна 0 (в фазе) или π (в противофазе), что межплоскостная связь внутри одного и того же бислоя Te сильнее, чем связь между бислоем и монослоем (Дополнительный материал, [47]). Однако гигантский тепловой гистерезис наблюдается только в EuTe_4 , а петля гистерезиса существенно не меняется от 0 Тл до 7 Тл [101].

В этой главе мы изучаем конкуренцию между двумя видами электронной нестабильности в RTe_4 : антипересечением зон на ПФ и ВЗП. Это взаимодействие по аналогии с трителлуридами редкоземельных металлов [7], не только может объяснить возникновение гигантского гистерезиса и в тетрателлуридах, но и уменьшение ширины щели ВЗП при низких температурах [49]. В отличие от взаимодействия этих нестабильностей в RTe_3 [7], в RTe_4 учитывается вклад, вносимый различными слоями Te в системах RTe_4 .

3.2 Реконструкция поверхности Ферми в RTe_4

В RTe_4 , как и в других теллуридах редкоземельных элементов, электронная структура описывается моделью сильной связи (СС). В рамках этой модели рассматривается один квадратный плоскостной слой Te. Соответствующие зоны СС, возникающие из $5p_{x,y}$ -орбиталей Te, представлены ниже:

$$\begin{aligned}\varepsilon_1 &= -2t_{\parallel} \cos[(k_x)a_0] - 2t_{\perp} \cos[(k_y)a_0] \\ \varepsilon_2 &= -2t_{\parallel} \cos[(k_y)a_0] - 2t_{\perp} \cos[(k_x)a_0],\end{aligned}\quad (3.1)$$

где интегралы перескока для EuTe_4 равны $t_{\parallel} = 2$ эВ, $t_{\perp} = -0.2$ эВ (см. дополнительные материалы в [47]) и $a_0 \approx c_0$ — двумерная постоянная решетки. В трехмерной зоне Бриллюэна модель СС построена на одной плоскости Te, повернутой на 45° относительно элементарной ячейки и занимает только половину ее площади². Следовательно, площадь двумерной ЗБ для модели СС вдвое больше, чем площадь трехмерной ЗБ, по аналогии с трителлуридами [15].

Две электронные зоны с дисперсией $\varepsilon_1(k)$ и $\varepsilon_2(k)$, заданные уравнением (3.1), имеют четыре точки пересечения k_0 на уровне Ферми, что проиллюстрировано на рис. 3.3 и в работе [7]. В каждой точке вырождения k_0 любое даже малое межзонное взаимодействие $V_0 \equiv V(Q=0)$ приводит к антипересечению зон и перестройке ПФ. Межзонное взаимодействие $V(Q)$ может возникать из электрон-электронного взаимодействия и обычно уменьшается с увеличением переноса импульса Q . Экспериментально антипересечение ПФ было обнаружено с помощью ФЭСУР в соединениях RTe_3 [38; 56] и RTe_4 [49]. По аналогии с [7], в приближении среднего поля новый электронный спектр дается собственными значениями матрицы 2×2 и имеет вид:

²Чтобы учесть эффекты «трехмерной элементарной ячейки», зоны поворачиваются на 45° относительно главных осей элементарной ячейки. Следовательно, проекция ЗБ для трехмерной элементарной ячейки составляет лишь половину площади двумерной

$$\begin{aligned}\varepsilon_1 &= -2t_{\parallel} \cos[(k_x - k_y)a/2] - 2t_{\perp} \cos[(k_x - k_y)a/2] \\ \varepsilon_2 &= -2t_{\parallel} \cos[(k_x - k_y)a/2] - 2t_{\perp} \cos[(k_x + k_y)a/2]\end{aligned}$$

$$E_{\pm}(k) = \frac{\varepsilon_1(k) + \varepsilon_2(k) \pm \sqrt{(\varepsilon_1(k) - \varepsilon_2(k))^2 + 4V_0^2}}{2} \quad (3.2)$$

В точках вырождения k_0 это дает антипересечение (отталкивание) зон (см. рис. 3.2). Значение V_0 оценивается по смещению ПФ Δk в точке пересечения k_0 , наблюдаемой в ФЭСУР [7]. Полная энергия электронной системы определяется суммой энергий квазичастиц по их квантовым числам:

$$\mathcal{E} = \sum_{k,\alpha} E_{\alpha}(k) n_F[E_{\alpha}(k)], \quad (3.3)$$

где $n_F(\varepsilon) = 1/(1 + \exp[(\varepsilon - E_F)/T])$ — функция распределения Ферми-Дирака.

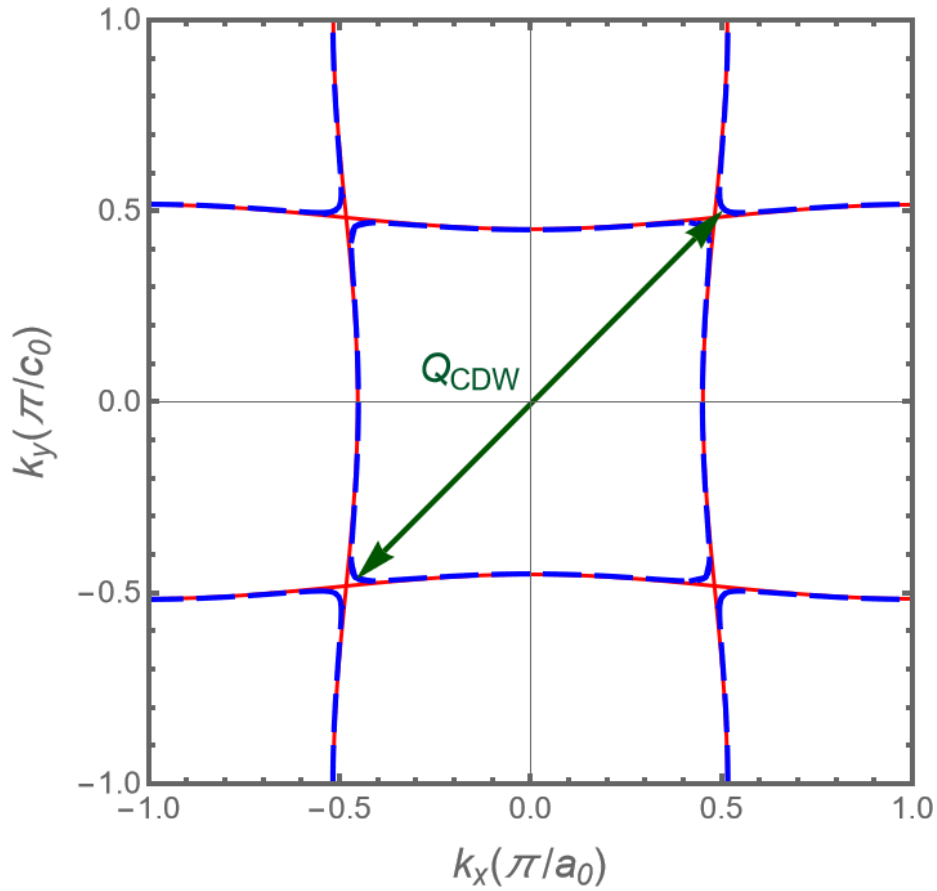


Рисунок 3.3 — Реконструкция РФ из-за нестабильности пересечения в RTe_4 в 2D БЗ. Красные сплошные линии обозначают исходную ПФ, а пунктирные синие линии обозначают реконструированную ПФ. Реконструкция ПФ была получена при 0.2 эВ ниже E_F .

Без антипересечения зон полная сумма, заданная уравнением (3.3), изменяется на исходное значение $\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{E}_0$, получаемое заменой $E_{\alpha}(k) \rightarrow \varepsilon_{\alpha}(k)$. Таким образом, разница $\mathcal{E}_{\text{AC}} = \mathcal{E} - \mathcal{E}_0$ возникает главным образом из окрестности точек пересечения k_0 , где выполняются следующие условия: (i) $|\varepsilon_1(k) - \varepsilon_2(k)| \lesssim V_0$,

так что электронный спектр меняется значительно, и (ii) $|\epsilon_1(k) + \epsilon_2(k)| \lesssim 2V_0$, так что электронный спектр меняется вблизи E_F . Вблизи точек пересечения k_0 каждая ветвь электронного спектра может быть линеаризована вблизи уровня Ферми.

ПФ для EuTe_4 , показанная на рис. 3.3 пунктирной синей линией, была получена в двумерной ЗБ (из зонных расчетов или из измерений ФЭСУР на 0.2 эВ ниже E_F) и сравнивается с первоначальной ПФ (без учета отталкивания уровней), показанной на рис. 3.3 сплошной красной линией. Рассчитанная ПФ хорошо согласуется с данными ФЭСУР [47; 49]. EuTe_4 характеризуется отсутствием карманов ПФ [47], что является результатом открытия большой щели в области ВЗП. В общем случае, переход в состояние ВЗП сопровождается естественным нарушением симметрии между осями x и y . Поэтому для самых легких представителей серии RTe_3 однонаправленная ВЗП всегда наблюдается вдоль оси y , как показано в работе [23].

Несмотря на некоторое сходство со своими аналогами RTe_3 , в системе EuRe_4 происходит нечто интригующее; температура перехода ВЗП по-прежнему остается загадкой, и только недавние измерения с помощью ФЭСУР и рентгеновского излучения позволяют предположить, что переход ВЗП происходит при гораздо более высокой температуре, превышающей 400 К [47; 49; 101], и наблюдаемое гистерезисное поведение не связано с переходом ВЗП. Чтобы определить силу взаимодействия между нестабильностями, упомянутыми выше в EuTe_4 , мы рассматриваем разность энергий на единицу площади и компоненту спина вблизи точек пересечения k_0 :

$$\Delta\mathcal{E}_{AC} \sim -V_0^3 a^2 \rho_F^2, \quad (3.4)$$

где $V_0 \approx 0,26$ эВ для EuTe_4 , $\rho_F = 1/\pi\hbar v_F a$ — квазиодномерная плотность состояний на уровне Ферми на одну ветвь и компоненту спина, а $v_F \approx 1,35 \times 10^8$ см/с, и сравниваем с приростом энергии ВЗП на компоненту спина $\Delta\mathcal{E}_{CDW} = -\Delta^2 \rho_F$, где Δ — энергетическая щель ВЗП.

В отличие от соединений RTe_3 , в работе [49] щели Δ_1 и Δ_2 в EuTe_4 обозначают не первую и вторую ВЗП, а щель возникающую в области пересечения зон. Аналогичные щели Δ_1 наблюдались в некоторых слоистых соединениях RTe_3 , где они возникают в точке пересечения основных и свёрнутых зон [15; 39; 102]. Однако в EuTe_4 Δ_1 является результатом не пересечения основных и свёрнутых зон, а пересечения различных орбит основных зон. Таким образом, по мере

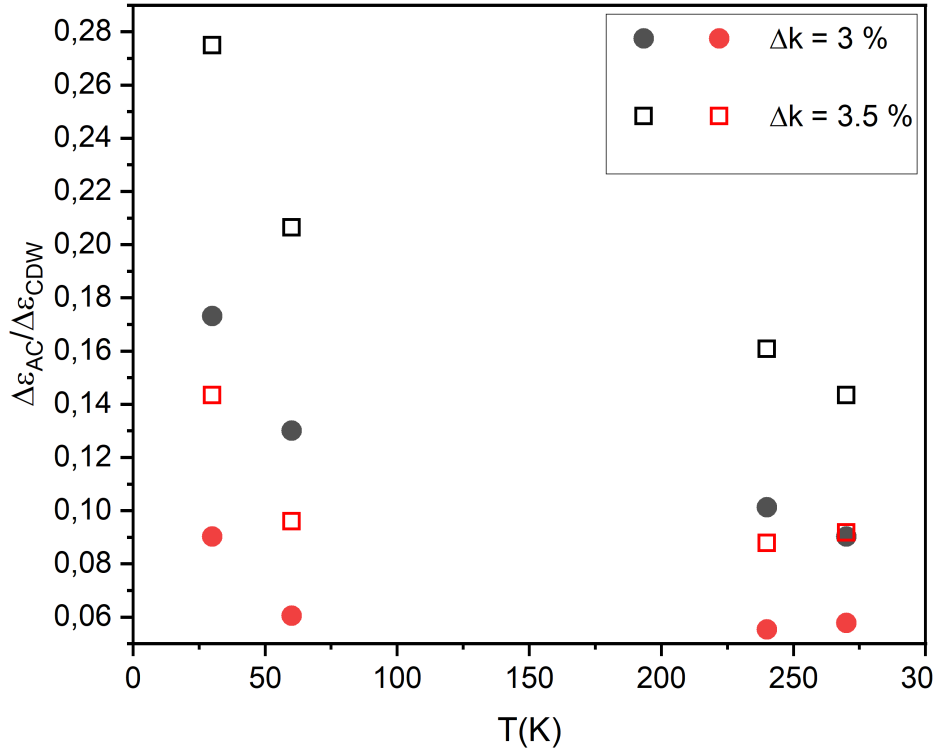


Рисунок 3.4 — $\Delta\mathcal{E}_{AC}/\Delta\mathcal{E}_{CDW}$ от T . Чёрные и красные круги/квадраты обозначают соотношения прироста энергии для минимального и максимального размера зазора соответственно.

приближения к границе трёхмерной ЗБ пересечение основных зон становится всё глубже и смешивается с $4f$ -электронным состоянием E_u , приводя к практически закрытой или неразличимой Δ_1 . Напротив, Δ_2 расположена около E_F , которую обычно называют щелью ВЗП $\Delta_2 = \Delta_{CDW}$, и демонстрирует совершенно противоположную тенденцию, показывая наибольшую величину щели вблизи границы трёхмерной ЗБ [49]. Из зависящей от импульса энергетической щели Δ_{CDW} в Ref.[49], на рис. 3.4 было рассчитано отношение выигрышей энергии от антипересечения зон и ВЗП для максимального и минимального размеров щели $\Delta\mathcal{E}_{AC}/\Delta\mathcal{E}_{CDW} = \eta^2 V_0/\Delta_{min}^2$ и $\eta^2 V_0/\Delta_{max}^2$, где дополнительный параметр $\eta = V_0 \rho_F a^2$.

Судя по отношениям выигрышей энергии, построенным для различных значений Δ_{CDW} , ВЗП значительно выгоднее энергетически даже при $T = 270$ К, и поскольку $V_0/\Delta_{CDW} \approx 1$ для максимальных размеров щелей, антипересечение зон происходит внутри гистерезиса. Следует отметить, что рис. 3.4 показывает не только необычную конкуренцию между антипересечением зон и ВЗП, но и немонотонное изменение Δ_{CDW} с температурой.

3.3 Электронная восприимчивость и аппроксимация ширины гистерезиса

Чтобы понять как антипересечение зон подавляет образование ВЗП, сравним электронную восприимчивость $\chi(Q, T)$ в двух случаях: с перестройкой электронного спектра из-за антипересечения зон и без него. Как уже было отмечено, EuTe_4 демонстрирует четко выраженное полупроводниковое поведение, а температурная зависимость электрического сопротивления подтвердила наличие ВЗП перехода при температуре T_{CDW} значительно выше комнатной [25; 47; 49]. Данные ФЭСУР для EuTe_4 в диапазоне температур от 30 до 300 К, представленные в работе [49], показывают, что щель ВЗП Δ_{CDW} остается открытой на всей ПФ при 300 К. Это также свидетельствует о том, что фазовый переход ВЗП происходит значительно выше комнатной температуры. Таким образом, в рамках температурного гистерезиса мы используем хорошо известную формулу для статической восприимчивости газа свободных электронов при конечном волновом векторе Q , $\chi(Q)$ (см. ур. (2.4)).

Фазовый переход ВЗП происходит, когда выполняется условие $\chi(Q, T)U = 1$, где константа взаимодействия U лишь незначительно зависит от атома редкоземельного элемента в соединениях RTe_3 . Используя широко применяемую дисперсию электронов в приближении СС $\varepsilon_{1,2}(k)$ для соединений RTe_3 (см. ур. (3.1)), мы вычисляем восприимчивость в ур. (2.4) как функцию волнового вектора Q и температуры T . Мы рассматриваем два сценария: один без эффекта пересечения зон, т.е. с использованием исходной дисперсии электронов $\varepsilon_{1,2}(p)$, и другой с реконструированной дисперсией, заданной уравнением (3.2). Следует отметить, что электронные состояния вблизи E_F , в основном определяются $5p$ -орбиталями атомов Te , расположенных в плоскости Te , как это было продемонстрировано в работах [25; 32; 47]. Кроме того, $4f$ -электроны Eu локализованы примерно на 1.5 эВ ниже E_F [25], что свидетельствует о том, что $5p$ -орбитали атомов Te в плоскостях Te частично заполнены и образуют электронные энергетические зоны, расположенные вблизи E_F . В отличие от этого, состояния связанные с R , обычно расположены ниже E_F и вносят незначительный вклад в формирование ВЗП.

Для изучения влияния слоев Te и Te-Te на гистерезис в EuTe_4 , а также различных комбинаций зон, пересекающих ПФ, мы используем модель, где полная

восприимчивость Линдхарда представляет собой сумму вкладов от всех трех слоев Те 1,2,3 (первый слой в двухслойной структуре Те, монослой Те и второй слой в двухслойной структуре Те соответственно) с обозначениями, как в работе [32]. Кроме того, модель включает смешанные произведения от этих слоев:

$$\begin{aligned}\chi_{total} &= \chi_{1-1} + \chi_{2-2} + \chi_{3-3} + 2(\chi_{1-3} + \chi_{1-2} + \chi_{2-3}) \\ &= \chi_{1-1} + \chi_{2-2} + \chi_{3-3} + 2(\vartheta).\end{aligned}\quad (3.5)$$

Заметим, что последний член обусловлен симметрией между слоями Те: $\chi_{1-3} = \chi_{3-1}$, $\chi_{1-2} = \chi_{2-1}$, $\chi_{2-3} = \chi_{3-2}$. Таким образом, уравнение (3.5) принимает следующий общий вид:

$$\chi(Q) = \sum_{i=1}^3 \chi_i + \sum_{i,i'}^3 \chi_i \chi_{i'}, \quad (3.6)$$

где $i \neq i'$.

Поскольку межслойная связь внутри двухслойной структуры Те настолько сильна, что оба слоя имеют одинаковую ВЗП (см. дополнительные материалы в [47]), мы предполагаем, что $\chi_{1-1} \approx \chi_{3-3}$ и $\chi_{2-1} \approx \chi_{2-3}$, что дает полную восприимчивость

$$\chi_{total} \approx 2\chi_{1-1} + \chi_{2-2} + 4\chi_{1-2} + 2\chi_{1-3}. \quad (3.7)$$

Результаты моделирования, представленные на рис. 3.5, показывают общую восприимчивость как функцию Q . Расположение пиков, как с антипересечением, так и без него, остается неизменным при изменении температуры, несмотря на изменение величины χ_{total} . Это было экспериментально подтверждено температурной зависимостью волнового вектора ВЗП в рентгеновской дифракции [47]. Пики, обозначенные как 1, 2, 3 и 4, соответствуют комбинациям $2\chi_{1-1}$, χ_{2-2} , $4\chi_{1-2}$ и $2\chi_{1-3}$ соответственно. Примечательно, что наибольшая величина χ_{total} вдоль Q наблюдается в пике 3, который происходит из группы $\{4\chi_{1-2}\}$. Относительная высота пиков может немного измениться, если учесть зависимость полного взаимодействия $V(Q)$, содержащего экранированное кулоновское и электрон-фононное, от волнового вектора Q . Расхождение полной восприимчивости на рис. 3.6a указывает на оптимальное Q_{CDW} и демонстрирует поведение, не зависящее от температуры, что экспериментально подтверждается температурной эволюцией волнового вектора ВЗП в рентгеновской дифракции [47].

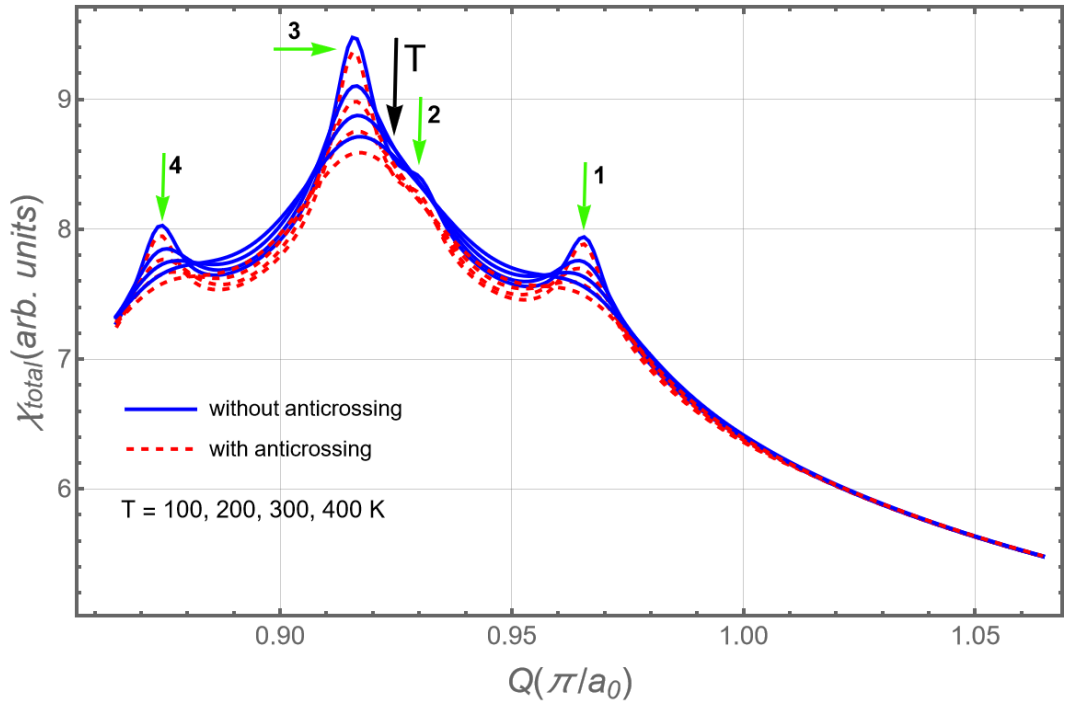


Рисунок 3.5 — Суммарная восприимчивость $\chi_{total} = \chi + \Delta\chi$ как функция волнового вектора Q без реконструкции пересечения зон (сплошная синяя линия) и с ней (пунктирная красная линия). χ_{total} была рассчитана в диапазоне температур гистерезиса, включая вклад различных комбинаций зон в $\chi(Q)$, происходящих от моно- и бислойных p -орбиталей Te .

Из уравнения (2.4) суммирование по α и α' даёт четыре члена: два внутризонных члена χ с $\alpha = \alpha'$ и два межзонных члена $\Delta\chi$ с $\alpha \neq \alpha'$. Как показано на рис. 3.6б, внутризонные «диагональные» члены, усиленные довольно хорошим вложением ПФ, значительно больше «недиагональных» межзонных членов, поскольку последние соответствуют почти перпендикулярным слоям ПФ и не имеют такого усиления вложения. Следовательно, внутризонный вклад, изображенный верхними синей и красной кривыми, демонстрирует максимум при волновом векторе ВЗП Q , что приводит к аналогичному пику в полной восприимчивости на рис. 3.6а.

Как и в соединениях RTe_3 , максимальные значения диагональных членов внутризонной восприимчивости слабо зависят от антипересечения зон, тогда как недиагональные межзонные члены подавляются вследствие реконструкции зон при антипересечении (примерно на 20%) (см. рис. 3.6б). Антипересечение зон практически не влияет на плотность состояний и свойства вложенности. Следовательно, внутризонные члены остаются почти неизменными, и лишь волновой вектор ВЗП Q слегка смещается. Напротив, после реконструкции, вы-

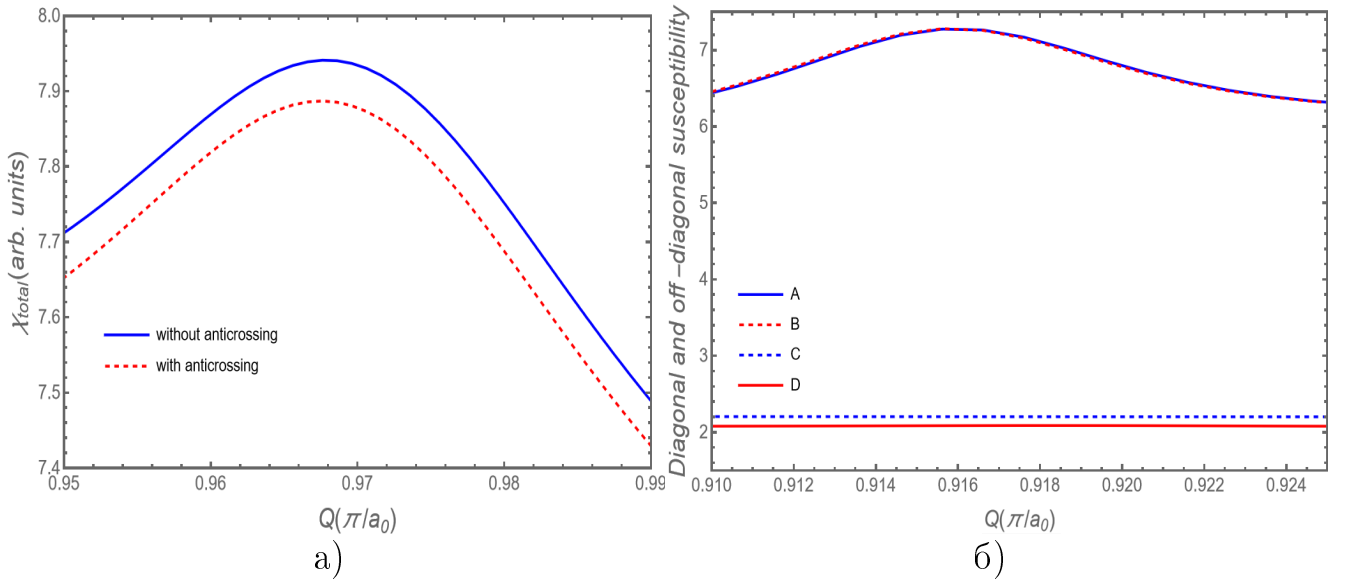


Рисунок 3.6 — (а) То же, что и на рис. (2.5), но показывающий оптимальный вектор ВЗП Q_{CDW} (пик 1 при 100 К). (б) Вклады электронной восприимчивости без реконструкции антипересечения зон (сплошные и пунктирные синие линии) и с ней (сплошные и пунктирные красные линии). Кривые А и В показывают рассчитанные «диагональные» внутрizonные вклады χ , тогда как кривые С и Д показывают «недиагональные» межзонные вклады $\Delta\chi$ в восприимчивость.

званной антипересечением зон, поверхности Ферми различных зон расходятся на величину $\Delta k \approx 3\%$ от ЗБ [7].

3.4 Интерпретация и особенности гистерезиса RTe_4

Интерпретация гистерезиса в [47] предполагает, что его основной причиной является связь между моно- и бислоями и наличие двух минимумов энергии ВЗП как функции разницы ее фазы на моно- и бислоях. Однако такая интерпретация приводит к выраженному противоречию по нескольким причинам. Во-первых, в R_2Te_5 не наблюдается гистерезисного поведения, несмотря на то, что он также состоит из монослоев и бислоев Te. Возможно, это связано с электрически нейтральной природой слоев Te в R_2Te_5 [103] и другим взаимодействием между ВЗП на разных слоях, но этого недостаточно чтобы полностью исключить сценарий возникновения гистерезиса из работы [47] также и для R_2Te_5 . Во-вторых, в работе [47] было установлено, что такой сценарий работает

в достаточно узком и специфическом наборе параметров, а именно когда (i) амплитуда первой гармоники в разложении свободной энергии по разности фаз φ ВЗП на моно- и бислоях Te зануляется и становится много меньше амплитуды второй гармоники, или (ii) взаимодействие между волнами зарядовой плотности в соседних монослоях и бислоях Te настолько слабы, что связи между более удаленными плоскостями Te определяют трехмерную конфигурацию ВЗП. В такой ситуации монослой окружён двумя соседними бислоями с противоположными фазами упорядочения ВЗП, так что полная связь между монослоем и двумя соседними бислоями становится точно равной нулю в силу симметрии. Это означает, что вклад связей между бислоем и монослоем в гистерезис должен быть минимальным. В третьих, данный механизм совсем не работает, если монослои Te отсутствуют, как в $R\text{Te}_3$. Однако, в $R\text{Te}_3$ также наблюдается значительный гистерезис электронных транспортных свойств, особенно холловской проводимости [7]. Из-за высокой металлической проводимости в $R\text{Te}_3$, возникающей из-за остаточных открытых карманов ПФ в состоянии ВЗП с неидеальным нестингом [78; 79; 104], этот гистерезис в диагональных компонентах тензора проводимости значительно слабее, чем в холловских. Тем не менее, большая величина гистерезиса в холловских компонентах сопротивления в $R\text{Te}_3$ указывает на то, что в $R\text{Te}_3$ и в $R\text{Te}_4$ природа гистерезиса может быть похожей и, соответственно, не связанной только с разностью фаз ВЗП на моно- и бислоях Te.

Хотя антипересечение зон подавляет ВЗП, как мы показали выше, этого взаимодействия может не хватить для объяснения гигантского температурного гистерезиса, наблюдаемого в EuTe_4 . Поэтому для анализа применимости нашего механизма температурного гистерезиса сопротивления, аналогичного предложенному ранее для объяснения эксперимента в $R\text{Te}_3$ [7], мы оценили величину гистерезиса в этом сценарии. На рис. 3.7 приведены вычисленные температурные зависимости полной восприимчивости χ_{total} по формуле (3.7) без и с перестройкой электронного спектра из-за антипересечения зон согласно ур. (3.2), обозначенные соответственно сплошной синей и пунктирными красной и зеленой линиями. Разница по температуре (оси абсцисс) между сплошными и пунктирными линиями дает оценку величины температурного гистерезиса, которая быстро увеличивается с увеличением $V_0 \propto \Delta k$, введенными после ур. (3.2) в нашей модели. Таким образом, значение восприимчивости $\chi_{total} = 7.65$, которого зеленая кривая достигает только при 200 К, достигается синей кривой уже при 300 К. С понижением χ_{total} разница по температуре между сплошной и

пунктирными кривыми еще больше увеличивается. Следовательно, ожидаемая ширина гистерезиса $\Delta T = T_2 - T_1 \gtrsim 100$ К согласуется с экспериментальными измерениями электрического сопротивления EuTe_4 [25; 47; 101] (см. рис. 2а в [47] или рис. 3d в [25]), дающими ширину гистерезиса ~ 100 К.

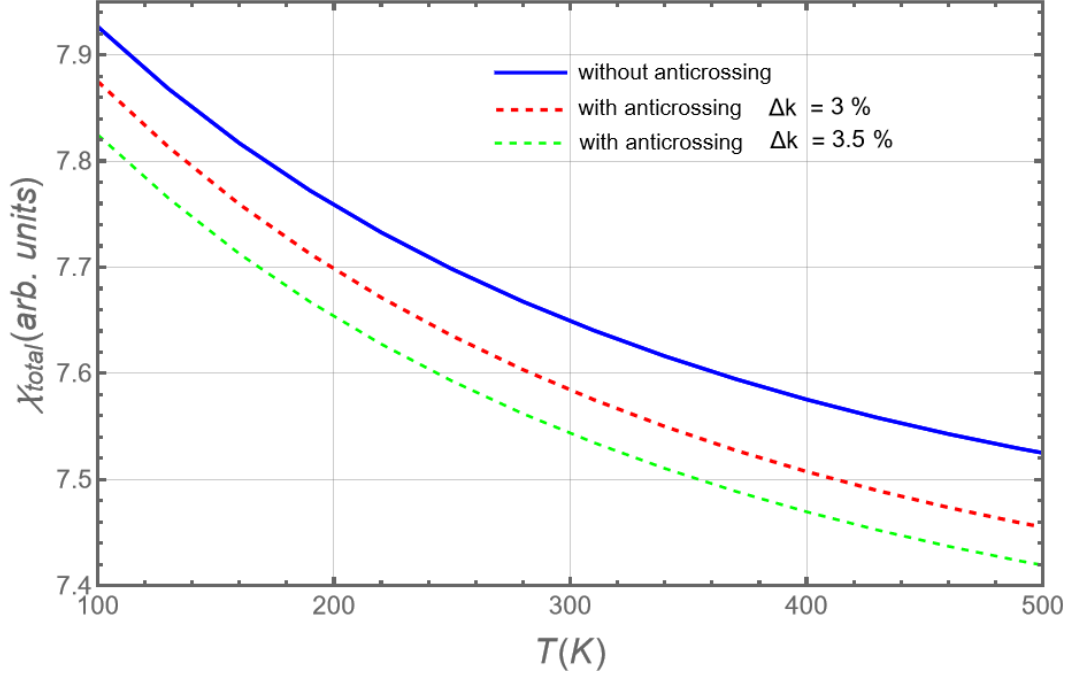


Рисунок 3.7 — Температурная зависимость суммарной восприимчивости без и с перестройкой ПФ из-за пересечения зон.

Предложенный температурный гистерезис ВЗП в соединениях с пересечением электронных зон на уровне Ферми, вероятно, можно было бы получить и из разложения Ландау для свободной энергии F с двумя взаимодействующими параметрами порядка $\Lambda_1 = \Delta_{CDW}$ и $\Lambda_2 = V_0$:

$$F = \sum_{n,m} a_{n,m} \Lambda_1^n \Lambda_2^m. \quad (3.8)$$

Действительно, как следует из общей теории [105], использующей разложение ур. (3.8) не выше четвертой степени, $n + m \leq 4$, в зависимости от коэффициентов этого разложения возможны разные фазы, когда ненулевой только один из параметров порядка или когда оба ненулевые (обе фазы сосуществуют), и разные типы переходов между этими фазами (первого или второго рода). Фазовый переход первого рода обычно сопровождается гистерезисом. В нашем случае RTe_4 ВЗП переход при понижении температуры – это переход из состояния $\Lambda_1 = 0, \Lambda_2 \neq 0$ в состояние $\Lambda_1 \neq 0, \Lambda_2 = 0$ в простейшей модели, где гибридизация p_x, p_y орбиталей Te не учитывается, или в состоянии $\Lambda_1 \neq 0, 0 < \Lambda_2 < V_0$ с

учетом гибридизации орбиталей. В широком диапазоне коэффициентов разложения для свободной энергии в ур. (3.8) этот переход первого рода [105].

Возможен набор коэффициентов $a_{n,m}$, дающих многочлен F в ур. (3.8) с несколькими минимумами, разделенными барьерами. В этом случае переход системы из одного минимума в другой обязательно будет сопровождаться гистерезисом. К сожалению, вычисление коэффициентов $a_{n,m}$ для конкретной системы – достаточно сложная задача. Для волны зарядовой плотности в квазиодномерных металлах коэффициенты разложения $a_{n,m}$ только с одним параметром порядка ($m = 0$) были вычислены [106; 107] и показано, что даже в этом случае возможен фазовый переход первого рода [106]. Приведенное выше вычисление восприимчивости на волновом векторе ВЗП может быть использовано для определения коэффициентов $a_{2,0}$ и $a_{2,2}$. Действительно, коэффициент $a_{2,0}$ при квадратичном члене параметра порядка связан с восприимчивостью $\chi(Q)$ (см., например, формулы (A10) и (A13) в [107]) и меняет знак при T_{CDW} . Примерное значение $V_0 \sim 0.6 \text{ eV}$ известно по величине отталкивания зон $\Delta k \approx 3 - 3.5\%$ или напрямую из данных ФЭСУР в EuTe_4 [49] и оно дает примерное значение параметра порядка Λ_2 . Таким образом, по вычисленной разнице значений восприимчивости $\chi(Q)$ с антипересечением зон и без него можно определить коэффициент $a_{2,2}$. Антипересечение зон мешает ВЗП, что означает $a_{2,2} > 0$. Однако другие коэффициенты $a_{n,m}$ требуют дальнейших вычислений, что выходит за рамки данного письма.

Большой температурный гистерезис удельного сопротивления для семейства RTe_4 можно было бы предсказать как результат предполагаемого взаимодействия между нестабильностями пересечения зон и ВЗП по аналогии с RTe_3 [7; 54]. Однако в RTe_4 это взаимодействие оказалось более сложным из-за дополнительного монослоя в RTe_4 , что приводит к образованию зон, возникающих из моно- и двухслойных p -орбиталей Te , которые пересекают уровень Ферми. Согласно нашим расчетам, значительный вклад в гистерезис вносит член $4\chi_{1-2}$ в ур. (3.7), возникающий в результате комбинации моно- и двухслойных зон, что приводит к большей величине χ (см. рис. 3.5). Следует отметить, что взаимодействие между ВЗП на разных слоях было проанализировано без учета вклада множественных волновых векторов упорядочения ВЗП вдоль трех кристаллографических осей EuTe_4 [108; 109] и метастабильных состояний, которые могли бы дополнительно повлиять на необычный гистерезис, как описано в

работе [108]; однако ожидается, что основные особенности предложенной нами модели останутся в силе.

3.5 Заключение главы

В данной главе исследованы особенности температурного гистерезиса в тетрателлуридах редкоземельных элементов $R\text{Te}_4$ и проанализирована роль теллуридных слоёв в формировании данного необычного явления для физики конденсированного состояния. Показано, что в отличие от трителлуридов, системы $R\text{Te}_4$ демонстрируют более сложное поведение, связанное с наличием как моно-, так и бислойных теллуридных плоскостей, обладающих различными электронными свойствами.

Установлено, что аномальный температурный гистерезис в $R\text{Te}_4$ обусловлен взаимодействием различных электронных подсистем, связанных с разными типами слоёв Te . Показано, что вклад этих слоёв приводит к формированию метастабильных состояний и расширению температурной ширины гистерезиса. При этом существенную роль играет реконструкция поверхности Ферми, сопровождающаяся перераспределением электронной плотности и изменением характера проводимости.

Проанализирована электронная восприимчивость системы и показано, что её особенности могут быть использованы для качественного описания ширины гистерезиса. Полученные результаты указывают на важность учёта комбинированного вклада различных орбитальных состояний слоёв Te , а также их роль во взаимодействии электронных нестабильностей в системах $R\text{Te}_4$.

Показано, что хорошее согласие с экспериментальными данными достигается при учёте совместного влияния моно- и бислойных теллуридных плоскостей на формирование состояния волны зарядовой плотности. Это подтверждает, что гистерезис в $R\text{Te}_4$ имеет сложную природу и не может быть объяснён в рамках простых моделей с одной электронной подсистемой.

Таким образом, установлено, что тетрателлуриды редкоземельных элементов представляют собой уникальную платформу для изучения электронных нестабильностей, и конкуренции различных электронных упорядочений. Полученные результаты расширяют понимание механизмов формирования ги-

стерезиса в системах с волнами зарядовой плотности и создают основу для дальнейшего исследования взаимосвязи между электронной структурой и коллективными явлениями в квазидвумерных материалах.

Глава 4. Анализ электронной структуры $R\text{Te}_3$ в состоянии ВЗП

4.1 О методе ФЭСУР и его недостатке применительно к состоянию с ВЗП в $R\text{Te}_3$

За последние два десятилетия метод ФЭСУР элегантно продемонстрировал влияние образования волн зарядовой плотности на электронную структуру, предлагая более прямые данные, чем многие другие экспериментальные методы [15; 39; 56]. Измерения ФЭСУР уникальным образом позволяют напрямую измерять динамику носителей заряда, предоставляя информацию об энергии и импульсе электронов проводимости [110–112]. Недавние достижения в методах ФЭСУР включают вакуумную ультрафиолетовую, мягкую рентгеновскую и спин-разрешенную ФЭСУР [113]. Следовательно, высокая частота повторения, регулируемая длина волны накачки, высокая энергия и высокое временное разрешение делают ФЭСУР особенно подходящим для исследования широкого спектра квантовых материалов [114]. Несмотря на значительные преимущества, ФЭСУР — чрезвычайно чувствительный и сложный в экспериментальном применении метод. Внешние поля могут легко исказить траекторию испускаемых электронов, ограничивая возможности исследования определенных электронных функций отклика. Поверхностная чувствительность ФЭСУР является преимуществом для исследования поверхностных состояний в таких материалах, как топологические изоляторы и вейлевские полуметаллы. Однако эксперименты ФЭСУР требуют атомарно чистых и хорошо упорядоченных плоских поверхностей [113], обычно достигаемых путем раскалывания образцов в сверхвысоком вакууме (даже ниже 5×10^{-11} Торр). Эта поверхностная чувствительность делает ФЭСУР особенно подходящим для квазидвумерных слоистых материалов $R\text{Te}_3$. Несмотря на преимущества ФЭСУР, следует отметить, что измерение магнитных квантовых осцилляций [115–117] остается наиболее точным экспериментальным методом изучения электронных свойств двумерных соединений, поскольку оно дает информацию о геометрии поверхности Ферми, эффективной массе, среднем времени свободного пробега и g-факторе носителей заряда [115–117]. ФЭСУР и МКО являются основными методами, позволяющими эффективно визуализировать фазовое пространство

энергии-импульса электронов, и часто дополняют друг друга. Однако их результаты не всегда совпадают, и эксперименты на двумерных соединениях часто выявляют несоответствия между данными МКО и ФЭСУР.

Разрешение ФЭСУР часто недостаточно для изучения реконструкции поверхности Ферми электронными фазовыми переходами. Это может быть причиной очевидного расхождения между данными ФЭСУР и МКО. Края поверхности Ферми в ФЭСУР обычно плохо определены, что приводит к плохо охарактеризованным электронным карманам в $R\text{Te}_3$, которые демонстрируют зоны как высокой, так и низкой спектральной интенсивности, как показано в работе [56]. После второго перехода ВЗП оставшиеся карманы становятся еще меньше из-за появления щели в спектре из-за второй ВЗП, что затрудняет получение количественных результатов, сопоставимых с результатами измерений МКО. В работе [55] была предпринята попытка определить размер электронных карманов при $T < T_{\text{CDW}2}$ путем построения контура поверхности Ферми и применения метода Монте-Карло к результатам ФЭСУР из работы [56]. Однако полученная площадь оказалась далека от значений, полученных из спектра частот квантовых колебаний, описанного в работе [55].

Цель данной главы состоит в пересмотре существующих экспериментальных данных ФЭСУР и МКО для редкоземельных трителлуридов, а также в достижении согласованности между ними посредством применения усовершенствованных методов обработки изображений (см. приложение Д), полученных методом ФЭСУР. Улучшение визуализации и выделение областей интереса на ФЭСУР-изображениях имеет решающее значение для сопоставления этих данных с результатами МКО. Поскольку значимость обработки изображений в контексте ФЭСУР обусловлена прежде всего особенностями зрительного восприятия, сегментация изображений является важным, сложным и фундаментальным методом обработки визуальных данных. Данный метод позволяет разделить изображение на множество непересекающихся областей, элементы которых связаны между собой и обладают схожими характеристиками — такими как цвет, яркость, текстура и непрерывность границ. Таким образом, для сопоставления результатов ФЭСУР и МКО оценка размеров остаточных карманов, возникающих вследствие формирования волны зарядовой плотности, выполняется с использованием более точных методов обработки изображений, в частности метода сегментации из библиотеки OpenCV [118]. Эта библиотека является широко используемым инструментом анализа, классификации и обра-

ботки изображений и поддерживается в таких языках программирования, как C++, Python и Java.

4.2 Определение размеров остаточных электронных карманов по данным ФЭСУР

Как было отмечено в главе 1.2, волны зарядовой плотности представляют собой электронные неустойчивости, часто наблюдаемые в низкоразмерных материалах с сильно анизотропной электронной структурой. Несовременный нестинг ПФ в RTe_3 приводит к образованию участков ПФ с частично открытыми щелями и остаточными металлическими карманами ниже температуры $T_{\text{CDW}2}$, которые плохо определяются методом ФЭСУР.

Для повышения качества изображений ПФ, полученных методом ФЭСУР в работе [56], данные для RTe_3 были подвергнуты дополнительной обработке изображений (см. рис. 4.1). Сначала был применён метод нелокального шумоподавления из библиотеки `scikit-image`, который сглаживает изображение, заменяя значение целевого пикселя усреднённым значением набора окружающих пикселей. Это приводит к более чёткому выделению областей с высокой и низкой спектральной интенсивностью на результирующем изображении ПФ.

Результаты ФЭСУР без шума лучше подчеркивают более слабые особенности вблизи E_F , предоставляя важные детали для индуцированной ПФ, возникающей в результате обеих ВЗП. Чтобы понять влияние векторов ВЗП на величину спектральных весов, используется подход среднего поля [15]

$$|\psi_k\rangle = u_{k-Q_{\text{CDW}}}|k - Q_{\text{CDW}}\rangle + u_k|k\rangle + u_{k+Q_{\text{CDW}}}|k + Q_{\text{CDW}}\rangle, \quad (4.1)$$

где $|\psi_k\rangle$ — суперпозиция исходных состояний. Здесь собственные значения определяют новую электронную дисперсию, спектральный вес которой $|u_k|^2$ переносится в точки $\pm Q_{\text{CDW}}$. Эффект включения второй перпендикулярной волны зарядовой плотности ВЗП₂ и трансляции зон на $Q_{\text{CDW}2}$ подробно описан в дополнительных материалах [55]. Кроме того, в работе [55] площади электронных карманов были оценены путём картирования поверхности Ферми и использования модели СС. Однако точное определение размеров электронных карманов было ограничено из-за отсутствия фильтров (см. приложение

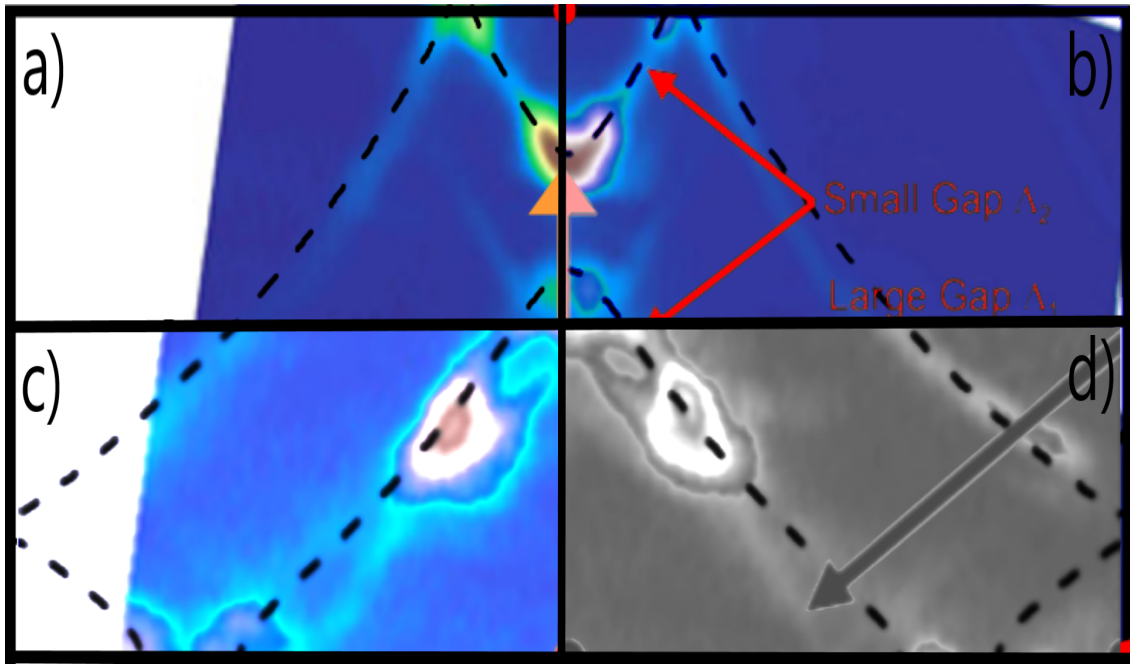


Рисунок 4.1 — Обработка изображений результатов ФЭСУР ErTe_3 ниже второго перехода ВЗП при $T = 10$ К из [56]. (a) Изображение без обработки. (b) Отфильтрованное изображение. (c) Контрастное изображение. (d) Изображение в оттенках серого. Для лучшей визуализации поверхности Ферми ниже $T_{\text{CDW}2}$ на рис. 1 (a, b) и рис. 2 (c, d) из [56] объединены и показаны здесь с различной обработкой изображений.

Е), позволяющих более точно определить границы оставшихся электронных карманов (области высокой спектральной интенсивности во внутренней части ПФ). Чтобы решить эту проблему, мы применили медианный фильтр из пакета `scipy.ndimage` (см. рис. 4.1(b)), после чего увеличили контрастность изображения (см. рис. 4.1(c)).

Как показано на рис. 4.1, обработка результатов ФЭСУР позволяет чётко разделить области высокой и низкой спектральной интенсивности, что обеспечивает более точное определение электронных карманов. Следует также отметить, что ширина областей высокой спектральной интенсивности во внутренней части поверхности Ферми сопоставима с шириной областей, близких к перекрытию между основными и затенёнными зонами HoTe_3 при $T < T_{\text{CDW}1}$, наблюдаемыми с использованием высокоразрешающей лазерной ФЭСУР [119].

После выделения областей высокой и низкой спектральной интенсивности в пределах поверхности Ферми изображение преобразуется в представление в оттенках серого (см. рис. 4.1(d) и рис. 4.2, вставка), что облегчает применение пороговой сегментации (см. приложение Ж), представленной на рис. 4.3.

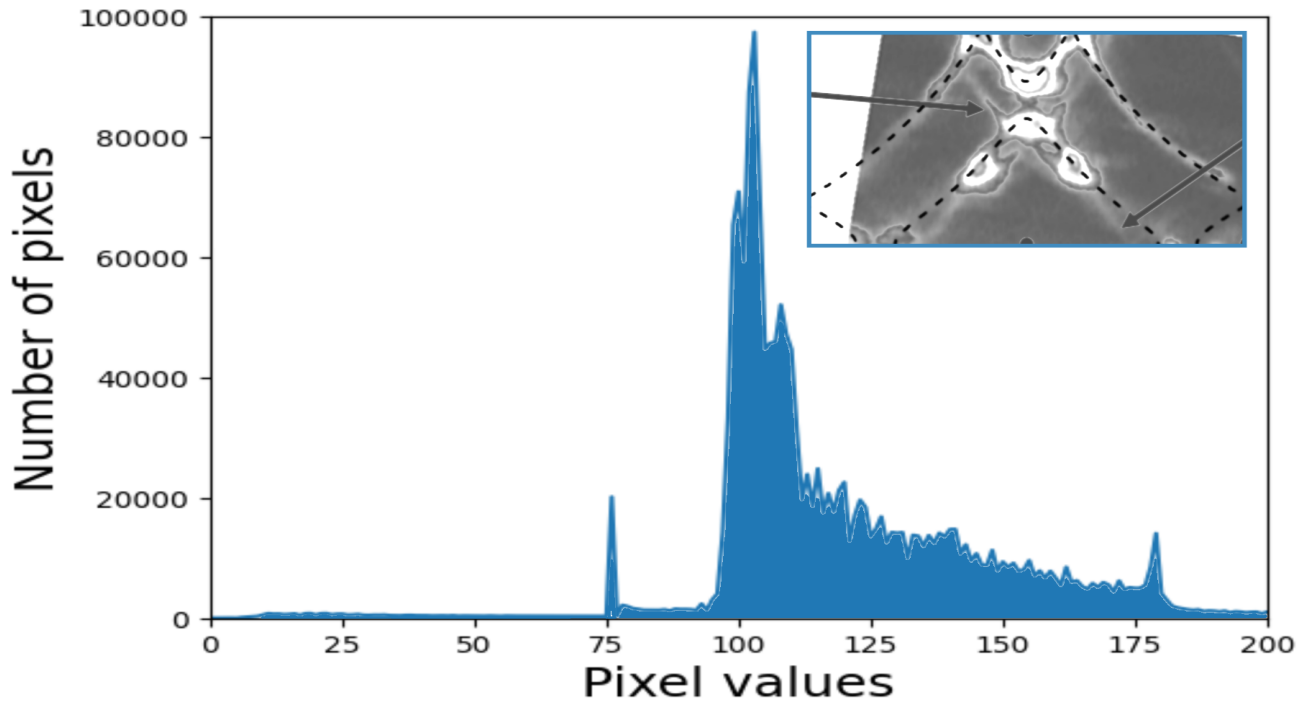


Рисунок 4.2 — Плотность пикселей в полутоновом изображении.

Плотность пикселей в изображении в оттенках серого показана на рис. 4.2, где значения пикселей варьируются от 0 до 255. Таким образом, каждый пиксель содержит информацию об интенсивности, принимая значение в диапазоне от 0 до 255. Подробности приведены в приложении Е. При выполнении пороговой обработки значение каждого пикселя сравнивается с заранее заданным порогом. Если значение пикселя ниже порогового, ему присваивается значение 0; в противном случае оно устанавливается равным максимальному значению (обычно 255).

После разделения объектов, рассматриваемых как передний план, и фонового изображения мы определяем два основных размера карманов на поверхности Ферми, как показано на рис. 4.3.

Реконструированная поверхность Ферми при $T < T_{CDW}$, полученная с использованием модели СС, изображена на рис. 4.3. Затем эти результаты сопоставляются с результатами, полученными с помощью медианного фильтра и пороговой обработки изображений (рис. 4.1(b) и рис. 4.3(a) соответственно). Примечательно, что пороговая обработка позволяет нам идентифицировать более высокие спектральные интенсивности на поверхности Ферми, первоначально предполагая меньшие электронные карманы по сравнению с теми, которые подробно описаны в работе [55]. Для количественной оценки ЗБ покрыта $n = 10^6$ черными точками (исключая области карманов, выделенные красным

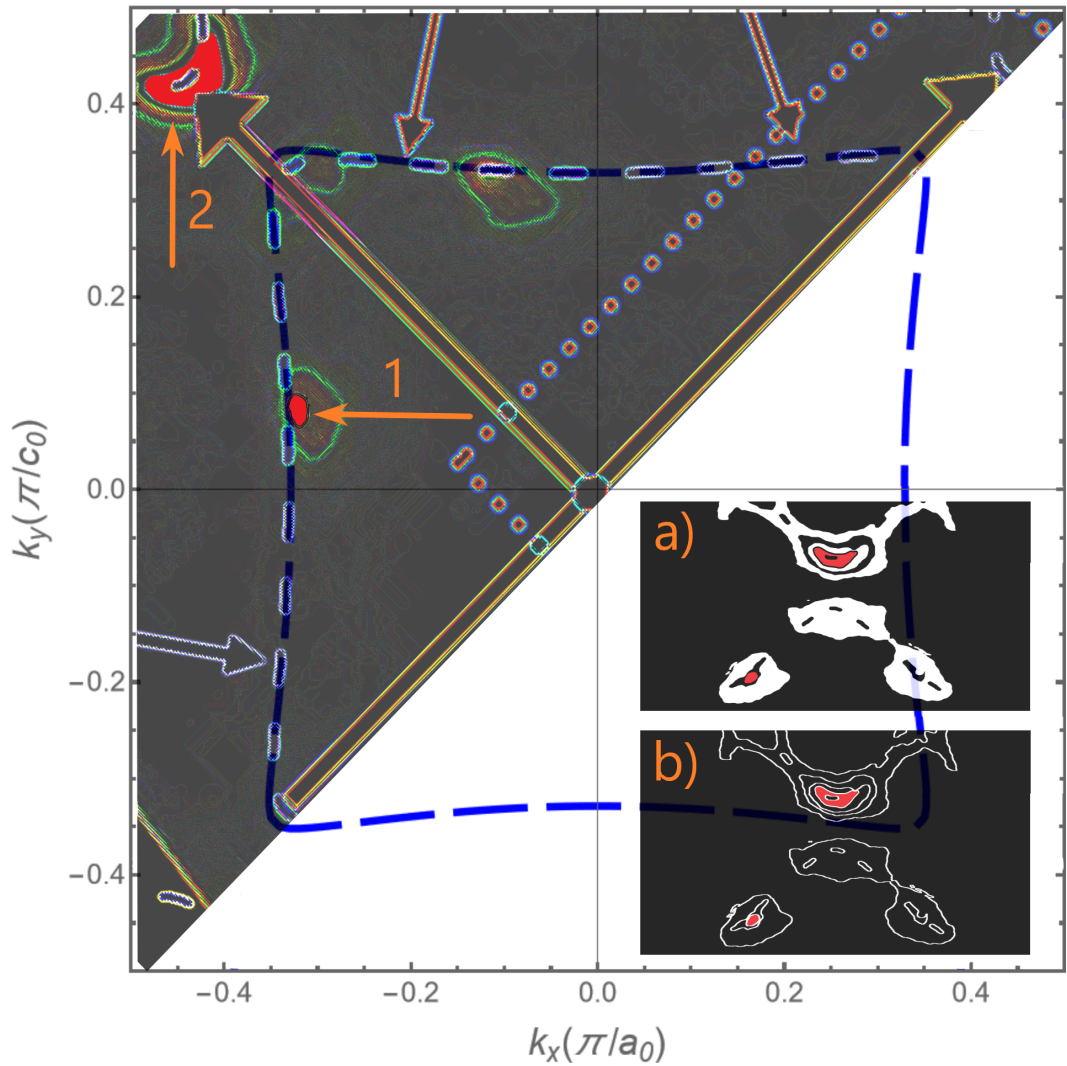


Рисунок 4.3 — Сегментация результатов ФЭСУР для EgTe_3 ниже второго перехода ВЗП $T < T_{\text{CDW}2}$ из ссылки [56]. (a) Пороговая обработка изображения. (b) Морфологический градиент изображения. Оба метода можно найти в библиотеке OpenCV. Красные области 2 и 1 представляют собой электронные карманы в реконструированных поверхностях Ферми из рис. 1 и рис. 2 работы [56] соответственно. Синие пунктирные линии представляют собой реконструированную межплоскостную плоскость Ферми. Параметры, описывающие дисперсию в модели СС, можно найти в [48]. $a_0 \approx c_0$ — это двумерная постоянная решетки, величина которой $\sqrt{2}$ меньше, чем постоянная решетки в плоскости трехмерной элементарной ячейки.

цветом), после чего вычисляется отношение покрытых пикселей. Это дает приблизительную площадь электронных карманов: $A_{p1} \approx 0.057\%$ и $A_{p2} \approx 0.3\%$ площади зоны Бриллюэна. Сравнение этих размеров карманов с предыдущими результатами показывает, что полученные значения соответствуют доминирующему карману $\alpha = 0.2\%$ [57], причем A_{p1} очень близко приближается к

площади кармана, полученной из спектра частот квантовых осцилляций в работе [55]. Стоит отметить, что приблизительный размер карманов демонстрирует наибольшее спектральное распределение электронных состояний, которое пропорционально интенсивности фотоэмиссии, когда соответствующие состояния заняты [56; 119; 120]. Следовательно, оставшиеся области карманов, обозначенные зелёными линиями на рис. 4.3 не учитываются. Например, оставшаяся площадь кармана 1 составляет $A_{p1\ total} - A_{p1} \approx 0.29\ \%$.

4.3 Определение частотного диапазона остаточных карманов в диапазоне медленных осцилляций $f < 20$ Тл

Мы сравниваем результаты нашего анализа изображений поверхности Ферми с измерениями МКО, поскольку МКО являются мощным инструментом для изучения электронных свойств и получения информации о поверхности Ферми двумерных систем. Недавнее обнаружение медленных осцилляций в соединениях $R\text{Te}_3$ привело к обсуждению их возможного происхождения. Наличие этих низкочастотных осцилляций объясняется либо расщеплением электронного спектра в двухслойной структуре, либо реконструкцией поверхности Ферми, вызванной волнами зарядовой плотности [55]. Однако отсутствие прямых измерений размеров остаточных карманов в ФЭСУР затрудняет возможную идентификацию медленных осцилляций, возникающих вследствие формирования ВЗП.

Быстрое преобразование Фурье (БПФ) является эффективным инструментом для анализа медленных осцилляций в соединениях $R\text{Te}_3$, позволяя выявить две основные гармоники вблизи $f_1 = < 10$ Тл и $f_2 = 10 - 20$ Тл. Таким образом, площади соответствующих сечений поверхности Ферми для этих гармоник могут быть определены с использованием соотношения Онсагера:

$$f = \left(\frac{\varphi_0}{2\pi^2} \right) A_H \quad (4.2)$$

где $\varphi_0 = hc/2e = 2,07 \times 10^{-15}$ Т·м² — квант потока, а A_H — площадь поперечного сечения поверхности Ферми, перпендикулярная приложенному полю [116]. Соответствующие площади поверхности Ферми показаны на рис. 4.4, где наличие двух гармоник в БПФ соединений $R\text{Te}_3$ с более тяжелыми ионами

редкоземельных элементов ($R = \text{Ho}, \text{Er}, \text{Tm}, \text{Tb}$) поднимает вопрос о том, принадлежит ли одна из них к области электронного кармана от волны зарядовой плотности.

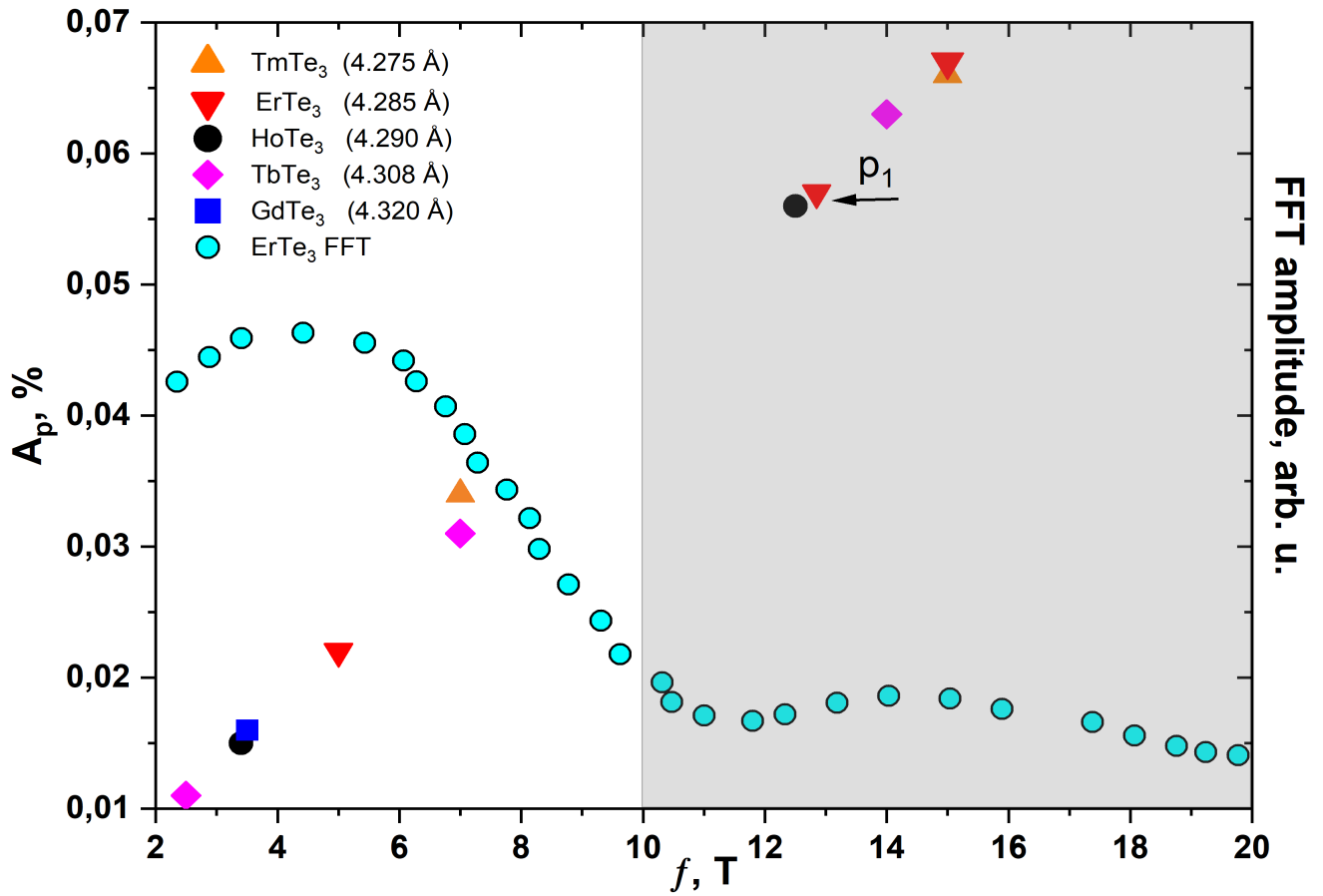


Рисунок 4.4 — Области, полученные из медленных осцилляций и ФЭСУР. TmTe_3 [37; 58], ErTe_3 [37], HoTe_3 [55], TbTe_3 [121], GdTe_3 [121]. p_1 обозначает карман 1 на рис. 4.3. Параметры решетки a при 300 К в скобках можно найти в [23]. В работе [37] сравнивается спектр частот квантовых осцилляций для $B < B_0$ (поле магнитного пробоя) в ErTe_3 с двумя волнами зарядовой плотности с другими соединениями RTe_3 .

Как показано на рис. 4.4, как тяжёлые, так и лёгкие соединения RTe_3 демонстрируют гармонику с частотой $f < 10$ Тл. Следовательно, эту гармонику нельзя отнести к образованию остаточных карманов, возникающих вследствие второго состояния волны зарядовой плотности ВЗП_2 , учитывая, что GdTe_3 не претерпевает второго перехода ВЗП при более низкой температуре $T_{\text{CDW}2}$.

Несмотря на то, что второй переход ВЗП в TbTe_3 был описан около десяти лет назад на основе высокоразрешающих измерений синхротронной рентгеновской дифракции ниже $T_{\text{CDW}2} = 41$ К [50], наличие второго перехода ВЗП в

GdTe₃ остаётся невыясненным. Это наблюдение подтверждает гипотезу о том, что осцилляции с частотами $f < 10$ Тл связаны с двухслойной структурой RTe₃ [55]. Аналогичный вопрос о происхождении медленных магнитных осцилляций также возникает в купратах [61; 68; 69; 122]. Напротив, частоты МКО в диапазоне $f_1 = 10 - 20$ Тл тесно совпадают с областью A_{p1} , определённой методом ФЭСУР. Это не только облегчает идентификацию частотных областей, соответствующих остаточным карманам, но и помогает оценить природу МКО в соединениях RTe₃.

Ожидаемая температурная зависимость размера кармана при температурах ниже 50 К представляет собой сложную задачу для точного измерения методом ФЭСУР. Согласно соотношению Онсагера, предсказанное изменение площади кармана ΔA составляет приблизительно 0.044% в диапазоне частот $f_2 = 10$ Тл и $f_2 = 20$ Тл. Тем не менее, диапазон второй гармоники f_2 согласуется с нашими результатами, поскольку оценочная площадь остаточных карманов была получена из ФЭСУР-измерений при 10 К. В отличие от f_1 , амплитуда второй гармоники f_2 демонстрирует выраженную температурную зависимость [55].

Наличие двух гармоник в магнитных полях ниже 4 Тл указывает на возможное сосуществование двух механизмов: реконструкции поверхности Ферми, вызванной волнами зарядовой плотности, и расщепления электронного спектра бислоя. Это может объяснить сублинейный режим магнитосопротивления, наблюдаемый в полях до 4 Тл [29; 55], где носители заряда рассеиваются вблизи «горячих точек» — областей ПФ, связанных между собой переносом на вектор ВЗП. Кроме того, учитывая малый размер кармана p_1 , соответствующая гармоника может перекрываться либо с f_1 , либо с f_2 .

Отсутствие сдвига частоты вплоть до 50 К позволяет исключить гармоники, возникающие из МКО в TmTe₃ [58] и HoTe₃ [55]. Согласно третьему аргументу, представленному в работе [121], происхождение медленных осцилляций, вероятно, связано с межслойным перескоком, а не с крайне малыми карманами на поверхности Ферми. Действительно, наличие малых интегралов перескока указывает на более тонкое расщепление зонной структуры, обусловленное слоистой природой соединений RTe₃ [55]. Кроме того, измерения МКО для TmTe₃ [58] и ErTe₃ [37] при одной и той же частоте $f_2 = 15$ Тл дают малые эффективные массы $m^*/m_e = 0.033$ и $m^*/m_e = 0.097$ соответственно. Различие в эффективных массах является существенным, и первоначально предполагалось, что как низкая частота, так и чрезвычайно малая эффективная масса

указывают на существование малых карманов на ПФ с очень лёгкими носителями заряда [58]. Кроме того, гармоника f_2 также наблюдается в CeTe_3 [123], где она связана со второй температурой магнитного перехода T_{N2} , соответствующего переходу в состояние волны спиновой плотности и образованию тяжёлых квазичастиц [124]. Эти противоречивые результаты подчёркивают сложное фазовое поведение в данном частотном диапазоне.

4.4 Определение частотного диапазона остаточных карманов в диапазоне медленных осцилляций $f = 20 - 120$ Тл

На рис. 4.5 показан второй набор карманов, наблюдаемых при значениях магнитного поля ниже поля магнитного пробоя B_0 в состоянии двойной ВЗП. Точное определение площадей карманов, возникающих вследствие ВЗП, представляет собой сложную задачу, поскольку различные гармоники могут перекрываться с интересующим карманом, а экспериментальные данные, как правило, демонстрируют значительную дисперсию в области низких частот. Кроме того, многие расщеплённые частоты не удаётся надёжно разделить по отдельности; следовательно, приведённые значения, вероятно, представляют собой усреднённую оценку, как подробно обсуждается в [37].

Таким образом, частотный спектр можно разделить на четыре области на основе плотности гармоник МКО. Расчётный размер кармана по данным ФЭС-УР соответствует частотному диапазону 43–80 Тл, и, в отличие от кармана p_1 , карман p_2 сохраняется даже при температуре 100 К [119]. Кроме того, некоторые остаточные карманы не были учтены из-за плохо определённых областей высокой спектральной интенсивности вблизи антипересечения. Эмпирические данные [15; 39; 119] указывают на то, что карманы вблизи антипересечения формируются вследствие первичной волны зарядовой плотности ВЗП₁. В результате как лёгкие, так и тяжёлые соединения RTe_3 сохраняют металлические свойства из-за неидеального нестинга поверхности Ферми.

Наши результаты позволяют определить размер кармана X [57; 89] после перехода ВЗП₂, который ранее был идентифицирован как источник частоты β [37; 57; 89]. Учитывая отсутствие экспериментальных свидетельств увеличения эффективной массы, связанного с гармониками α , β и δ вблизи второго

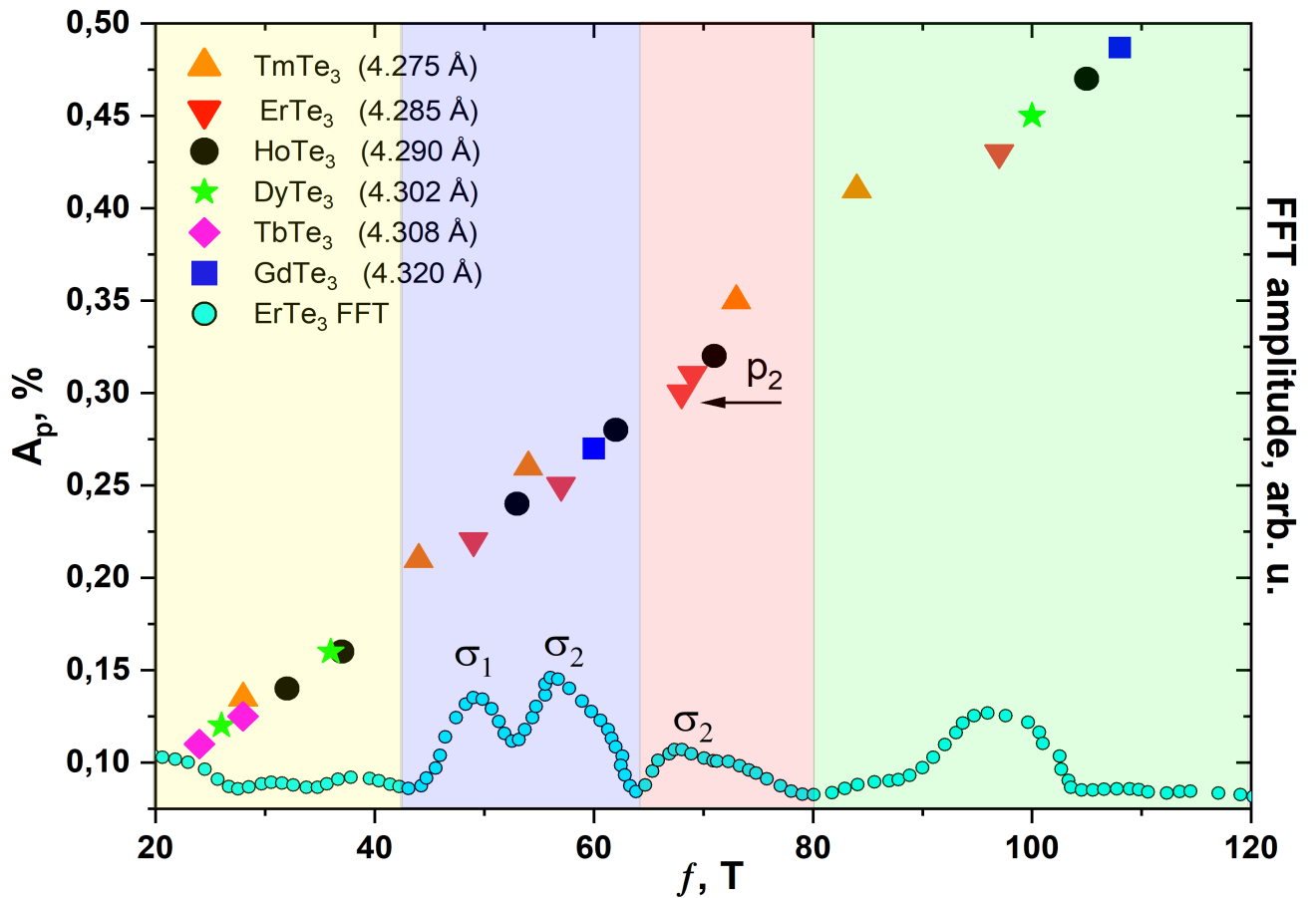


Рисунок 4.5 — Площади, полученные из спектра частот квантовых осцилляций в состоянии двойной ВЗП [37], сопоставлены с результатами ФЭСУР. Карман p_2 соответствует карману 2, представленному на рис. 4.3. Значения параметра решётки a при температуре 300 К (указанные в скобках) приведены в [23].

фазового перехода ВЗП [37], природа наблюдаемого эффекта увеличения массы остаётся неясной.

Как показано на рис. 4.6, пики, обозначенные как σ_{1-3} , характерные для соединений RTe_3 , претерпевающих второй переход ВЗП, наблюдаются в области, где была оценена площадь кармана p_2 . Примечательно, что гармоники σ обнаруживаются в МКО диагонального магнитосопротивления, но отсутствуют в МКО холловского сопротивления [58]. Более того, рис. 4.6 указывает на увеличение эффективной массы в ErTe_3 , что подчёркивает необходимость проведения дополнительных расчётов эффективной массы для других соединений, демонстрирующих второй переход ВЗП, с целью проверки наличия её увеличения вблизи квантового фазового перехода между состояниями с одинарной и двойной ВЗП.

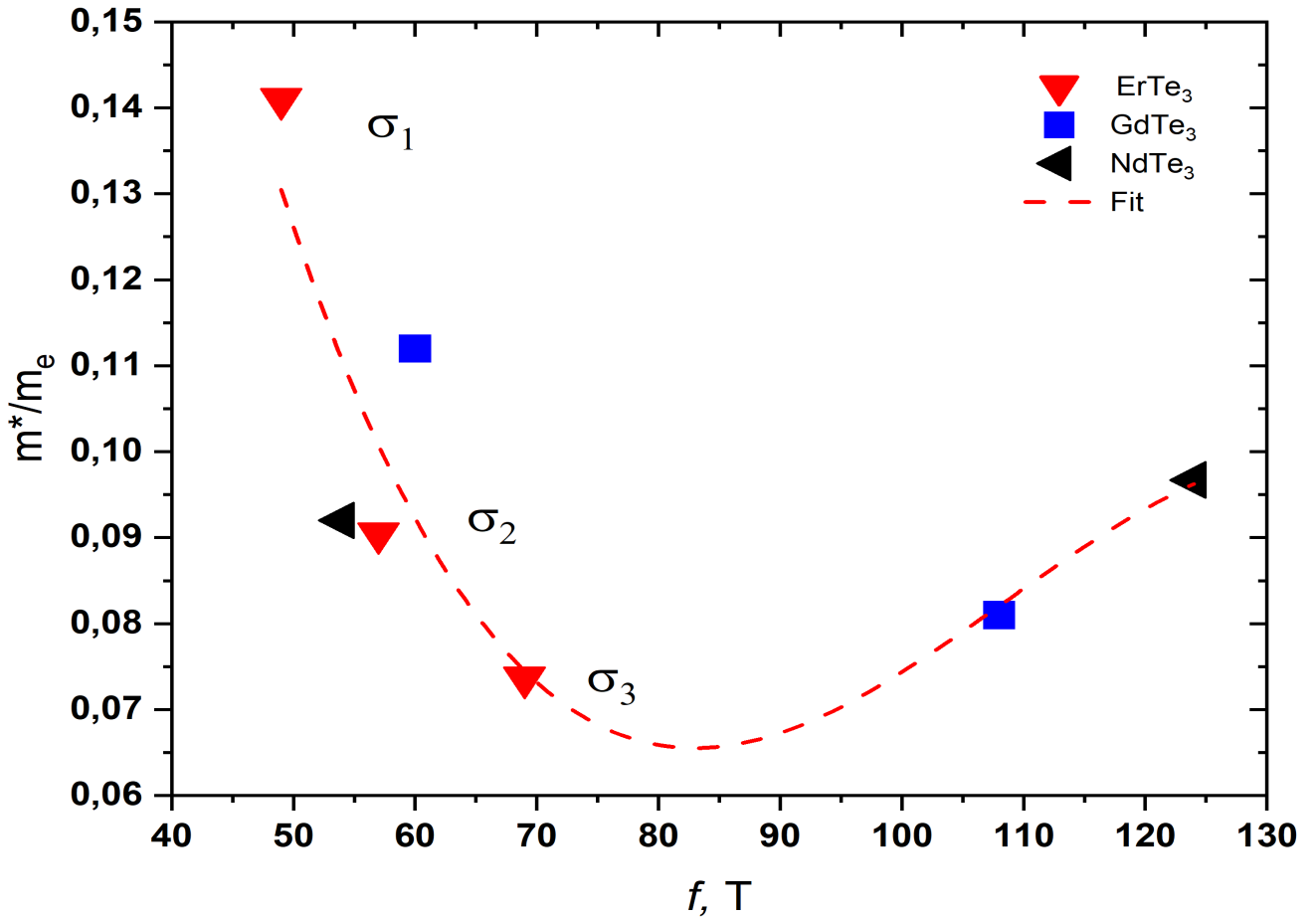


Рисунок 4.6 — Эффективные массы, построенные как функция частоты медленных квантовых осцилляций. Данные получены из [37].

Как показано на рис. 4.5, гармоники меньшей интенсивности сохраняются даже после перехода ВЗП₂. Это поднимает вопрос о наличии скрытых областей поверхности Ферми, не выявляемых методом ФЭСУР. Недавние исследования с использованием спектроскопической сканирующей туннельной микроскопии выявили скрытые множественные теньевые зоны в $CeTe_3$, которые могут приводить к дополнительным нестабильностям поверхности Ферми [125]. Более того, несмотря на пониженную интенсивность теньевых зон в ФЭСУР, интерференционная микроскопия квазичастиц демонстрирует их заметное влияние на электронные состояния [125], что указывает на возможное существование остаточных областей, связанных с дополнительными частотами.

Для определения влияния магнитной фазы на данные квантовых осцилляций были выполнены преобразования Фурье как внутри, так и вне магнитной фазы в [37]. Полученные частотные спектры продемонстрировали заметное сходство, что указывает на ограниченное влияние магнитной фазы. Это в

первую очередь объясняется тем, что магнитный блок RTe содержит 4f-дальний антиферромагнетизм при низких температурах [43; 126; 127].

Для более точного анализа квантовых осцилляций в квазидвумерных системах необходимо учитывать особенности двумерной электронной структуры, в частности условия фиксированной плотности электронов. В работе [71] предложено аналитическое описание эффекта де Гааза–ван Альфена в двумерных металлах при произвольной форме уровней Ландау, что позволяет более корректно интерпретировать экспериментальные данные.

4.5 Заключение главы

В данной главе проведён анализ электронной структуры трителлуридов редкоземельных элементов RTe₃ в состоянии волны зарядовой плотности с использованием данных фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением и магнитных квантовых осцилляций. Особое внимание уделено проблеме определения размеров остаточных электронных карманов и их связи с наблюдаемыми медленными осцилляциями.

Показано, что в состоянии ВЗП реконструкция поверхности Ферми приводит к формированию малых остаточных карманов, которые сохраняются вследствие несовершенного нестинга. Однако стандартные методы анализа ФЭСУР оказываются недостаточно точными для их однозначного определения из-за ограниченного разрешения и размытости границ поверхности Ферми.

В связи с этим предложен метод обработки данных ФЭСУР, основанный на анализе изображений, позволяющий более точно определять размеры и частотный диапазон остаточных электронных карманов. Полученные результаты демонстрируют улучшенное согласие с данными магнитных квантовых осцилляций, особенно в области низких частот, соответствующих медленным осцилляциям.

Показано, что наблюдаемые гармоники в спектре квантовых осцилляций могут быть объяснены наличием нескольких типов остаточных карманов, возникающих в результате сложной реконструкции поверхности Ферми после второго перехода ВЗП. При этом отсутствие существенного увеличения эффективной массы носителей заряда вблизи квантовой критической точки указывает на

нетривиальную природу электронных состояний в данной области фазовой диаграммы.

Наш анализ показывает, что медленные осцилляции демонстрируют частоты, соответствующие примерно 0.5% зоны Бриллюэна. Точное сопоставление каждой частоты с рассчитанными размерами карманов затруднено из-за ограниченных размеров остаточных карманов после перехода ВЗП₂ и возможного перекрытия с дополнительными гармониками.

Таким образом, в главе продемонстрировано, что комплексное использование методов ФЭСУР и магнитных квантовых осцилляций в сочетании с новыми подходами к обработке данных позволяет существенно продвинуться в понимании электронной структуры систем RTe₃ в состоянии ВЗП. Предложенный метод может быть применён к широкому классу квазидвумерных материалов и представляет интерес для дальнейших исследований реконструкции поверхности Ферми и коллективных электронных явлений, для которых доступны данные ФЭСУР и МКО. Особенно полезен этот подход для систем с волной зарядовой плотности или антиферромагнитным порядком при конечном волновом векторе Q , где перестройка поверхности Ферми, вызванная рассеянием электронов на Q , приводит к образованию небольших карманов. Это актуально не только для исследованных трителлуридов редкоземельных элементов, но и для высокотемпературных купратных и железосодержащих сверхпроводников, органических металлов и других перспективных материалов.

Заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем.

1. В данной диссертационной работе проведено комплексное исследование волн зарядовой плотности в полителлуридах редкоземельных элементов семейства $R\text{Te}_n$ ($n = 3, 4$), направленное на выявление механизмов формирования и эволюции электронных нестабильностей в квазидвумерных системах.
2. Показано, что состояние волны зарядовой плотности в соединениях $R\text{Te}_3$ существенно зависит от внешних воздействий, в частности направленных деформаций. Установлено, что одноосные и двухосные деформации приводят к изменению поверхности Ферми и, как следствие, к перестройке волнового вектора ВЗП и температуры перехода. Продемонстрировано, что равноосная деформация сохраняет симметрию системы, тогда как несимметричные деформации вызывают анизотропные изменения электронной структуры, влияя на устойчивость ВЗП.
3. Для соединений $R\text{Te}_4$ выявлена ключевая роль различных теллуридных слоёв в формировании аномального температурного гистерезиса. Показано, что взаимодействие между моно- и бислойными теллуридными плоскостями, а также эффекты антипересечения зон, существенно определяют характер фазовых переходов и метастабильность системы.
4. Особое внимание уделено реконструкции поверхности Ферми в состоянии ВЗП. Предложен новый подход к определению размеров остаточных электронных карманов в $R\text{Te}_3$ на основе обработки данных ФЭСУР, что позволило частично устранить противоречия между результатами фотоэмиссионной спектроскопии и магнитных квантовых осцилляций. Полученные результаты дают более глубокое понимание природы медленных осцилляций и их связи с реконструированной поверхностью Ферми.
5. В целом показано, что полителлуриды редкоземельных элементов являются удобной модельной системой для изучения конкуренции и кооперации различных электронных упорядочений. Высокая чувствительность этих материалов к внешним параметрам, таким как давление

и деформация, открывает возможности для управляемого изменения их электронных свойств.

6. Полученные результаты вносят вклад в развитие теории ВЗП и могут быть использованы при исследовании других квазидвумерных материалов с реконструкцией поверхности Ферми и коллективными электронными состояниями. Предложенные методы анализа, в частности подходы к обработке данных ФЭСУР, имеют потенциал для широкого применения в задачах современной физики конденсированного состояния.

Благодарности

Выражаю искреннюю и глубокую благодарность своему научному руководителю, Григорьеву Павлу Дмитриевичу, за его неоценимый вклад в моё образование в области физики конденсированного состояния, за постоянную поддержку, внимательность и терпение, проявленные на протяжении всей нашей совместной научной работы. Особую признательность хочу выразить своей маме и брату за их неизменную веру в меня, моральную поддержку и любовь, которые всегда вдохновляли меня на новые достижения. Отдельно благодарю не просто своего питомца Тобу, а верного друга, который всегда находился рядом и делил со мной радости и трудности этого пути.

Список сокращений и условных обозначений

ВЗП/CDW	вольна зарядовой плотности
ФЭСУР/ARPES	фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением
RTe _n	полителлуриды редкоземельных элементов
RTe ₃	трителлуриды редкоземельных элементов
RTe ₄	тетрателлуриды редкоземельных элементов
МКО	магнитные квантовые осцилляции
ПЭМ	Просвечивающая электронная микроскопия
ε	дисперсия
ε	деформация
1D	одномерное
2D	двухмерное
3D	трёхмерное
ЗБ	зона Бриллюэна
СС	модель сильной связи
E_F	уровень Ферми
ПФ	поверхность Ферми
ПС	плотность состояний
БПФ	быстрое преобразование Фурье

Список литературы

1. *Gruner, G. Density Waves In Solids / G. Gruner.* — Avalon Publishing, 1994. — (Advanced book program: Addison-Wesley).
2. *Gabovich, A. Charge- and spin-density waves in existing superconductors: competition between Cooper pairing and Peierls or excitonic instabilities / A. Gabovich, A. Voitenko, M. Ausloos // Physics Reports.* — 2002. — Т. 367, № 6. — С. 583—709.
3. Coexistence of Superconductivity and Charge Density Waves in Tantalum Disulfide: Experiment and Theory / Y. Kvashnin [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2020. — Окт. — Т. 125, вып. 18. — С. 186401.
4. Fermi Surface Sheet- Dependent Superconductivity in 2H-NbSe₂ / T. Yokoya [и др.] // *Science.* — 2001. — Т. 294, № 5551. — С. 2518—2520.
5. Three-dimensional charge density wave order in YBa₂Cu₃O_{6.67} at high magnetic fields / S. Gerber [и др.] // *Science.* — 2015. — Т. 350, № 6263. — С. 949—952.
6. Superconductivity in magnetically ordered CeTe_{1.82} / M. H. Jung [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Июнь. — Т. 67, вып. 21. — С. 212504.
7. Interplay between band crossing and charge density wave instabilities / P. D. Grigoriev [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2019. — Авг. — Т. 100, вып. 8. — С. 081109.
8. From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides / B. Keimer [и др.] // *Nature.* — 2015. — Т. 518, № 7538. — С. 179—186.
9. Charge density waves in the graphene sheets of the superconductor CaC₆ / K. Rahnejat [и др.] // *Nature communications.* — 2011. — Ноябрь. — Т. 2. — С. 558.
10. Charge-Density Wave in Ca-Intercalated Bilayer Graphene Induced by Commensurate Lattice Matching / R. Shimizu [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2015. — Апр. — Т. 114, вып. 14. — С. 146103.
11. 2D transition metal dichalcogenides / S. Manzeli [и др.] // *Nature Reviews Materials.* — 2017. — Июнь. — Т. 2. — С. 17033.
12. *Klemm, R. A. Pristine and intercalated transition metal dichalcogenide superconductors / R. A. Klemm // Physica C: Superconductivity and its Applications.* — 2015. — Т. 514. — С. 86—94. — Superconducting Materials: Conventional, Unconventional and Undetermined.
13. *Wilson, J. Charge-density waves and superlattices in the metallic layered transition metal dichalcogenides / J. Wilson, F. D. Salvo, S. Mahajan // Advances in Physics.* — 1975. — Т. 24, № 2. — С. 117—201.
14. Advances in Rare-Earth Tritelluride Quantum Materials: Structure, Properties, and Synthesis / K. Yumigeta [и др.] // *Advanced Science.* — 2021. — Т. 8, № 12. — С. 2004762.

15. Angle-resolved photoemission study of the evolution of band structure and charge density wave properties in $R\text{Te}_3$ ($R=\text{Y, La, Ce, Sm, Gd, Tb, and Dy}$) / V. Brouet [и др.] // *Phys. Rev. B*. — 2008. — Июнь. — Т. 77, вып. 23. — С. 235104.
16. Rare-Earth Chalcogenides: An Inspiring Playground for Exploring Frustrated Magnetism / M. Xie [и др.] // *Chinese Physics Letters*. — 2024. — Дек. — Т. 41, № 11. — С. 117505.
17. *Mitchell, K.* Rare-Earth Transition-Metal Chalcogenides / K. Mitchell, J. A. Ibers // *Chemical Reviews*. — 2002. — Т. 102, № 6. — С. 1929—1952. — PMID: 12059258.
18. Rare-earth-based chalcogenides and their derivatives: an encouraging IR nonlinear optical material candidate / P. Feng [и др.] // *Chemical Science*. — 2024. — Март. — Т. 15. — С. 5869—5896.
19. Comprehensive exploration of rare-earth chalcogenides: A DFT-based investigation into their optoelectronic, elastic, thermomechanical and magnetic properties for advanced functional and high-temperature applications / S. Belhachi [и др.] // *Inorganic Chemistry Communications*. — 2025. — Т. 177. — С. 114442.
20. *Kumta, P. N.* Rare-earth chalcogenides — an emerging class of optical materials / P. N. Kumta, S. H. Risbud // *Journal of Materials Science*. — 1994. — Т. 29. — С. 1135—1158.
21. Mechanical, magnetic, and electronic characteristics of Sm-based chalcogenides for spintronics and device applications / N. Noor [и др.] // *Chalcogenide Letters*. — 2024. — Май. — Т. 21. — С. 413—421.
22. Superconductivity in a Layered $\text{Ta}_4\text{Pd}_3\text{Te}_{16}$ with PdTe_2 Chains / W.-H. Jiao [и др.] // *Journal of the American Chemical Society*. — 2014. — Т. 136, № 4. — С. 1284—1287. — PMID: 24428401.
23. Effect of chemical pressure on the charge density wave transition in rare-earth tritellurides $R\text{Te}_3$ / N. Ru [и др.] // *Phys. Rev. B*. — 2008. — Янв. — Т. 77, вып. 3. — С. 035114.
24. Revealing Charge Density Wave Formation in the LaTe_2 System by Angle Resolved Photoemission Spectroscopy / D. R. Garcia [и др.] // *Physical Review Letters*. — 2007. — Апр. — Т. 98, № 16.
25. Layered semiconductor EuTe_4 with charge density wave order in square tellurium sheets / D. Wu [и др.] // *Phys. Rev. Mater.* — 2019. — Февр. — Т. 3, вып. 2. — С. 024002.
26. Pressure-Induced Superconducting Phase in the Charge-Density-Wave Compound Terbium Tritelluride / J. J. Hamlin [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2009. — Апр. — Т. 102, вып. 17. — С. 177002.
27. Pressure dependence of the charge-density-wave and superconducting states in GdTe_3 , TbTe_3 , and DyTe_3 / D. A. Zocco [и др.] // *Phys. Rev. B*. — 2015. — Май. — Т. 91, вып. 20. — С. 205114.

28. Suppression of charge density wave order by disorder in Pd-intercalated ErTe_3 / J. A. W. Straquadine [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2019. — Июнь. — Т. 99, вып. 23. — С. 235138.
29. Linear magnetoresistance in the charge density wave state of quasi-two-dimensional rare-earth tritellurides / A. A. Sinchenko [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2017. — Дек. — Т. 96, вып. 24. — С. 245129.
30. Bilayer splitting versus Fermi-surface warping as an origin of slow oscillations of in-plane magnetoresistance in rare-earth tritellurides / P. D. Grigoriev [и др.] // *The European Physical Journal B.* — 2016. — Июнь. — Т. 89, № 6.
31. Magnetotransport properties in van der Waals RTe_3 $\text{R} = \text{La}, \text{Ce}, \text{Tb}$ / Т. Higashihara [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2024. — Апр. — Т. 109, вып. 13. — С. 134404.
32. Orbital- and atom-dependent linear dispersion across the Fermi level induces charge density wave instability in EuTe_4 / A. Pathak [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2022. — Янв. — Т. 105, вып. 3. — С. 035120.
33. Multiple Charge density waves and lattice superstructures in thin-layer TmTe_2 and TmTe_3 / Z. Xu [и др.]. — 2021.
34. Coexistence and competition of multiple charge-density-wave orders in rare-earth tritellurides / B. F. Hu [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2014. — Авг. — Т. 90, вып. 8. — С. 085105.
35. *Malliakas, C. D.* Divergence in the Behavior of the Charge Density Wave in RETe_3 ($\text{RE} = \text{Rare-Earth Element}$) with Temperature and RE Element / C. D. Malliakas, M. G. Kanatzidis // *Journal of the American Chemical Society.* — 2006. — Т. 128, № 39. — С. 12612–12613. — PMID: 17002331.
36. Square Nets of Tellurium: Rare-Earth Dependent Variation in the Charge-Density Wave of RETe_3 ($\text{RE} = \text{Rare-Earth Element}$) / C. Malliakas [и др.] // *Journal of the American Chemical Society.* — 2005. — Т. 127, № 18. — С. 6510–6511. — PMID: 15869253.
37. Magnetic breakdown and charge density wave formation: A quantum oscillation study of the rare-earth tritellurides / P. Walmsley [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2020. — Июль. — Т. 102, вып. 4. — С. 045150.
38. Transient Electronic Structure and Melting of a Charge Density Wave in TbTe_3 / F. Schmitt [и др.] // *Science.* — 2008. — Т. 321, № 5896. — С. 1649–1652.
39. Fermi Surface Reconstruction in the CDW State of CeTe_3 Observed by Photoemission / V. Brouet [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Сент. — Т. 93, вып. 12. — С. 126405.
40. *Monceau, P.* Electronic crystals: an experimental overview / P. Monceau // *Advances in Physics.* — 2012. — Т. 61, № 4. — С. 325–581.
41. Persistent order due to transiently enhanced nesting in an electronically excited charge density wave / L. Rettig [и др.] // *Nature Communications.* — 2016. — Янв. — Т. 7. — С. 10459.

42. A Detailed First-Principles Study of the Structural, Elastic, Thermomechanical, and Optoelectronic Properties of Binary Rare-Earth Tritelluride NdTe₃ / Т. Chowdhury [и др.] // *Advanced Theory and Simulations*. — 2024. — Т. 7, № 11. — С. 2400528.
43. Magnetic properties of rare-earth metal tritellurides $R\text{Te}_3$ ($R = \text{Ce, Pr, Nd, Gd, Dy}$) / Y. Iyeiri [и др.] // *Phys. Rev. B*. — 2003. — Апр. — Т. 67, вып. 14. — С. 144417.
44. Experimental and Theoretical Studies of the Surface Oxidation Process of Rare-Earth Tritellurides / J. Kopačzek [и др.] // *Advanced Electronic Materials*. — 2023. — Т. 9, № 5. — С. 2201129.
45. Spontaneous Breaking of Isotropy Observed in the Electronic Transport of Rare-Earth Tritellurides / A. A. Sinchenko [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2014. — Янв. — Т. 112, вып. 3. — С. 036601.
46. Orbital- and atom-dependent linear dispersion across the Fermi level induces charge density wave instability in EuTe₄ / A. Pathak [и др.] // *Phys. Rev. B*. — 2022. — Янв. — Т. 105, вып. 3. — С. 035120.
47. Unconventional Hysteretic Transition in a Charge Density Wave / B. Q. Lv [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2022. — Янв. — Т. 128, вып. 3. — С. 036401.
48. The Evolution of Electron Dispersion in the Series of Rare-Earth Tritelluride Compounds Obtained from Their Charge-Density-Wave Properties and Susceptibility Calculations / P. A. Vorobyev [и др.] // *Materials*. — 2019. — Т. 12, № 14.
49. Angle-resolved photoemission spectroscopy study of charge density wave order in the layered semiconductor EuTe₄ / C. Zhang [и др.] // *Phys. Rev. B*. — 2022. — Ноябрь. — Т. 106, вып. 20. — С. L201108.
50. Charge transfer and multiple density waves in the rare earth tellurides / A. Banerjee [и др.] // *Phys. Rev. B*. — 2013. — Апр. — Т. 87, вып. 15. — С. 155131.
51. *Malliakas, C. D.* Charge Density Waves in the Square Nets of Tellurium of AMRETe₄ ($A = \text{K, Na}$; $M = \text{Cu, Ag}$; $\text{RE} = \text{La, Ce}$) / C. D. Malliakas, M. G. Kanatzidis // *Journal of the American Chemical Society*. — 2007. — Т. 129, № 35. — С. 10675–10677. — PMID: 17696351.
52. *Straquadine, J. A. W.* Evidence for Realignment of the Charge Density Wave State in ErTe₃ and TmTe₃ under Uniaxial Stress via Elastocaloric and Elastoresistivity Measurements / J. A. W. Straquadine, M. S. Ikeda, I. R. Fisher // *Phys. Rev. X*. — 2022. — Май. — Т. 12, вып. 2. — С. 021046.
53. Charge density waves tuned by biaxial tensile stress / A. Gallo-Frantz [и др.] // *Nature Communications*. — 2024. — Апр. — Т. 15.
54. Hysteresis of resistivity tensor in rare-earth polytellurides / P. Grigoriev [и др.] // *Physics of the Solid State*. — 2022. — Янв. — Т. 64. — С. 1145.
55. Slow Oscillations of the Transverse Magnetoresistance in HoTe₃ / S. V. Zaitsev-Zotov [и др.] // *JETP Letters*. — 2025. — Янв. — Т. 121, № 2. — С. 142–148.

56. Fermi surface evolution across multiple charge density wave transitions in ErTe_3 / R. G. Moore [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Февр. — Т. 81, вып. 7. — С. 073102.
57. Charge density wave generated Fermi surfaces in NdTe_3 / A. Chikina [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2023. — Апр. — Т. 107, вып. 16. — С. L161103.
58. Comparative study of magnetic quantum oscillations in Hall and transverse magnetoresistance / A. A. Sinchenko [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2024. — Окт. — Т. 110, вып. 16. — С. L161108.
59. Loss of nodal quasiparticle integrity in underdoped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ / D. Fournier [и др.] // *Nature Physics.* — 2010. — Июль. — Т. 6. — С. 905–911.
60. In situ doping control of the surface of higher temperature superconductors / M. Hossain [и др.] // *Nature Physics.* — 2008. — Июнь. — Т. 4. — С. 527–531.
61. Quantum oscillations and the Fermi surface in an underdoped high- T_c superconductor / N. Doiron-Leyraud [и др.] // *Nature.* — 2007. — Май. — Т. 447, № 7144. — С. 565–568.
62. A multi-component Fermi surface in the vortex state of an underdoped high- T_c superconductor / S. Sebastian [и др.] // *Nature.* — 2008. — Авг. — Т. 454, № 7201. — С. 200–203.
63. Compensated electron and hole pockets in an underdoped high- T_c superconductor / S. E. Sebastian [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Июнь. — Т. 81, вып. 21. — С. 214524.
64. Magnetic Quantum Oscillations in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.61}$ and $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.69}$ in Fields of Up to 85 T: Patching the Hole in the Roof of the Superconducting Dome / J. Singleton [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2010. — Февр. — Т. 104, № 8. — С. 086403.
65. *Sebastian, S. E.* Towards resolution of the Fermi surface in underdoped high- T_c superconductors / S. E. Sebastian, N. Harrison, G. G. Lonzarich // *Rep. Prog. Phys.* — 2012. — Сент. — Т. 75, № 10. — С. 102501.
66. From quantum oscillations to charge order in high- T_c copper oxides in high magnetic fields / B. Vignolle [и др.] // *C.R. Phys.* — 2013. — Янв. — Т. 14, № 1. — С. 39–52.
67. Normal-state nodal electronic structure in underdoped high- T_c copper oxides / S. E. Sebastian [и др.] // *Nature.* — 2014. — Июль. — Т. 511, № 7507. — С. 61–64.
68. *Sebastian, S. E.* Quantum Oscillations in Hole-Doped Cuprates / S. E. Sebastian, C. Proust // *Annual Review of Condensed Matter Physics.* — 2015. — Т. 6, № 1. — С. 411–430.
69. *Grigoriev, P. D.* Magnetic oscillations measure interlayer coupling in cuprate superconductors / P. D. Grigoriev, T. Ziman // *Phys. Rev. B.* — 2017. — Окт. — Т. 96, вып. 16. — С. 165110.
70. *Proust, C.* The Remarkable Underlying Ground States of Cuprate Superconductors / C. Proust, L. Taillefer // *Annual Review of Condensed Matter Physics.* — 2019. — Март. — Т. 10. — С. 409–429.

71. The de Haas–van Alphen Effect in Two-Dimensional Metals at a Fixed Electron Density / T. I. Mogilyuk [и др.] // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. — 2025. — Окт. — Т. 89. — С. 1846–1849.
72. *Morocho, A.* Reconciliation of ARPES and magnetic quantum oscillation data via image processing in rare-earth tritellurides / A. Morocho, P. Grigoriev, J.-Q. Meng // The European Physical Journal Plus. — 2026. — Янв. — Т. 141. — С. 62.
73. *Морочо, А. А.* О природе гигантского температурного гистерезиса в тетрателлуридах редкоземельных металлов / А. А. Морочо, П. Д. Григорьев // Письма в ЖЭТФ. — 2026. — Т. 123, вып. 6. — С. 411.
74. Pressure-induced quenching of the charge-density-wave state in rare-earth tritellurides observed by x-ray diffraction / A. Sacchetti [и др.] // Phys. Rev. B. — 2009. — Май. — Т. 79, вып. 20. — С. 201101.
75. Superconductivity in Pd-intercalated charge-density-wave rare earth poly-tellurides RE₂Te₃ / J. B. He [и др.] // Superconductor Science and Technology. — 2016. — Май. — Т. 29, № 6. — С. 065018.
76. *Gjerde, J.* Hyperbolic Behavior and Antiferromagnetic Order in Rare-Earth Tellurides / J. Gjerde, R. A. Jishi // Crystals. — 2022. — Т. 12, № 12.
77. Effect of dimensionality on sliding charge density waves: The quasi-two-dimensional TbTe₃ system probed by coherent x-ray diffraction / D. Le Bolloc'h [и др.] // Phys. Rev. B. — 2016. — Апр. — Т. 93, вып. 16. — С. 165124.
78. *Grüner, G.* Density Waves in Solids / G. Grüner. — 1. paperback print. — Cambridge, Mass : Perseus Publ, 2000. — (Frontiers in Physics ; 89).
79. *Monceau, P.* Electronic crystals: An experimental overview / P. Monceau // Adv. Phys. — 2012. — Авг. — Т. 61, № 4. — С. 325–581.
80. Classification of charge density waves based on their nature / X. Zhu [и др.] // Proceedings of the National Academy of Sciences. — 2015. — Т. 112, № 8. — С. 2367–2371.
81. Chemical pressure and hidden one-dimensional behavior in rare-earth tri-telluride charge-density wave compounds / A. Sacchetti [и др.] // Phys. Rev. B. — 2006. — Сент. — Т. 74, вып. 12. — С. 125115.
82. Electronic structure and charge-density wave formation in LaTe_{1.95} and CeTe_{2.00} / K. Y. Shin [и др.] // Phys. Rev. B. — 2005. — Авг. — Т. 72, вып. 8. — С. 085132.
83. Optical properties of the Ce and La ditelluride charge density wave compounds / M. Lavagnini [и др.] // Phys. Rev. B. — 2007. — Май. — Т. 75, вып. 20. — С. 205133.
84. Transport properties in low carrier system CeTe₂ / B. Min [и др.] // Physica B: Condensed Matter. — 2002. — Т. 312/313. — С. 205–207. — The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems.
85. *Kwon, Y.* Anisotropic transport properties in RTe₂ (R: La, Ce, Pr, Sm and Gd) / Y. Kwon, B. Min // Physica B: Condensed Matter. — 2000. — Т. 281/282. — С. 120–121.

86. Effect of disorder in the charge-density-wave compounds $\text{LaTe}_{1.95}$ and $\text{CeTe}_{1.95-x}\text{Se}_x$ ($x = 0$ and 0.16) as revealed by optical spectroscopy / Y. Huang [и др.] // Phys. Rev. B. — 2012. — Ноябрь. — Т. 86, вып. 20. — С. 205123.
87. Fermi surface reconstruction in CeTe_2 induced by charge density waves investigated via angle resolved photoemission / J.-S. Kang [и др.] // Phys. Rev. B. — 2012. — Февр. — Т. 85, вып. 8. — С. 085104.
88. Multiple charge density wave states at the surface of TbTe_3 / L. Fu [и др.] // Phys. Rev. B. — 2016. — Ноябрь. — Т. 94, вып. 20. — С. 205101.
89. De Haas-van Alphen oscillations in the charge-density wave compound lanthanum tritelluride LaTe_3 / N. Ru [и др.] // Physical Review B. — 2008. — Май. — Т. 78.
90. *Ru, N.* Thermodynamic and transport properties of YTe_3 , LaTe_3 , and CeTe_3 / N. Ru, I. R. Fisher // Phys. Rev. B. — 2006. — Янв. — Т. 73, вып. 3. — С. 033101.
91. Charge Density Waves in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.67}$ Probed by Resonant X-Ray Scattering under Uniaxial Compression / H.-H. Kim [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2021. — Янв. — Т. 126, вып. 3. — С. 037002.
92. Theory of stripes in quasi-two-dimensional rare-earth tellurides / H. Yao [и др.] // Phys. Rev. B. — 2006. — Дек. — Т. 74, вып. 24. — С. 245126.
93. Interplay of charge density wave states and strain at the surface of CeTe_2 / B. Sharma [и др.] // Phys. Rev. B. — 2020. — Июнь. — Т. 101, вып. 24. — С. 245423.
94. Quantum phase transition from triangular to stripe charge order in NbSe_2 / A. Soumyanarayanan [и др.] // Proceedings of the National Academy of Sciences. — 2013. — Т. 110, № 5. — С. 1623—1627.
95. Temperature dependence of the excitation spectrum in the charge-density-wave ErTe_3 and HoTe_3 systems / F. Pfuner [и др.] // Phys. Rev. B. — 2010. — Май. — Т. 81, вып. 19. — С. 195110.
96. *Reddy, J.* Energy Principles and Variational Methods in Applied Mechanics / J. Reddy. — Wiley, 2017.
97. *Yuan, Q.* Imperfect nesting and Peierls instability for a two-dimensional tight-binding model / Q. Yuan, T. Nunner, T. Kopp // The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems. — 2001. — Янв. — Т. 22. — С. 37—42.
98. Thermal hysteresis in the charge-density-wave transition of $\text{Lu}_5\text{Rh}_4\text{Si}_{10}$ / C. S. Lue [и др.] // Phys. Rev. B. — 2002. — Июль. — Т. 66, вып. 3. — С. 033101.
99. Metastable metallic state and hysteresis below the metal-insulator transition in PrNiO_3 / X. Granados [и др.] // Phys. Rev. B. — 1992. — Дек. — Т. 46, вып. 24. — С. 15683—15688.
100. Band insulator to Mott insulator transition in 1T-TaS_2 / Y. Wang [и др.] // Nature Communications. — 2020. — Авг. — Т. 11.

101. Thermal hysteretic behavior and negative magnetoresistance in the charge density wave material EuTe_4 / Q. Zhang [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2023. — Март. — Т. 107, вып. 11. — С. 115141.
102. Two Gaps in Semiconducting EuSbTe_3 Studied by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy / С.-С. Fan [и др.] // *Chinese Physics Letters.* — 2018. — Июль. — Т. 35, № 7. — С. 077104.
103. Coexistence and Coupling of Two Distinct Charge Density Waves in Sm_2Te_5 / C. Malliakas [и др.] // *Journal of the American Chemical Society.* — 2008. — Апрель. — Т. 130. — С. 3310—2.
104. *Tsvetkova, A. V.* Resistivity, density of electronic states, and superconducting transition temperature in density wave compounds with imperfect nesting / A. V. Tsvetkova, Y. I. Rodionov, P. D. Grigoriev // *Phys. Rev. B.* — 2025. — Май. — Т. 111, вып. 20. — С. 205141.
105. *Watanabe, S.* Phase Transition in Coupled Order Parameter System / S. Watanabe, T. Usui // *Progress of Theoretical Physics.* — 1985. — Т. 73, вып. 9. — С. 1305.
106. *Seidov, S. S.* First-order phase transition between superconducting and charge/spin density wave states causes their coexistence in organic metals / S. S. Seidov, V. D. Kochev, P. D. Grigoriev // *Phys. Rev. B.* — 2023. — Сентябрь. — Т. 108, вып. 12. — С. 125123.
107. *Kochev, V. D.* On the Size of Superconducting Islands on the Density-Wave Background in Organic Metals / V. D. Kochev, S. S. Seidov, P. D. Grigoriev // *Magnetochemistry.* — 2023. — Т. 9, № 7.
108. Evolution of static charge density wave order, amplitude mode dynamics, and suppression of Kohn anomalies at the hysteretic transition in EuTe_4 / R. Rathore [и др.] // *Physical Review B.* — 2023. — Январь. — Т. 107. — С. 024101.
109. Large moiré superstructure of stacked incommensurate charge density waves / B. Q. Lv [и др.]. — 2025.
110. *Liu, F.* Time and Angle Resolved Photoemission Spectroscopy (TR-ARPES) of TMDC Monolayers and Bilayers / F. Liu // *Chemical Science.* — 2022. — Декабрь. — Т. 14.
111. *Mo, S.-K.* Angle-resolved Photoemission Spectroscopy for the Study of Two-dimensional Materials / S.-K. Mo // *Nano Convergence.* — 2017. — Декабрь. — Т. 4.
112. Angle-resolved Photoemission Spectroscopy / H. Zhang [и др.] // *Nature Reviews Methods Primers.* — 2022. — Июль. — Т. 2. — С. 54.
113. Nonequilibrium dynamics of spontaneous symmetry breaking into a hidden state of charge-density wave / F. Zhou [и др.] // *Nature Communications.* — 2021. — Январь. — Т. 12. — С. 566.
114. *Zong, A.* Emergent States in Photoinduced Charge-Density-Wave Transitions / A. Zong. — 09.2021.

115. *Abrikosov, A. A.* Fundamentals of the theory of metals / A. A. Abrikosov. — Amsterdam New York, NY, USA : North-Holland Sole distributors for the USA, Canada, Elsevier Science Pub. Co, 1988.
116. *Ziman, J. M.* Principles of the theory of solids / J. M. Ziman. — Cambridge England : Cambridge University Press, 1972.
117. *Shoenberg, D.* Magnetic Oscillations in Metals (Cambridge Monographs on Physics) / D. Shoenberg. — Cambridge University Press, 09.2009.
118. *Widodo, C.* Medical image processing using python and open cv / C. Widodo, K. Adi, R. Gernowo // Journal of Physics: Conference Series. — 2020. — Апр. — Т. 1524. — С. 012003.
119. Persistent order due to transiently enhanced nesting in an electronically excited charge density wave / L. Rettig [и др.] // Nature Communications. — 2024. — Дек. — Т. 7.
120. Electronic Structure of Solids with Competing Periodic Potentials / J. Voit [и др.] // Science. — 2000. — Т. 290, № 5491. — С. 501—503.
121. Bilayer splitting versus Fermi-surface warping as an origin of slow oscillations of in-plane magnetoresistance in rare-earth tritellurides / P. D. Grigoriev [и др.] // The European Physical Journal B. — 2016. — Июнь. — Т. 89, № 6.
122. *Grigoriev, P. D.* Slow quantum oscillations without fine-grained Fermi surface reconstruction in cuprate superconductors / P. D. Grigoriev, T. Ziman // JETP Lett. — 2017. — Сент. — Т. 106, № 6. — С. 371—377.
123. Quantum oscillations with magnetic hysteresis observed in CeTe₃ thin films / M. Watanabe [и др.] // Applied Physics Letters. — 2020. — Авг. — Т. 117, № 7. — С. 072403.
124. Magnetic order of rare-earth tritelluride CeTe₃ at low temperature / K. Deguchi [и др.] // Journal of Physics: Conference Series. — 2009. — Март. — Т. 150, № 4. — С. 042023.
125. Uncovering hidden Fermi surface instabilities through visualizing unconventional quasiparticle interference in CeTe₃ / B. R. M. Smith [и др.] // Phys. Rev. Mater. — 2024. — Окт. — Т. 8, вып. 10. — С. 104004.
126. *Ru, N.* Magnetic properties of the charge density wave compounds RTe₃ (R = Y, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, and Tm) / N. Ru, J.-H. Chu, I. R. Fisher // Phys. Rev. B. — 2008. — Июль. — Т. 78, вып. 1. — С. 012410.
127. Strongly coupled charge, orbital, and spin order in TbTe₃ / S. Chillal [и др.] // Phys. Rev. B. — 2020. — Дек. — Т. 102, вып. 24. — С. 241110.
128. *Fetter, A.* Quantum Theory of Many-particle Systems / A. Fetter, J. Walecka. — McGraw-Hill, 1971. — (International series in pure and applied physics).
129. Realizing Record High Performance in n-type Bi₂Te₃-Based Thermoelectric Materials / B. Zhu [и др.] // Energy Environmental Science. — 2020. — Июнь. — Т. 13.
130. *Gonzalez, R.* Digital Image Processing / R. Gonzalez, R. Woods. — Prentice Hall, 2008.

131. *Feynman, R.* No Ordinary Genius: The Illustrated Richard Feynman / R. Feynman, C. Sykes. — Norton, 1994.
132. *Frery, A.* Image Processing for Computer Graphics and Vision / A. Frery, L. Velho, J. Miranda. — 01.2008.
133. *Bhuyan, M.* Computer Vision and Image Processing: Fundamentals and Applications / M. Bhuyan. — 11.2019.
134. *Umbaugh, S.* Digital Image Processing and Analysis: Computer Vision and Image Analysis / S. Umbaugh. — CRC Press, 2023.
135. *Sharma, N.* Automated medical image segmentation techniques / N. Sharma, L. Aggarwal // Journal of medical physics / Association of Medical Physicists of India. — 2010. — App. — T. 35. — C. 3–14.
136. Segment anything in medical images / J. Ma [и др.] // Nature Communications. — 2024. — ЯНВ. — Т. 15, № 1.

Приложение А

Модификация закона дисперсии

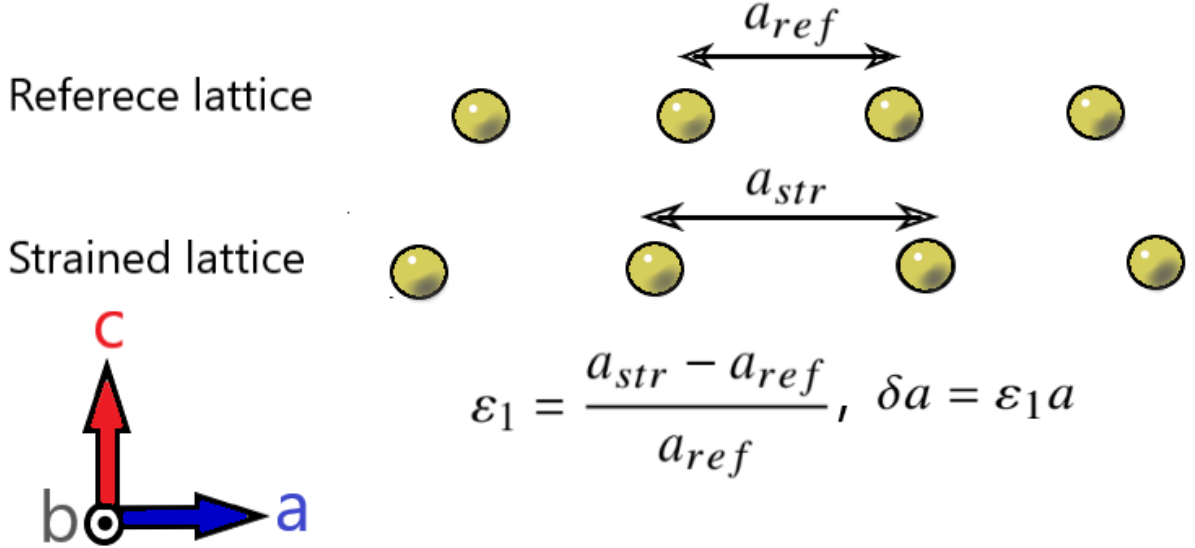


Рисунок А.1 — Напряженное состояние базовой решетки RTe₃.

Дисперсионные соотношения, полученные из модели сильной связи в уравнении (2.1), выражаются через трехмерную постоянную решетки. После учета смещения атомов от их равновесных положений, как показано на рис. А.1, эти соотношения преобразуются в

$$\varepsilon_{1,2}(k_x, k_y) = -2t_{\parallel} \cos \left[\frac{k_x(a\varepsilon'_1) \pm k_y(c\varepsilon'_2)}{2} \right] - 2t_{\perp} \cos \left[\frac{k_x(a\varepsilon'_1) \mp k_y(c\varepsilon'_2)}{2} \right], \quad (\text{A.1})$$

где обозначение $\varepsilon'_{1,2}$ включает диагонали тензора деформации 2×2 (игнорируя компоненты сдвига).

$$\begin{bmatrix} \varepsilon'_1 & 0 \\ 0 & \varepsilon'_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 \end{bmatrix}.$$

Знак $\varepsilon_{1,2}$ зависит от приложенного напряжения. С другой стороны, $\varepsilon'_{1,2}$ является коммутативным параметром, т.е. $k_x(a\varepsilon'_1) = a(k_x\varepsilon'_1)$, $k_y(c\varepsilon'_2) = c(k_y\varepsilon'_2)$, что не нарушает симметрию модели сильной связи.

Приложение Б

Параметры обратного радиуса экранирования Дебая

Соответствующая полная плотность состояний на уровне Ферми определяется как $\rho_F = 1/\pi\hbar v_F c b$, где $v_F \approx 1.1 \cdot 10^8$ см/с — скорость Ферми вдоль оси легкого намагничивания. Обратный радиус экранирования Дебая равен $\zeta = \sqrt{4\pi e^2 \rho_F} \approx (1.26 \text{ \AA})^{-1}$ для соединений RTe₃. В деформированном состоянии $\rho_F \rightarrow \rho'_F = 1/\pi\hbar v'_F c' b$, где v'_F и c' — новые параметры в деформированной ячейке. Эти параметры в недеформированном состоянии приведены в следующей таблице:

Compound	a (Å)[23]	t [48]	ρ_F (erg ⁻¹ cm ⁻³)	ζ^{-1} (Å) ⁻¹
DyTe ₃	4.302	1.85	22×10^{32}	1.24
HoTe ₃	4.290	1.96	21×10^{32}	1.28
TmTe ₃	4.275	2.20	19×10^{32}	1.36

Таблица 1 — Список параметров, описывающих дисперсию и статическое электрон-электронное взаимодействие для RTe₃ (R = Dy, Ho, and Tm).

Приложение В

Изменение поверхности Ферми

Ввиду выраженного двумерного характера систем $R\text{Te}_3$, их электронную структуру можно описать с помощью следующей модели сильной связи слоя теллура.

$$\begin{aligned}\varepsilon_1(k_x, k_y) &= -2t_{\parallel} \cos[k_x a_0] - 2t_{\perp} \cos[k_y c_0] \\ \varepsilon_2(k_x, k_y) &= -2t_{\parallel} \cos[k_y c_0] - 2t_{\perp} \cos[k_x a_0]\end{aligned}\quad (\text{B.1})$$

где a_0 и c_0 — двумерные постоянные решетки, величина которых на $\sqrt{2}$ меньше, чем постоянная решетки в плоскости трехмерной элементарной ячейки. Учитывая, что кривизна зон определяется t_{\perp}/t_{\parallel} , слои поверхности Ферми становятся идеально плоскими при $t_{\perp} = 0$, слои Ферми становятся идеально плоскими, что приводит к полностью одномерной системе, характеризующейся четырехкратной симметрией (см. рис. В.1).

Как показано на рис. 2.1, приложение двуосной/одноосной деформации к плоскости Те приводит к угловой деформации относительно трехмерной элементарной ячейки. Эта деформация проявляется в виде изменения деформации под углом 45° , являющегося результатом симметричной тангенциальной деформации и вращения твердого тела. Следовательно, тензор деформации 2×2 умножается на матрицу вращения $R\varepsilon'_{ij}R^T$, где

$$R = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}.$$

В результате этого преобразования мы получаем следующий тензор деформации размером 2×2 :

$$\begin{bmatrix} \varepsilon'_1 \\ \varepsilon'_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\varepsilon'_1 + \varepsilon'_2}{2} & \frac{\varepsilon'_2 - \varepsilon'_1}{2} \\ \frac{\varepsilon'_2 - \varepsilon'_1}{2} & \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.2})$$

Преобразование применяется к бесконечно малому тензору деформации, что позволяет нам учитывать эффект деформации вдоль главных осей трехмерной элементарной ячейки. Это приводит к новой системе координат импульса:

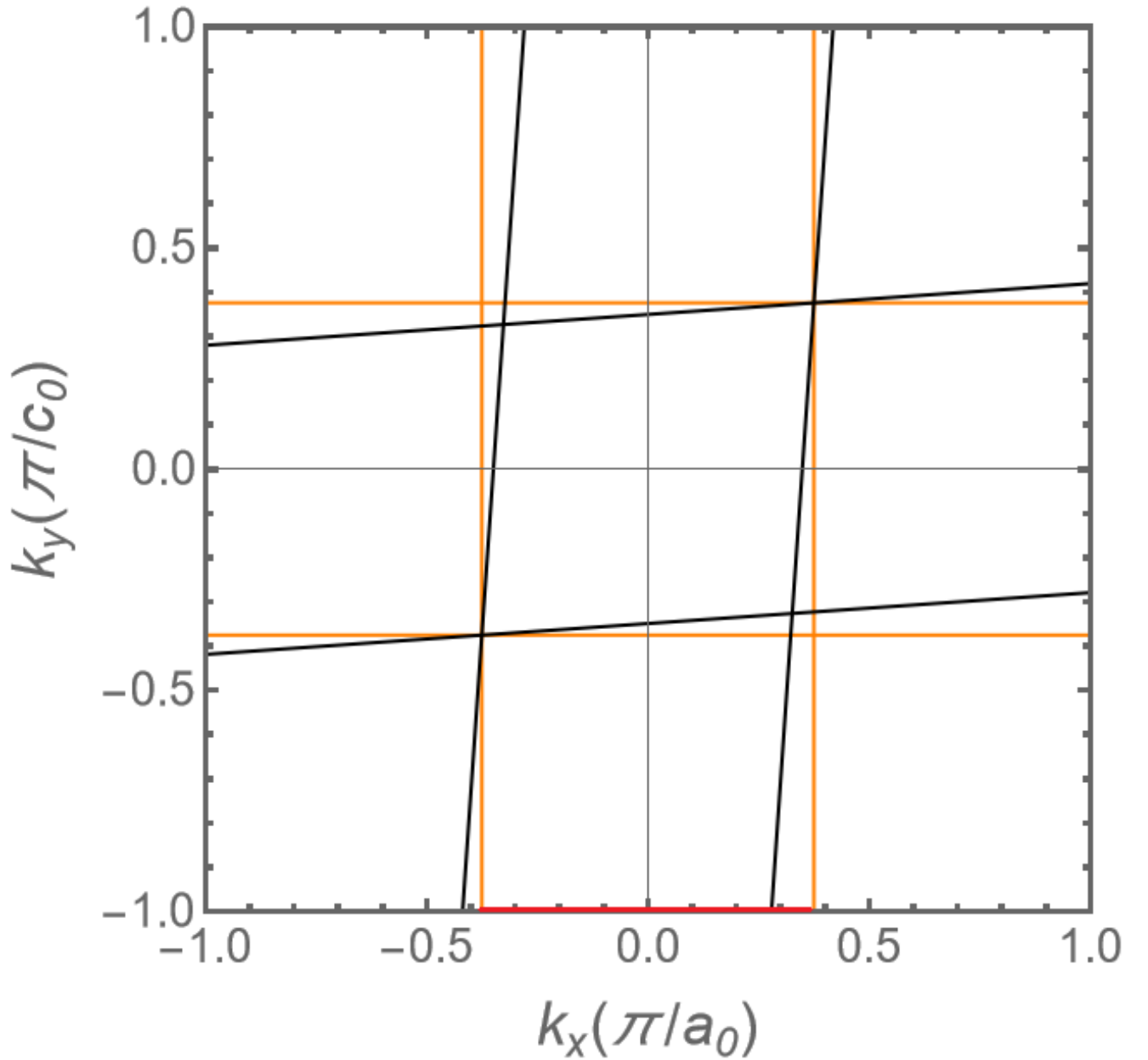


Рисунок В.1 — Изменение поверхности FS под действием одноосного растягивающего напряжения вдоль оси x (обозначено черными линиями).

$$\begin{aligned}
 k_x &\rightarrow \frac{(\varepsilon'_1 + \varepsilon'_2)k_x}{2} + \frac{(\varepsilon'_2 - \varepsilon'_1)k_c}{2} \\
 k_y &\rightarrow \frac{(\varepsilon'_1 + \varepsilon'_2)k_c}{2} + \frac{(\varepsilon'_2 - \varepsilon'_1)k_x}{2}
 \end{aligned} \tag{B.3}$$

Следовательно, дисперсия электронов в ур. (A.1) принимает следующий вид при $t_{\perp} = 0$:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_1(k_x, k_y) &= -2t_{\parallel} \cos \left[\frac{(\varepsilon'_1 + \varepsilon'_2)a_0k_x}{2} + \frac{(\varepsilon'_2 - \varepsilon'_1)a_0k_y}{2} \right] \\
 \varepsilon_2(k_x, k_y) &= -2t_{\parallel} \cos \left[\frac{(\varepsilon'_1 + \varepsilon'_2)c_0k_y}{2} + \frac{(\varepsilon'_2 - \varepsilon'_1)c_0k_x}{2} \right]
 \end{aligned} \tag{B.4}$$

Как видно из ур. (В.4), площадь ПФ остается неизменной при равноосном напряжении. Однако при одноосной/двуосной деформации площадь ПФ изменяется линейно следующим образом:

$$\frac{\delta A_F}{A_F} = \frac{(k - k')}{k} = \frac{\delta k}{k} \quad (\text{В.5})$$

$$k \left(\frac{k - k'}{k} \right) = \delta k.$$

С другой стороны, уровень Ферми в деформированном состоянии определяется как $E'_F = E_F \pm \delta E_F$, где \pm определяется увеличением/уменьшением площади Ферми, и

$$\delta E = v_F \delta k = v_F k \left(\frac{k - k'}{k} \right) = E_F \left(\frac{k - k'}{k} \right), \quad (\text{В.6})$$

где v_F — фермиевская скорость, а k — начальный импульс (обозначен красной сплошной линией на рис. В.1). Таким образом, уровень Ферми изменяется следующим образом.

$$E'_F = E_F \left(1 \pm \left(\frac{k - k'}{k} \right) \right). \quad (\text{В.7})$$

Приложение Г

Электрон-фононное взаимодействие

Деформация изменяет концентрацию ионов на единицу площади/объема, что приводит к изменению кулоновского взаимодействия между электронами и положительными ионами решетки. Следовательно, электрон-фононное взаимодействие усиливается. При малой деформации изменение объема можно выразить как $dV = dx'dy'dz' = dV(1 + \nabla d)$, где d характеризует смещение от положения равновесия. Это соответствует линейной зависимости, показанной в ур. (B.7), согласующейся с изменением плотности ионов $\frac{\delta\rho_b}{\rho_b} = \frac{\delta n}{n} = -\nabla d$, и может быть суммировано следующим образом:

$$\delta\rho_b = -eZ\delta n = -eZ\nabla d, \quad (\text{Г.1})$$

где Z — валентность иона. Согласно [128], только продольная мода вызывает изменения плотности, необходимые для модификации кулоновского взаимодействия между электронами и ионным фоном. Следовательно, взаимодействие электронов с фоном при деформации может быть описано следующим гамильтонианом в терминах полевых операторов:

$$\hat{H}_{el-b} = \int d^3x d^3x' \frac{\hat{\rho}_{el}(x)\delta\hat{\rho}_b(x')}{|x-x'|}. \quad (\text{Г.2})$$

Оператор электронной плотности определяется как $\hat{\rho}_{el} = e\hat{n}_b(x)$, а оператор плотности числа частиц — как $\hat{n}_b(x) = \Psi^\dagger(x)\Psi(x)$, где $\Psi^\dagger(x) = V^{-1/2} \sum_{k,\lambda} e^{-ikx} S_\lambda a_k^\dagger$. Здесь V — объем, а S_λ — две спиновые функции для спин вверх $S_\uparrow = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ и спин вниз $S_\downarrow = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$. Изменение плотности ионов определяется как $\delta\hat{\rho}_b = -eZ\delta\hat{n}_b = -eZ\nabla\hat{d}$, а векторное поле смещения равно [128]:

$$\hat{d}(x) = -i(Mn_b)^{-1/2} \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\omega}\right)^{1/2} \frac{q}{q} [b_q e^{iqx} - b_q^\dagger e^{-iqx}] \theta(\omega_D - \omega_q). \quad (\text{Г.3})$$

Поскольку кулоновское взаимодействие между электронами и ионным фоном может изменяться только за счет изменений плотности, вызванных продольными модами, мы рассматриваем низкочастотное ионное движение $\omega = c_l q$,

где c_l — продольная скорость звука. Следовательно, уравнение (Г.2) принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \widehat{H}_{el-b} = \frac{Ze^2}{Vc_l} \left(\frac{1}{Mn_b} \right)^{1/2} \sum_{k,q,\lambda} \left(\frac{\hbar\omega_q}{2V} \right)^{1/2} a_{k,\lambda}^\dagger a_{k,\lambda} \theta(\omega_D - \omega_q) \\ \left[b_q \int d^3x d^3x' \frac{e^{ikx} e^{iqx} e^{-ikx}}{|x-x'|} \right. \\ \left. + b_q^\dagger \int d^3x d^3x' \frac{e^{ikx} e^{-iqx} e^{-ikx}}{|x-x'|} \right]. \end{aligned} \quad (\text{Г.4})$$

Подставив $x - x' \rightarrow r$ и помня, что $\int d^3x e^{i(k_2-k_1)x} = V\delta_{k_1,k_2}$, получаем:

$$\begin{aligned} \widehat{H}_{el-b} = \frac{Ze^2}{Vc_l} \left(\frac{1}{Mn_b} \right)^{1/2} \sum_{k,q,\lambda} \left(\frac{\hbar\omega_q}{2V} \right)^{1/2} \theta(\omega_D - \omega_q) \\ \left[a_{k+q,\lambda}^\dagger a_{k,\lambda} b_q \int d^3r \frac{e^{-iqr}}{r} \right. \\ \left. + a_{k,\lambda}^\dagger a_{k+q,\lambda} b_q^\dagger \int d^3r \frac{e^{iqr}}{r} \right]. \end{aligned} \quad (\text{Г.5})$$

После учета эффекта экранировки, т.е.

$$\widehat{H}_{el-b} = \int d^3x d^3x' \frac{\widehat{\rho}_{el}(x) \delta \widehat{\rho}_b(x') e^{-|x-x'|\zeta}}{|x-x'|} \quad (\text{Г.6})$$

и, решив уравнение $\int d^3r \frac{e^{-(iq-\zeta)r}}{r} = \frac{4\pi}{q^2+\zeta^2}$,

получаем

$$\begin{aligned} \widehat{H}_{el-b} = \frac{Ze^2}{c_l} \left(\frac{1}{Mn_b} \right)^{1/2} \sum_{k,q,\lambda} \left(\frac{\hbar\omega_q}{2V} \right)^{1/2} \frac{4\pi}{q^2+\zeta^2} \theta(\omega_D - \omega_q) \\ \left[a_{k+q,\lambda}^\dagger a_{k,\lambda} b_q + a_{k,\lambda}^\dagger a_{k+q,\lambda} b_q^\dagger \right]. \end{aligned} \quad (\text{Г.7})$$

Вклад вектора ВЗП на \widehat{H}_{el-b} можно оценить, подставив $q \rightarrow Q_{CDW}$ в ур. (Г.7). Это означает, что мы рассматриваем вклад взаимодействия одного электрона с положительно заряженным ионом при векторе ВЗП Q_{CDW} . Следовательно, гамильтониан электрон-фононного взаимодействия \widehat{H}_{el-b} принимает вид

$$\begin{aligned} \widehat{H}_{el-b} = \frac{Ze^2}{c_l} \left(\frac{1}{Mn_b} \right)^{1/2} \sum_{k,Q_{CDW},\lambda} \left(\frac{\hbar\omega_{Q_{CDW}}}{2V} \right)^{1/2} \frac{4\pi}{Q_{CDW}^2+\zeta^2} \\ \theta(\omega_D - \omega_{Q_{CDW}}) \left[a_{k+Q_{CDW},\lambda}^\dagger a_{k,\lambda} b_{Q_{CDW}} \right. \\ \left. + a_{k,\lambda}^\dagger a_{k+Q_{CDW},\lambda} b_{Q_{CDW}}^\dagger \right]. \end{aligned} \quad (\text{Г.8})$$

Это приводит к следующему кулоновскому взаимодействию

$$U_{el-b} = \frac{Ze^2}{2} \left(\frac{\hbar Q_{CDW}^2}{Mn_b V \sqrt{\frac{\beta}{M}} \sin\left(\frac{Q_{CDW}a}{2}\right)} \right)^{1/2} \frac{4\pi}{Q_{CDW}^2 + \zeta^2} \quad (\Gamma.9)$$

$$U_{el-b} = \frac{K4\pi e^2}{Q_{CDW}^2 + \zeta^2}$$

Здесь постоянную Гука β можно оценить, используя формулу $c_l = \sqrt{\beta a/M}$, где продольная скорость звука RTe_3 равна $c_l = 2800$ м/с [129]. Следовательно, $K \approx 0.0133$ при фиксации $Z = 2$.

После включения вклада из ур. (Г.9) в ур. (2.5) мы получаем следующее общее соотношение

$$(U_{el-el} + U_{el-b})\chi = 1. \quad (\Gamma.10)$$

Приложение Д

Квантование изображения

Цифровая обработка изображений, или просто обработка изображений, — это термин, обычно обозначающий совокупность методов, используемых для улучшения изображений и извлечения значимой информации. Данные методы, находят успешное применение в различных областях, таких как астрономия, биология и ядерная медицина [130]. Эти методы включают в себя снижение шума, сжатие изображений и извлечение признаков, таких как идентификация краев, контуров, ключевых точек (углов, соединений) и областей, характеризующихся определенными цветами или текстурами. Каждая операция обработки изображения может рассматриваться как операция над матрицей изображения. Учитывая, что цифровое изображение может быть представлено матрицами [130], целесообразно рассмотреть, как операции над элементами матрицы влияют на соответствующее изображение. Например, если мы рассматриваем бинарное (болическое) изображение A как матрицу $A = (a_{i,j})$, то изображение B соответствует транспонированной матрице A , выраженной как $B = (b_{i,j}) = (a_{j,i}) = A^T$. Таким образом, отражение относительно линии $x = y$, показанное на рис. Д.1, представляет собой не что иное, как умножение бинарного изображения размером 2×2 на матрицу $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$.

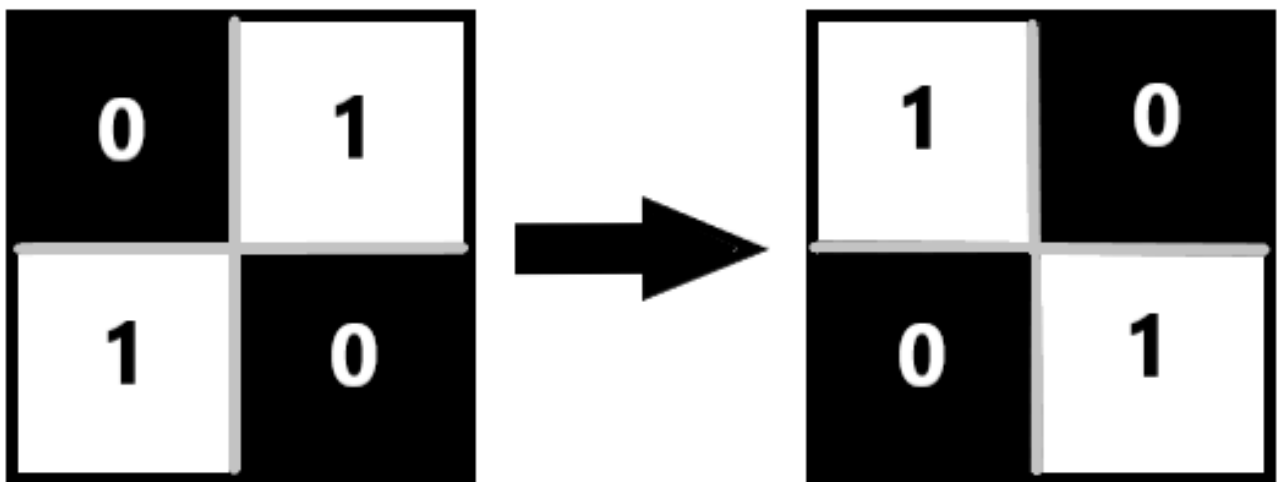


Рисунок Д.1 — Отражение бинарного изображения размером 2×2 .

В данном случае числа определяют цвет каждого пикселя: 0 обозначает черный, а 1 — белый. Однако известно, что цифровое изображение может содержать области с различной интенсивностью серого; такие изображения называются изображениями в оттенках серого и могут быть представлены матрицами. Каждый элемент матрицы определяет интенсивность соответствующего пикселя. Для удобства большинство современных цифровых файлов используют целые числа от 0 до 255, что дает в общей сложности $256 = 2^8$ различных уровней серого. На рис. Д.2 показан пример этих двух типов изображений.



а)



б)

Рисунок Д.2 — Обложка книги "No Ordinary Genius: The Illustrated Richard Feynman"[131]. (а) Изображение в оттенках серого. (б) Двоичное изображение.

Цифровое изображение можно определить как двумерную функцию, обозначаемую как $f(x,y)$, где x и y представляют пространственные координаты изображения, а дискретное значение $f(x,y)$ в этих координатах соответствует значению интенсивности в этой точке. Процесс дискретизации пространства изображения, известный как квантование [132], включает отображение этих уровней интенсивности на конечный набор дискретных значений [132]. В изображениях в оттенках серого квантование присваивает уровни интенсивности определенному числу оттенков, часто определяемому числом битов. В частности, изображение с 2^k уровнями серого обычно называют k -битным изображением. Например, изображение, способное отображать 256 различных уровней серого, называется 8-битным изображением [130].

В двумерном пространстве пиксель p , расположенный в заданных координатах (x, y) , имеет два горизонтальных и два вертикальных соседей со следующими

координатами: $(x+1, y)$, $(x-1, y)$, $(x, y+1)$, $(x, y-1)$. Этот набор пикселей составляет 4-соседей p , обычно обозначаемых как $N_4(p)$. С другой стороны, четыре диагональных соседа, обозначаемые как $N_D(p)$, находятся в координатах: $(x+1, y+1)$, $(x+1, y-1)$, $(x-1, y+1)$, $(x-1, y-1)$. Объединение этих диагональных соседей с 4-соседями дает 8-соседей p , обозначаемых как $N_8(p)$. Важно отметить, что некоторые точки внутри $N_8(p)$ могут выходить за пределы границ изображения, если (x, y) расположены вдоль границы изображения. В качестве иллюстрации рассмотрим пиксель $p = 1$, расположенный в центре следующих бинарных изображений размером 3×3 :

$$\begin{array}{ccc}
 & 0 & 0 & 0 & & 0 & p & p \\
 (a) & 0 & p & 0 & (b) & 0 & p & 0 \\
 & 0 & 0 & 0 & & 0 & 0 & p
 \end{array}$$

В данном случае пиксель p принадлежит $N_8(p)$, но только центральный пиксель p в (b) связан с другими пикселями p , поскольку они имеют одинаковое значение.

Координаты пикселей играют решающую роль в таких понятиях, как смежность, связность, регионы и границы [130].

Приложение Е

Фильтрация

Фильтрация — важный термин в обработке изображений, обозначающий принятие (пропускание) или отбрасывание определённых частотных составляющих. Фильтр или маска, удаляющая низкие частоты ниже определённого значения ω , называется фильтром верхних частот. Большая часть фонового шума находится на низких частотах, поэтому фильтр верхних частот может очистить сигнал. Если фильтр отбрасывает высокие частоты, он называется фильтром нижних частот. Фильтр нижних частот можно использовать для сглаживания цифрового изображения, поскольку он отбрасывает высокочастотный шум. Фильтр, который отсекает как высокие, так и низкие частоты, называется полосовым фильтром. Фильтрация изображений — это процесс модификации пикселей изображения на основе некоторой функции локальной окрестности пикселя (операция соседства). Фильтрация изображений используется для удаления шума, повышения контрастности или выделения контуров изображения, что показано на рис.Е.1.



Рисунок Е.1 — Действие фильтра на изображение. Этот процесс представляет собой процесс обработки, направленный на решение различных задач, включая подавление шума, повышение контрастности и выделение контуров.

В обработке изображений фильтрация является важнейшим методом, который включает в себя избирательное принятие или отбрасывание определенных частотных составляющих. Фильтр верхних частот, также известный как маска [130], устраняет частоты ниже определенного значения ω , эффективно уменьшая фоновый шум, часто встречающийся на низких частотах. Напротив, фильтр нижних частот ослабляет высокие частоты и может использоваться для

сглаживания цифровых изображений путем удаления высокочастотного шума. Полосовой фильтр, с другой стороны, избирательно удаляет как высокие, так и низкие частоты. Фильтрация изображений изменяет значения пикселей на основе функции, применяемой к локальной окрестности каждого пикселя. В результате после применения фильтра получается новое выходное изображение, как показано на рис. Е.1.

Мы можем интуитивно определить, какой классический метод позволяет измерить вклад заданной частоты в произвольный сигнал. Для сигнала $F : R \rightarrow R$ преобразование Фурье $\mathbb{F}[F]$ сигнала F определяется следующим образом:

$$\mathbb{F}(\omega) = \hat{F}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} F(t)e^{-it\omega} dt. \quad (\text{E.1})$$

Поскольку \mathbb{F} — линейный оператор, действующий на F ($\mathbb{F}[F]$), его обратный оператор \mathbb{F}^{-1} принимает следующий вид:

$$F(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{F}e^{it\omega} d\omega. \quad (\text{E.2})$$

Преобразование Фурье служит инструментом для идентификации частот, присутствующих в заданном сигнале F . В частности, ядро $e^{-it\omega}$ представляет собой периодический сигнал, характеризующийся частотой ω . Следовательно, модуляция $F(t)e^{-it\omega}$ чувствительна к значениям частоты ω в сигнале F , которые совпадают с частотами ядра $e^{-it\omega}$. Интеграл в уравнении (Е.1) количественно определяет меру присутствия частоты ω в сигнале F по всей его области определения. Таким образом, преобразование Фурье может быть использовано для обработки или удаления компонентов цифрового изображения. Рассмотрим изображение в оттенках серого с размерами 500×400 пикселей, где значение каждого пикселя варьируется от 0 до 255, что соответствует градиенту от черного к белому. Это изображение можно представить как функцию f , определенную в области $0 \leq x < 500$, $0 \leq y < 400$, со значениями функции от 0 до 255. Применение преобразования Фурье к F дает функцию $\hat{F}(k_x, k_y)$.

$$\hat{F}(k_x, k_y) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(x, y)e^{-2\pi i(k_x x + k_y y)} dx dy. \quad (\text{E.3})$$

Здесь k_x и k_y представляют собой частоты повторения волны вдоль направлений x и y соответственно. Как отмечалось ранее, фильтрация изображений основана на операциях с окрестностями. Окрестность точки (x, y) на изображении F может быть задана с помощью квадратной/прямоугольной области,

центрированной в этой точке; эта квадратная/прямоугольная область называется маской или фильтром. Значения внутри подобласти фильтра обозначаются как коэффициенты фильтра w .

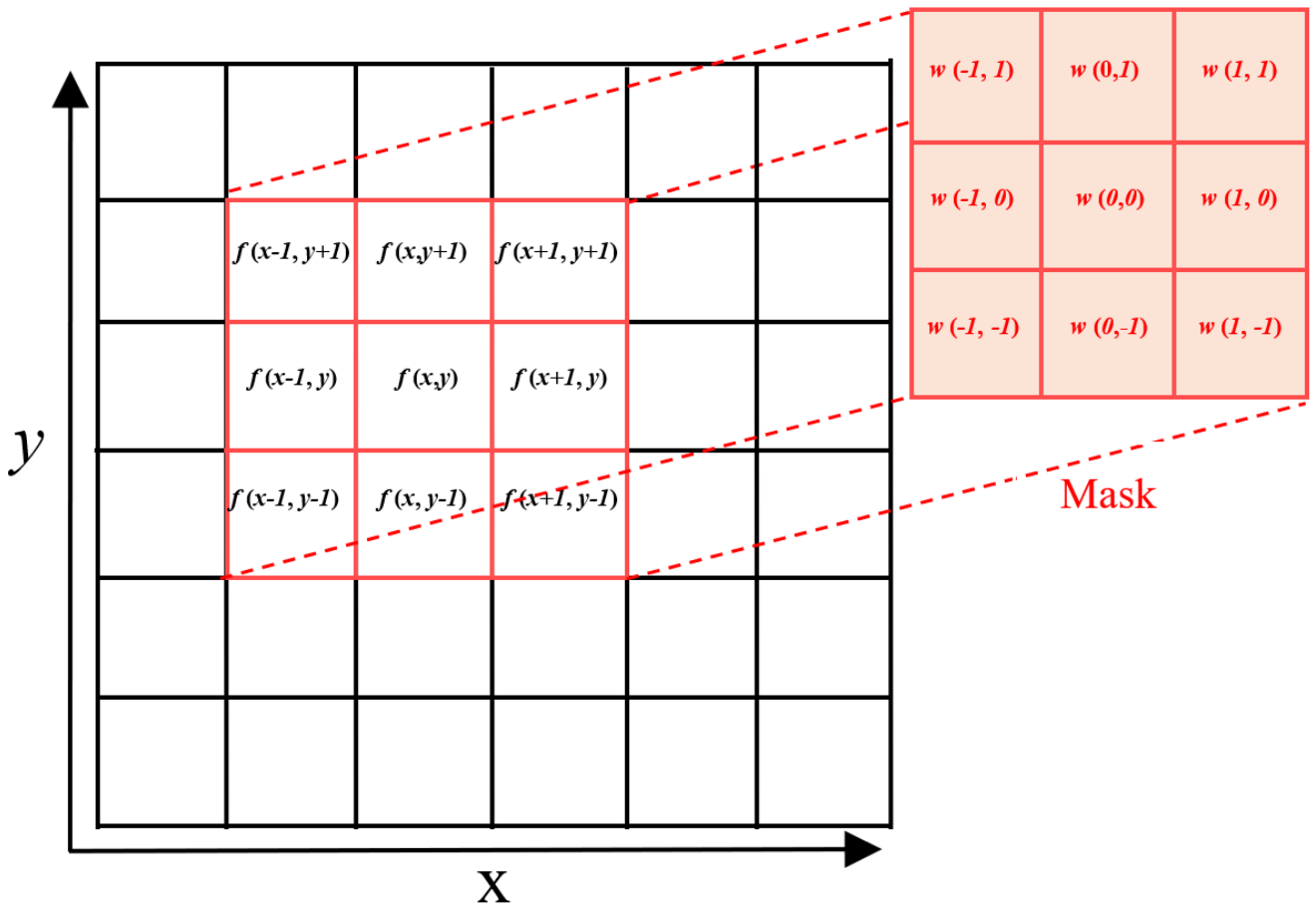


Рисунок Е.2 — Фильтрация изображений. Механика линейной пространственной фильтрации с использованием фильтрующей маски размером 3×3 .

Обратите внимание, что центральный коэффициент $w(0, 0)$ фильтра совпадает с пикселем в точке (x, y) . Метод фильтрации считается линейным, если результирующий выход представляет собой взвешенную сумму входных пикселей (операция, выполняемая над пикселями изображения, является линейной). Методы, не удовлетворяющие этому свойству, называются нелинейными. Таким образом, линейная пространственная фильтрация изображения с размерами $M \times N$ с использованием фильтра размером $m \times n$ может быть выражена следующим образом:

$$g(x, y) = \sum_{x'=-a}^a \sum_{y'=-b}^b w_{x', y'} F(x - x', y - y'). \quad (\text{E.4})$$

Для удобства $m = 2a + 1$, $n = 2b + 1$ фиксированы таким образом, чтобы мы получали только фильтры нечетного размера, где a и b — положительные целые

числа. К распространенным методам фильтрации изображений относятся: сглаживающие фильтры, фильтры повышения резкости, нерезкое маскирование и фильтры с высоким коэффициентом усиления, медианные фильтры [133].

Приложение Ж

Сегментация



а)



б)



в)



г)

Рисунок Ж.1 — Сегментация изображения для обнаружения глаз: (а) исходное изображение; (б) полутоновое изображение; (с) результат обнаружения границ; (д) итоговое изображение.

Сегментация изображений — это метод, используемый для разложения изображения на значимые области; то есть цель сегментации изображений — идентифицировать области, представляющие объекты или значимые части объектов. Методы сегментации изображений обычно ищут объекты, которые демонстрируют некоторую степень однородности или контраста с объектами на их границах [134]. Это важный шаг в углубленном анализе изображений и в последние годы стал мощным инструментом в клинических приложениях [135; 136].

Как показано на рис. Ж.1, сегментация изображений разлагает изображение на области интереса. Распространенные подходы к сегментации изображений включают: пороговую обработку, методы сегментации на основе областей, сегментацию на основе обнаружения границ и деформируемые модели [133].