

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЭФФЕКТЫ В ХАЛЬКОПИРИТЕ CuFeS_2 ПО
ДАНЫМ ЯМР СПЕКТРОСКОПИИ

**Гайнов Р.Р.¹ (g_ramil@mail.ru), Вагизов Ф.Г.¹, Пеньков И.Н.¹,
Дуглав А.В.¹, Клековкина В.В.¹, Голованевский В.А.², Мозгова Н.Н.³,
Прошин Ю.Н.¹**

¹ Казанское отделение. Казанский (Приволжский) федеральный университет

² Технологический университет Кертина, Австралия

³ Московское отделение. ИГЕМ РАН

LOW-TEMPERATURE EFFECTS IN CHALCOPYRITE CuFeS_2 ACCORDING
TO NMR SPECTROSCOPY

**Gainov R.R.¹ (g_ramil@mail.ru), Vagizov V.G.¹, Pen'kov I.N.¹,
Dooglav A.V.¹, Klekovkina V.V.¹, Golovanevskiy V.A.², Mozgova N.N.³,
Proshin Yu.N.¹**

¹ Kazan branch. Kazan Federal University

² Curtin University of Technology, Australia

³ Moscow branch. IGEM RAS

Халькопирит CuFeS_2 представляет собой антиферромагнитный полупроводник с температурой Нееля 823 К. Несмотря на множество работ, посвященных исследованиям электронной структуры и магнитным свойствам этого широко известного минерала, многие его свойства, особенно низкотемпературные, остаются все еще неясными. По одним данным его зонная структура имеет бесщелевой характер (Kradinova et al., 1993), по другим данным CuFeS_2 является моттовским изолятором (Voekema et al., 2004). Известно, что CuFeS_2 демонстрируют необычные свойства при низких температурах (Попов и др., 2011). Действительно, магнитная восприимчивость при температурах ниже 100 К показывает резкий рост, при этом по данным нейтронной дифракции при температурах около 50 К фиксируется магнитный фазовый переход (Woolley et al. 1996). Низкотемпературные аномалии проявляются также при изучении как электрического сопротивления, так магнетосопротивления (Попов и др., 2011). Последние магнитометрические исследования халькопирита также подтверждают существование низкотемпературного фазового перехода (Knight et al., 2011). Кроме того, ранние Мессбауэровские исследования указывают на трехвалентное состояние железа (Voekema et al., 2004), однако экспериментальная величина магнитного момента железа равна $3.85 \mu\text{B}$ (Woolley et al. 1996), что значительно меньше величины $\mu\text{Fe} = 5\mu\text{B}$, имеющего места быть для чистого трехвалентного состояния Fe^{3+} .

Данный доклад посвящен анализу недавно полученных методом ядерного магнитного резонанса (ЯМР) меди сведений касательно низкотемпературных эффектов в халькопирите в контексте имеющихся

литературных источников, в частности, по Мессбауэровской спектроскопии. Из сравнения следует, что существующие аномалии при температуре около 50 К, скорее всего, связаны с фазовым переходом не первого, а второго рода. Анализ указывает также на существование в халькопирите низкотемпературных флуктуаций внутренних локальных полей. На основе выявленных результатов обсуждаются природа низкотемпературного фазового перехода, а также валентное состояние ионов железа и меди.

Boekema C., Krupski A.M., Varasteh M., Parvin K., Til F. van, Wonde F. van der, Sawatzky G.A. // J. Magn. Magn. Mater. 272–276, 559 (2004).

Knight K.S. et al. // Can. Mineral. 49, 1015 (2011)

Kradinova L.V., Polubotko A.M., Popov V.V., Prochukhan V.D., Rud Yu.V., Skorukin V.E. // Semicond. Sci. Technol. 8, 1616 (1993).

Woolley J.C., Lamarche A.-M., Lamarche G., Quintero M., Swainson I.P., Holden T.M. // J. Magn. Magn. Mater. 162, 347 (1996).

Понов В.В., Кужаев С.А., Рудь Ю.В. // Ф.Т.Т. 53(1), 70 (2011).