

05,07

## Приближение среднего поля для системы триплетных бозонов в никелатах

© В.С. Рюмшин<sup>1</sup>, С.В. Нужин<sup>1</sup>, Ю.Д. Панов<sup>1</sup>, А.С. Москвин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт естественных наук и математики, Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup> Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

E-mail: vitaliy.riumshin@urfu.ru

Поступила в Редакцию 18 апреля 2024 г.

В окончательной редакции 18 апреля 2024 г.

Принята к публикации 8 мая 2024 г.

Редкоземельные ортоникелаты  $RNiO_3$  являются ян-теллеровскими магнетиками, неустойчивыми относительно реакции анти-ян-теллеровского диспропорционирования с формированием системы, эквивалентной системе эффективных спин-триплетных композитных бозонов, движущихся в немагнитной матрице. В рамках двухподрешеточного приближения нами развита теория среднего поля для модельного никелата с конкуренцией фаз зарядового упорядочения, антиферромагнитного изолятора и спин-триплетного сверхпроводника, построены фазовые диаграммы с учетом фазового расслоения.

**Ключевые слова:** редкоземельные ортоникелаты, приближение среднего поля, фазовое расслоение.

DOI: 10.61011/FTT.2024.07.58371.13NN

### 1. Введение

Ортоникелаты  $RNiO_3$  ( $R$  — редкая земля или иттрий  $Y$ ) многие годы являются объектом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований [1]. Фазовая диаграмма большинства редкоземельных никелатов включает металлическую неупорядоченную фазу, диэлектрическую фазу с зарядовым упорядочением и фазу с антиферромагнитным упорядочением [2]. Эти системы демонстрируют различные особенности физических свойств, включая переходы металл-изолятор, необычное поведение проводимости и неколлинеарные магнитные структуры. Исключением является  $LaNiO_3$ , который при понижении температуры переходит в антиферромагнитную фазу, при этом оставаясь металлическим [3]. В ряде работ сообщалось об обнаружении области сосуществования фаз (или фазового расслоения) в никелатах  $Pg$  и  $Nd$  [2,4,5]. К сожалению, до сих пор в литературе нет единого мнения о механизмах формирования электронной структуры и фазовых диаграмм никелатов.

Нами рассмотрена простая модель, в рамках которой ортоникелаты  $RNiO_3$  рассматриваются как ян-теллеровские магнетики, неустойчивые относительно реакции анти-ян-теллеровского диспропорционирования с формированием системы, эквивалентной системе эффективных спин-триплетных композитных бозонов, движущихся в немагнитной решетке [6–9]. В двухподрешеточном приближении нами развита теория среднего поля для модельного никелата с конкуренцией фаз зарядового упорядочения, антиферромагнитного изолятора и спин-триплетного сверхпроводника, построены фазовые диаграммы с учетом фазового расслоения.

Статья организована следующим образом. В разделе 2 сформулирована модель спин-триплетных бозо-

нов и приведены основные соотношения приближения среднего поля, используемого для построения фазовых диаграмм. Основные типы фазовых диаграмм модельного никелата и их обсуждение приведены в разделе 3. Краткие выводы сформулированы в разделе 4.

### 2. Уравнения среднего поля для модели триплетных бозонов

Формально ион  $Ni^{3+}$  в низкоспиновой конфигурации  $t_{2g}^6 e_g^1$  октаэдра  $NiO_6$  образует ян-теллеровский центр с основным орбитальным дублетом  ${}^2E$ . Как и во многих других ян-теллеровских магнетиках [9] орбитальное вырождение в ортоникелатах  $RNiO_3$  снимается не за счет локального/кооперативного эффекта Яна-Теллера, а за счет альтернативного механизма анти-ян-теллеровского диспропорционирования [6–9]. В результате этого электронная структура ортоникелата становится формально эквивалентной системе локальных композитных спин-триплетных бозонов с конфигурацией  $e_g^{2,3} A_{2g}$ , движущихся в решетке немагнитных центров с конфигурацией  $t_{2g}^6$ . Оставляя ведущие слагаемые из эффективного гамильтониана общего вида для такой системы [9], запишем упрощенный гамильтониан модельного никелата с простой кубической решеткой в следующем виде:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle \gamma} (\hat{B}_i^{\gamma+} \hat{B}_j^{\gamma} + \hat{B}_j^{\gamma+} \hat{B}_i^{\gamma}) + V \sum_{\langle ij \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j + J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j. \quad (1)$$

Здесь  $t$  — интеграл переноса спин-триплетного бозона с сохранением проекции спина  $\gamma = \pm 1, 0$ ,  $V$  — параметр межцентрового заряд-зарядового взаимодействия,  $J$  —

обменный интеграл. Суммирование проводится только по ближайшим соседям в простой кубической решетке. Из других наиболее существенных упрощений отметим отсутствие слагаемых, описывающих взаимодействие с решеткой, в частности с так называемой „дыхательной“ (breathing) модой. Отметим, что фактически гамильтониан (1) является обобщением известного гамильтониана модели бесспиновых локальных (hard-core) бозонов [10] на случай спин-триплетных бозонов.

Базис состояний на узле включает 4 состояния  $|n, S\gamma\rangle$ , где  $n$  — число бозонов на узле,  $S$  и  $\gamma$  — значение спина и его  $z$ -проекции:  $|1, 11\rangle, |1, 10\rangle, |1, 1-1\rangle, |0, 00\rangle$ . В этом базисе операторы на  $i$ -м узле будут представляться матрицами  $4 \times 4$ . Оператор  $\hat{n}_i$  является проектором на подпространство с  $n = 1$ , и операторы спина также действуют в этом подпространстве, например

$$\hat{n}_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_{zi} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Операторы  $\hat{B}_i^{\gamma+}$  описывают рождение бозона в состоянии  $|1, 1\gamma\rangle$ , например

$$\hat{B}_i^{1+} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Удобно также ввести декартовы компоненты этих операторов с помощью соотношений  $\hat{B}_{xi}^\gamma = \frac{1}{2}(\hat{B}_i^{\gamma+} + B_i^\gamma)$ ,  $\hat{B}_{yi}^\gamma = -\frac{i}{2}(\hat{B}_i^{\gamma+} - B_i^\gamma)$ , и использовать векторные операторы  $\hat{\mathbf{B}}_i^\gamma = (\hat{B}_{xi}^\gamma, \hat{B}_{yi}^\gamma)$ .

Для формулировки приближения среднего поля мы используем неравенство Боголюбова для оценки большого потенциала системы

$$\Omega(\hat{H}) \leq \Omega = \Psi_0 + \langle \hat{H} - \mu \hat{N}_b - \hat{H}_0 \rangle, \quad (4)$$

$$\Psi_0 = -\frac{1}{\beta} \ln(\text{Tr} e^{-\beta \hat{H}_0}),$$

где  $\mu$  — химический потенциал,  $\beta = 1/k_B T$  (далее мы полагаем  $k_B = 1$ ),  $\hat{N}_b = \sum_i \hat{n}_i$  — оператор полного числа бозонов, и среднее вычисляется по состояниям идеальной системы с гамильтонианом

$$\hat{H}_0 = -\sum_{i,\gamma} \mathbf{f}_{\lambda(i)}^\gamma \hat{\mathbf{B}}_i^\gamma - \sum_i \varphi_{\lambda(i)} \hat{n}_i - \sum_i \mathbf{g}_{\lambda(i)} \hat{\sigma}_i. \quad (5)$$

Мы используем двухподрешеточное приближение, и здесь для двух взаимопроникающих подрешеток  $A$  и  $B$  простой кубической решетки введен индекс  $\lambda(i)$ . Молекулярные поля  $f_{\alpha\lambda}^\gamma$ ,  $\varphi_\lambda$ ,  $g_{\xi\lambda}$  ( $\alpha = x, y, \gamma = \pm 1, 0$ ,  $\xi = x, y, z, \lambda = A, B$ ), являются вариационными параметрами, позволяющими найти наилучшую оценку для

$\Omega(\hat{H})$ . Выражение для  $\omega = \Omega/N$ , где  $N$  — число узлов, имеет вид

$$\omega = \frac{\Psi_0}{N} - zt \sum_\gamma \mathbf{B}_A^\gamma \mathbf{B}_B^\gamma + \frac{z}{2} V n_A n_B + \frac{z}{2} J \mathbf{S}_A \mathbf{S}_B + \frac{1}{2} \sum_\lambda \left[ \sum_\gamma \mathbf{f}_\lambda^\gamma \mathbf{B}_\lambda^\gamma + (\varphi_\lambda - \mu) n_\lambda + \mathbf{g}_\lambda \mathbf{S}_\lambda \right]. \quad (6)$$

Здесь  $z$  — число ближайших соседей ( $z = 6$  для простой кубической решетки), а средние  $\mathbf{B}_{\lambda(i)}^\gamma = \langle \hat{\mathbf{B}}_i^\gamma \rangle$ ,  $n_{\lambda(i)} = \langle \hat{n}_i \rangle$ , и  $\mathbf{S}_{\lambda(i)} = \langle \hat{\sigma}_i \rangle$  выражаются через производные по соответствующим молекулярным полям, например  $n_\lambda = -\frac{2}{N} \frac{\partial \Psi_0}{\partial \varphi_\lambda}$ . Минимизируя  $\omega$ , получим систему уравнений для молекулярных полей

$$\begin{cases} \mathbf{f}_\lambda^\gamma = 2zt \mathbf{B}_\lambda^\gamma, \\ \varphi_\lambda = \mu - zV n_\lambda, \\ \mathbf{g}_\lambda = -zJ \mathbf{S}_\lambda. \end{cases} \quad (7)$$

Для индекса  $\lambda$  черта сверху означает подрешетку, дополнительную к данной:  $\bar{A} = B$ ,  $\bar{B} = A$ . Уравнения (7) необходимо дополнить условием на концентрацию бозонов  $n = \langle \hat{N}_b \rangle / N$ , которое позволяет исключить химический потенциал  $\mu$ :  $n_A + n_B = 2n$ .

Уравнения (7) при высокой температуре имеют решения, описывающие неупорядоченную (NO) фазу, в которой  $\mathbf{B}_\lambda^\gamma = 0$ ,  $\mathbf{S}_\lambda = 0$  и  $n_A = n_B = n$ . В этом случае можно записать аналитическое выражение для свободной энергии в расчете на узел решетки

$$f = \frac{z}{2} V n^2 - \frac{1}{\beta} [n \ln 3 - n \ln n - (1-n) \ln(1-n)]. \quad (8)$$

Выражение в квадратных скобках определяет энтропию NO-фазы, которая имеет максимум, равный  $2 \ln 2$  при  $n = 3/4$ .

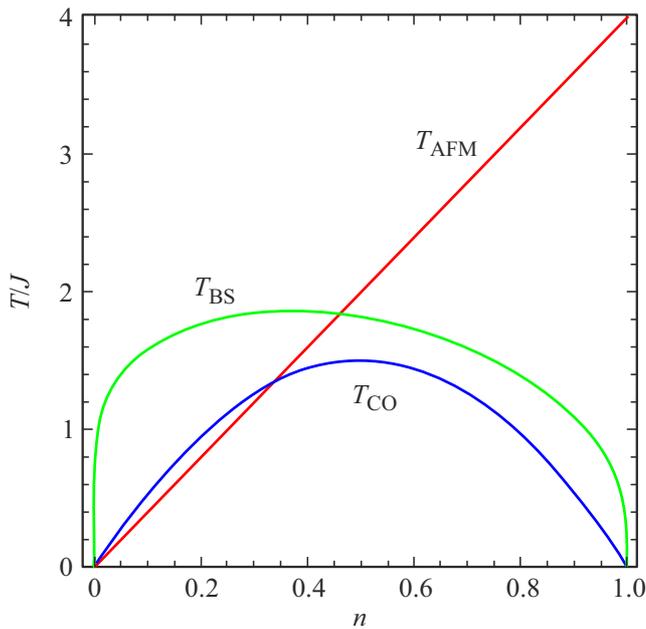
Условия неустойчивости минимума большого потенциала для NO-фазы относительно вариаций полей  $\varphi_\lambda$ ,  $\mathbf{g}_\lambda$  или  $\mathbf{f}_\lambda^\gamma$  приводят к выражениям для критических температур перехода в зарядово-упорядоченную (CO) фазу с  $x = (n_A - n_B)/2 \neq 0$ , антиферромагнитную (AFM) фазу с  $\mathbf{g}_A = -\mathbf{g}_B \neq 0$  или бозонную сверхтекучую (BS) фазу с  $\mathbf{B}_\lambda^\gamma \neq 0$  соответственно

$$T_{CO} = zVn(1-n), \quad (9)$$

$$T_{BS} = \frac{4}{3} zt \left( n - \frac{3}{4} \right) \left[ \ln \frac{n}{3(1-n)} \right]^{-1}, \quad (10)$$

$$T_{AFM} = \frac{2}{3} zJn. \quad (11)$$

Зависимости критических температур от концентрации бозонов показаны на рис. 1. Выражение (9) для  $T_{CO}$  совпадает с хорошо известным выражением для критической температуры зарядового упорядочения в модели локальных (hard-core) бозонов [10].



**Рис. 1.** Концентрационные зависимости критических температур (9–11) при  $z = 6$ ,  $V = 1$ ,  $J = 1$ ,  $t = 1$ .

Отличие выражения (10) для  $T_{BS}$  от критической температуры перехода в сверхтекучее состояние [10] связано со спиновым вырождением для бозонов в нашей модели. Полученная линейная концентрационная зависимость (11) для критической температуры антиферромагнитного упорядочения является характерной, как показывает сравнение с результатами для других псевдоспиновых моделей [11,12].

При температурах ниже критических, система уравнений (7) имеет решения, которые могут быть названы чистыми фазами, когда отличен от нуля только один параметр порядка. Для СО-фазы остаются уравнения для молекулярных полей  $\varphi_\lambda$ ,  $\lambda = A, B$ :

$$\varphi_\lambda = \mu - zV \frac{3}{3 + e^{-\beta\varphi_\lambda}}. \quad (12)$$

Для AFM-фазы, с учетом изотропности обменного взаимодействия, достаточно рассмотреть уравнения для молекулярных полей  $\varphi = \varphi_A = \varphi_B$  и  $g = g_{zA} = -g_{zB}$ :

$$\begin{cases} \varphi = \mu - zV \frac{1 + 2 \operatorname{ch}(\beta g)}{1 + 2 \operatorname{ch}(\beta g) + e^{-\beta\varphi}}, \\ g = zJ \frac{2 \operatorname{sh}(\beta g)}{1 + 2 \operatorname{ch}(\beta g) + e^{-\beta\varphi}}. \end{cases} \quad (13)$$

Для BS-фазы можно воспользоваться тем, что перенос бозонов в гамильтониане (1) изотропен и не зависит от проекции спина. В этом случае, достаточно найти молекулярные поля  $\varphi = \varphi_A = \varphi_B$  и  $f = f_{xA}^\gamma = f_{xB}^\gamma$ ,  $\gamma = A, B$ , полагая остальные поля равными нулю. В этом случае

система уравнений (7) примет вид

$$\begin{cases} \varphi = \mu - zV \frac{\phi \left[ 2e^{\frac{\beta}{2}\varphi} + \operatorname{ch}\left(\frac{\beta}{2}\varphi\right) \right] + \varphi \operatorname{sh}\left(\frac{\beta}{2}\varphi\right)}{2\phi \left[ e^{\frac{\beta}{2}\varphi} + \operatorname{ch}\left(\frac{\beta}{2}\varphi\right) \right]}, \\ 1 = zJ \frac{\operatorname{sh}\left(\frac{\beta}{2}\varphi\right)}{\phi \left[ e^{\frac{\beta}{2}\varphi} + \operatorname{ch}\left(\frac{\beta}{2}\varphi\right) \right]}, \end{cases} \quad (14)$$

где  $\phi = \sqrt{\varphi^2 + 3f^2}$ . Важно отметить, что найденные решения для чистых фаз необходимо проверять на устойчивость.

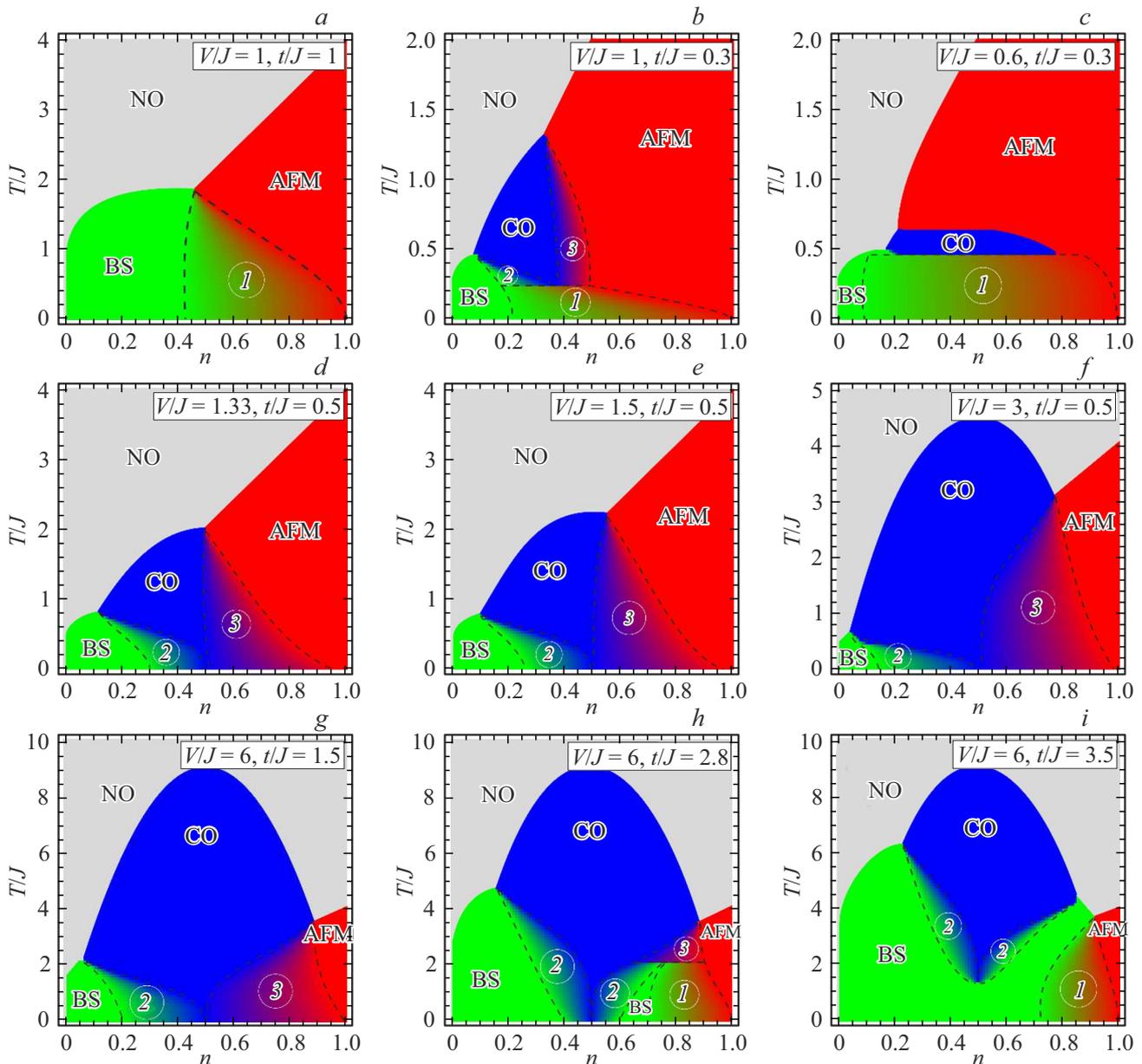
Вообще говоря, помимо чистых фаз, при определенных условиях возможна реализация решений для смешанных фаз, когда отличны от нуля более одного параметра порядка. Эти решения аналогичны фазе сверхтекучего твердого тела (supersolid) в модели локальных бозонов [10]. Исследование свойств и условий существования этих типов решений является достаточно трудоемкой задачей. Однако, наши предварительные результаты показывают, что свободная энергия смешанных фаз в рассматриваемой модели при заданном наборе параметров оказывается выше, чем свободная энергия состояния с фазовым расслоением чистых фаз. Эта ситуация полностью аналогична результатам для модели локальных бозонов [13]. Области фазового расслоения на фазовой диаграмме определяются при помощи построения Максвелла [14]: при заданной температуре граничные концентрации  $n_i$ , соответствующие чистым фазам  $i = 1, 2$ , находятся из концентрационных зависимостей химических потенциалов фаз:  $\mu_i(n, T) = \mu^*$ , где  $\mu^*$  — точка пересечения удельных больших потенциалов фаз,  $\omega_1(\mu^*, T) = \omega_2(\mu^*, T)$ . Доли  $m_i$  каждой фазы задаются следующими отношениями:

$$m_1 = \frac{n_2 - n}{n_2 - n_1}, \quad m_2 = \frac{n - n_1}{n_2 - n_1}, \quad n_1 \leq n \leq n_2. \quad (15)$$

### 3. Результаты

Типичные фазовые диаграммы для модели спин-триплетных бозонов с гамильтонианом (1), полученные с учетом описанных выше приближений, приведены на рис. 2.

При  $V/J = 1$ ,  $t/J = 1$  (см. рис. 2, *a*) на фазовой диаграмме есть области фаз BS и AFM, которые разделены областью фазового расслоения BS+AFM, обозначенной цифрой 1 в кружочке. Эта область начинается в трикритической точке, где пересекаются критические температуры фаз BS и AFM, и в основном состоянии занимает диапазон  $0.42 < n < 1$ . Уменьшение интеграла переноса до значения  $t/J = 0.3$  (см. рис. 2, *b*) приводит к пропорциональному уменьшению  $T_{BS}$ , и на фазовой диаграмме появляется область СО-фазы, которая существует только при конечных температурах. Две новые



**Рис. 2.** Фазовые диаграммы модели триплетных бозонов с гамильтонианом (1) в приближении среднего поля. Штриховые линии показывают границы областей фазового расслоения, обозначенные цифрами: 1 — BS+AFM, 2 — BS+CO, 3 — CO+AFM.

трикритические точки служат началом областей фазового расслоения BS+CO и CO+AFM (обозначены цифрами 2 и 3 в кружочке), которые также реализуются только при конечных температурах. В основном состоянии реализуется фазовое расслоение BS+AFM в диапазоне  $0.22 < n < 1$ . Уменьшение параметра заряд-зарядового взаимодействия до значения  $V/J = 0.6$  (см. рис. 2, *c*) приводит к сокращению области CO-фазы и исчезновению областей фазового расслоения BS+CO и CO+AFM, а область BS+AFM, напротив, увеличивается, и в основном состоянии занимает диапазон  $0.1 < n < 1$ .

При  $V/J = 1.33$ ,  $t/J = 0.5$  (см. рис. 2, *d*) трикритическая точка на пересечении  $T_{CO}$  и  $T_{AFM}$  соответствует

$n = 0.5$ . В основном состоянии в точке  $n = 0.5$  реализуется CO-фаза, но граница области фазового расслоения CO+AFM при конечных температурах проходит немного левее этой точки. В основном состоянии области BS+CO и CO+AFM занимают диапазоны  $0.3 < n < 0.5$  и  $0.5 < n < 1$  соответственно. Увеличение параметра  $V$ , показанное на рис. 2, *e* и *f*, приводит к пропорциональному увеличению  $T_{CO}$  и смещению трикритических точек, однако в основном состоянии область CO+AFM остается прежней,  $0.5 < n < 1$ , но происходит перераспределение диапазонов BS и BS+CO в диапазоне  $0 < n < 0.5$ .

Последовательное изменение фазовой диаграммы при  $V/J = 6$  с ростом интеграла переноса от  $t/J = 1.5$  до  $t/J = 3.5$  показано на рис. 2,  $g, h, i$ . При  $t/J = 2.8$  область BS фазы и области BS+CO и BS+AFM появляются справа от точки  $n = 0.5$ , однако в самой этой точке в основном состоянии реализуется CO-фаза. Далее, при  $t/J = 3.5$  CO-фаза существует только при конечных температурах, а в основном состоянии реализуются только фаза BS и фазовое расслоение BS+AFM.

Можно сформулировать несколько общих результатов для основного состояния рассматриваемой модели в рамках использованного нами приближения. В области малых значений  $n$  основным состоянием системы является BS-фаза, фаза CO реализуется для достаточно больших значений параметра  $V$  только при  $n = 0.5$ , а фаза AFM — всегда только при  $n = 1$ . Конечные диапазоны значений  $n$  могут соответствовать фазовым состояниям BS, BS+AFM, BS+CO и CO+AFM.

Отметим также, что в использованном нами приближении не рассматривались решения для смешанных фаз, типа сверхтекучего твердого тела (supersolid) и их аналогов, когда отличны от нуля более одного параметра порядка. Нахождение этих решений может служить отдельной темой исследований, однако, наши предварительные результаты показывают, что, как и в хорошо изученной модели бесспиновых локальных бозонов [13], свободная энергия смешанных фаз в нашей модели оказывается выше, чем свободная энергия состояния с фазовым расслоением чистых фаз.

## 4. Заключение

В рамках приближения среднего поля нами рассмотрена простая модель диспропорционированной фазы ортоникелатов  $RNiO_3$ , гамильтониан которой эквивалентен гамильтониану модели спин-триплетных локальных бозонов на немагнитной решетке. Построены фазовые диаграммы сосуществования „чистых“, фаз с единственным отличным от нуля параметром порядка — фазы немагнитного зарядового упорядочения, антиферромагнитной фазы и фазы спин-триплетного бозонного сверхпроводника. Показан универсальный характер явления фазового расслоения.

## Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, проект FEUZ-2023-0017.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] M.L. Medarde. *J. Phys. Condens. Matter* **9**, 8, 1679 (1997).
- [2] D.J. Gawryluk, Y.M. Klein, T. Shang, D. Sheptyakov, L. Keller, N. Casati, P. Lacorre, M.T. Fernandez-Diaz, J. Rodriguez-Carvajal, M. Medarde. *Phys. Rev. B* **100**, 20, 205137 (2019).
- [3] H. Guo, Z.W. Li, L. Zhao, Z. Hu, C.F. Chang, C.-Y. Kuo, W. Schmidt, A. Piovano, T.W. Pi, O. Sobolev, D.I. Khomskii, L.H. Tjeng, A.C. Komarek. *Nature Commun.* **9**, 1, 43 (2018).
- [4] K.W. Post, A.S. McLeod, M. Hepting, M. Bluschke, Y. Wang, G. Cristiani, G. Logvenov, A. Charnukha, G.X. Ni, P. Radhakrishnan, M. Minola, A. Pasupathy, A.V. Boris, E. Benckiser, K.A. Dahmen, E.W. Carlson, B. Keimer, D.N. Basov. *Nature Phys.* **14**, 10, 1056 (2018).
- [5] B. Mundet, C. Dominguez, J. Fowlie, M. Gibert, J.-M. Triscone, D.T.L. Alexander. *Nano Lett.* **21**, 6, 2436 (2021).
- [6] I.I. Mazin, D.I. Khomskii, R. Lengsdorf, J.A. Alonso, W.G. Marshall, R.M. Ibberson, A. Podlesnyak, M.J. Martinez-Lope, M.M. Abd-Elmeguid. *Phys. Rev. Lett.* **98**, 17, 176406 (2007).
- [7] A.S. Moskvina. *J. Phys. Condens. Matter* **25**, 8, 085601 (2013).
- [8] A.C. Москвин, Ю.Д. Панов. *ФТТ* **65**, 7, 1129 (2023) [A.S. Moskvina, Y.D. Panov. *Phys. Solid State* **65**, 7, 707 (2023)].
- [9] A.S. Moskvina. *Magnetochemistry* **9**, 1 (2023).
- [10] R. Micnas, J. Ranninger, S. Robaszkiewicz. *Rev. Mod. Phys.* **62**, 1, 113 (1990).
- [11] Ю.Д. Панов, В.А. Улитко, К.С. Будрин, Д.Н. Ясинская, А.А. Чиков. *ФТТ* **61**, 5, 822 (2019) [Y.D. Panov, V.A. Ulitko, K.S. Budrin, D.N. Yasinskaya, A.A. Chikov. *Phys. Solid State* **61**, 707 (2019)].
- [12] Y.D. Panov. *Phys. Met. Metallogr.* **120**, 1276 (2019).
- [13] K. Kapcia. *J. Supercond. Nov. Magn.* **26**, 2647 (2013).
- [14] K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, R. Micnas. *J. Phys. Condens. Matter* **26**, 21, 215601 (2012).

Редактор Т.Н. Василевская