

2 - Физика конденсированного состояния вещества

Аверкиев Игорь Кронидович, аспирант 2 года обучения
Ижевск, Удмуртский ФИЦ УрО РАН, Физико-технический институт
Исследование электронной и локальной атомной структуры соединений TiH_2 и Ti_2AlC методами рентгеноэлектронной и электронной спектроскопии
Бакиева Ольга Ринатовна, к.ф.-м.н.
e-mail: averkiev1997@mail.ru стр. 13

Астафьев Павел Андреевич, 3 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Фильтрация АЧХ при исследовании свойств функциональных материалов на микрополосковой линии в СВЧ-диапазоне
Резниченко Лариса Андреевна, д.ф.-м.н.
e-mail: l.b.e.9.w.4.a.9.p@yandex.ru стр. 14

Волков Дмитрий Вячеславович, н.с.
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, Научно-исследовательский институт физики
Структура, диэлектрические и магнитные свойства систем твердых растворов на основе манганита лантана- висмута, модифицированного оксидом ниобия
Вербенко Илья Александрович, д.ф.-м.н.
e-mail: dvvolkov@sfedu.ru стр. 15

Глазунова Екатерина Викторовна, н.с.
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, НИИ физики
Влияние механоактивации на структуру и свойства твердого раствора $Bi_{0.95}Pb_{0.05}Fe_{0.98}Nb_{0.012}W_{0.008}O_3$
Вербенко Илья Александрович, д.ф.-м.н.
e-mail: kate93g@mail.ru стр. 16

Дмитриев Виктор Олегович, аспирант 2 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, Физический
Особенности электронной структуры $MeOx$ /МУНТ
Яловега Галина Эдуардовна, д.ф.-м.н.
e-mail: ydmitriev@sfedu.ru стр. 18

Ерагер Ксения Романовна, аспирант
Челябинск, Челябинский государственный университет, физический
Ab initio исследование мартенситной фазы модулированных структур сплавов Ni-Mn-In с избытком Mn
Соколовский Владимир Владимирович, д.ф.-м.н.
e-mail: eragerk@rambler.ru стр. 19

Жидель Карина Михайловна, 3 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, НИИ физики
Исследование анизотропии в пленках $Sr_{0.61}Ba_{0.39}Nb_2O_6$
Павленко Анатолий Владимирович, д.ф.-м.н.
e-mail: karinagidele@gmail.com стр. 20

Максимов Глеб Сергеевич, 5 курс
Симферополь, Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского, Физико-технический институт
Особые участки теплового расширения эпитаксиальной пленки со структурой
Максимова Елена Михайловна, к.ф.-м.н.
e-mail: neondreamer00@gmail.com стр. 21

Меренцов Александр Ильич, с.н.с.
Екатеринбург, Институт физики металлов УрО РАН, лаб. электрических явлений
Формирование структурных фрагментов в дихалькогенидах титана, замещённых 3d-переходными металлами
e-mail: Alexander.Merentsov@urfu.ru стр. 22

Мойса Максим Олегович, 3 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, НИИ физики
Электрофизические характеристики твёрдых растворов системы PZT-CdNb₂O₆
Резниченко Лариса Андреевна, д.ф.-м.н.
e-mail: moysa@sfedu.ru стр. 23

Никулин Андрей Алексеевич, 4 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Институт естественных наук и математики
Электрофизические свойства кремния при высоких давлениях
Тебеньков Александр Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: eternalenvy123@gmail.com стр. 24

Поляков Савелий Викторович, 2 курс
Кемерово, Кемеровский государственный университет, Институт фундаментальных наук
Электронная структура и химическая связь в BeAP₂ (A=C, Si)
Гордиенко Алексей Болеславович, д.ф.-м.н.
e-mail: savelij.polyakov@mail.ru стр. 25

Раев Андрей Александрович, аспирант 1 года обучения
Челябинск, Челябинский государственный университет, физический
Влияние давления в системе сплавов Гейслера Ni₂MnX (X=Ga, In, Sn, Sb)
Соколовский Владимир Владимирович, д.ф.-м.н.
e-mail: landrew637@gmail.com стр. 27

Саносян Артур Азатович, аспирант 3 курса обучения
Челябинск, Челябинский государственный университет, физический
Исследование из первых принципов структурных свойств сплавов Гейслера на основе Co₂Ni_{1+x}Z_{1-x} (Z=Al, Ga, In, Sn)
Соколовский Владимир Владимирович, д.ф.-м.н.
e-mail: arthursanosyan@mail.ru стр. 28

Сафаргалиев Данир Ильдарович, 3 курс
Уфа, Башкирский государственный университет, Физико-технический институт
Расчет зонной структуры AgCrS₂
Давлетшина Алиса Данисовна, к.ф.-м.н.
e-mail: davletshinaalisa@rambler.ru стр. 29

Соломенникова Александра Станиславовна, зав. каб.
Ижевск, Удмуртский государственный университет, Институт математики и информационных технологий
Пленки диоксида олова, полученные ВЧ-магнетронным напылением с ионно-лучевой обработкой
Крылов Петр Николаевич, к.ф.-м.н.
e-mail: solomennikova@udman.ru стр. 30

Тимофеев Вячеслав Сергеевич, магистрант 2 года обучения
Кемерово, Кемеровский государственный университет, Институт фундаментальных наук
Электронное строение и динамика решетки Be₂NCl
Гордиенко Алексей Болеславович, д.ф.-м.н.
e-mail: slava.timofeev.mail@gmail.com стр. 31

Хаметова Элина Фанилевна, 1 курс
Ижевск, Удмуртский государственный университет, Институт математики и физики
Разработка метода решения задачи перекрывающихся диапазонов в EXELFS спектроскопии
Бакиева Ольга Ринатовна, к.ф.-м.н.
e-mail: elinaphanilevna851@gmail.com стр. 32

Исследование электронной и локальной атомной структуры соединений TiH₂ и Ti₂AlC методами рентгеноэлектронной и электронной спектроскопии

Аверкиев Игорь Кронидович

Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения РАН

Бакиева Ольга Ринатовна, к.ф.-м.н.

E-mail averkiev1997@mail.ru

В сверхтонких поверхностных слоях протекают многие сложные физико-химические процессы, без исследования которых невозможно получить полную картину свойств. Поэтому для анализа химического состава и типа химических связей широко востребована рентгено-фотоэлектронная спектроскопия (XPS - X-ray photoelectron spectroscopy). Уменьшение размеров наноструктур, синтез слоистых структур на основе двумерных материалов демонстрирует необходимость знания не только типа химической связи, но и анализа электронной структуры сильно локализованных областей. В этом отношении стандартные методы, такие как ультрафиолетовая фотоэлектронная спектроскопия (UPS - Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy), не обеспечивают пространственного разрешения, необходимого для исследования материала в нанометровом масштабе. Данную проблему позволяет решить электронная спектроскопия, а именно спектроскопия потерь энергии валентных электронов (VEELS – Valence Electron Energy Loss Spectroscopy), которая реализована в области низких потерь энергии электронов (~50 эВ) и предоставляет информацию, аналогичную ультрафиолетовой фотоэлектронной спектроскопии, и содержит сведения о зонной структуре. Кроме характерных пиков плазменных потерь, данная область отображает плотность незанятых состояний над уровнем Ферми [1]. Кроме этого в электронной спектроскопии реализован метод анализа протяженных тонких структур энергетических потерь энергии электронов (EXELFS – Extended Electron Energy Loss Fine Structure). Эта структура формируется за счет возбуждения внутреннего уровня атома вещества, и поскольку природа формирования аналогична XAFS спектрам, она содержит информацию о параметрах локальной атомной структуры исследуемого объекта – длины химической связи, координационные числа и параметры дисперсии межатомных расстояний. [2].

В настоящей работе в качестве объектов исследования выступали соединения TiH₂ и Ti₂AlC. Выбор данных объектов исследования обусловлен тем, что эти соединения являются прекурсорами для получения двухслойных материалов, MXenes (соединения с общей формулой M_{n+1}X_nT_x, где M – переходный металл, X – С и/или N, T_x – функциональная группа краевых и поверхностных атомов, которые обычно состоят из –OH, =O, –F.). В свою очередь, выбор прекурсоров в значительной степени влияет на свойства конечного продукта, поэтому исследование физико-химических свойств данных соединений является важной задачей.

В ходе исследований были получены спектры энергетических потерь электронов в режиме обратного отражения от поверхности образца в диапазоне до 600 эВ в шкале потерь энергии вторичного электрона (рис. 1).

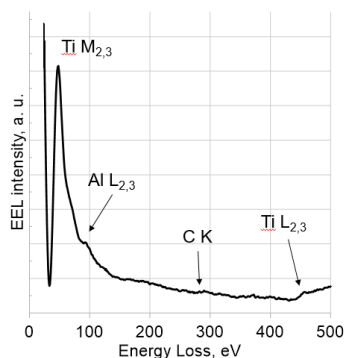


рис. 1. Экспериментальный спектр энергетических потерь электронов

Проведен количественный анализ EXELFS спектров и определены изменения параметров локальной атомной структуры. Анализ области малых потерь энергии электронов позволил определить изменения в электронной структуре. Определены энергии поверхностного и объемного плазмона, также определены энергии межзонных переходов поверхностных групп. В результате было сделано предположение, что атомы титана образуют октаэдрическое окружение вокруг атомов углерода и атомов алюминия. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ №121030100002-0

Список публикаций:

[1] Herrera-Pérez G., Ornelas-Gutiérrez C., Reyes-Montero A. et al. // *Micron*. 2021. V. 149. P. 103124.

[2] Averkiev I. K., Bakieva O. R., Nemtsova O. M. et al. // *Applied Surface Science*. 2021. V. 539. P. 148243

Фильтрация АЧХ при исследовании свойств функциональных материалов на микрополосковой линии в СВЧ-диапазоне

Астафьев Павел Андреевич

Павелко Алексей Александрович

Южный федеральный университет

Резниченко Лариса Андреевна, д.ф.-м.н.

l.b.e.9.w.4.a.9.p@yandex.ru

Исследования электродинамических свойств функциональных материалов в СВЧ-диапазоне активно ведутся уже в течение нескольких десятилетий. Много внимания в этой области уделяется исследованию сегнетоэлектриков, обладающих высокими значениями относительной диэлектрической проницаемости, что, в совокупности с рядом других параметров, позволяет использовать их во многих радиоэлектронных устройствах, таких как СВЧ-резонаторы, аттенюаторы и фильтры. Применение сегнетоэлектриков в СВЧ-технике позволило выполнить требование миниатюризации, предъявляемое ко всем современным радиоэлектронным компонентам [1]. Анализ рынка показывает, что в доступных для коммерческого использования резонаторах применяются сегнетоэлектрики, принадлежащие по большей части к однокомпонентным или двухкомпонентным системам, а результаты исследований многокомпонентных твердых растворов ограничиваются применениями, вероятно, в высокоточных измерительных приборах и военной технике, при этом особенности методов исследования описываются в подробностях достаточно редко. Однако развитие технологий производства керамик позволяют получать сложные многокомпонентные системы, которые, предположительно, обладают высокими показателями СВЧ-поглощения в широких диапазонах частот, что открывает перспективы их применения в аттенюаторах или радиопоглощающих покрытиях. Поэтому разработка новых и описание существующих методик изучения функциональных материалов позволит существенно ускорить исследования в этой области. Одним из наиболее простых и быстрых методов исследования СВЧ-свойств материалов является метод измерения энергии поглощения материалов на микрополосковой линии (МПЛ) [2]. Ранее с использованием данного метода нами была исследована многокомпонентная система, состоящая из сегнетоэлектрического (PbTiO_3), антисегнетоэлектрического (PbZrO_3) и релаксорного ($\text{PbNb}_{2/3}\text{Mg}_{1/3}\text{O}_3$) компонентов [3-4]. По результатам исследования стало ясно, что для описания зависимости радиопоглощающих свойств от фазового состава, помимо частотных зависимостей коэффициента поглощения, необходимо использовать некоторые обобщающие характеристики, такие как эффективная полоса поглощения. Однако для правильного расчета таких характеристик требуется проводить фильтрацию частотных зависимостей на нескольких этапах.

Целью данной работы является исследование влияния фильтрации АЧХ на конечные результаты расчета эффективной полосы поглощения материалов.

Влияние фильтрации на результаты расчетов показано на примере нескольких образцов сегнетоэлектрической керамики состава $0.98(x\text{PbTiO}_3 - y\text{PbZrO}_3 - z\text{PbNb}_{2/3}\text{Mg}_{1/3}\text{O}_3) - 0.02\text{PbGeO}_3$ с различными концентрациями PbTiO_3 . Образцы представляют собой плоские диски высотой 1 мм и диаметром 10 мм. Исследования проводились с использованием векторных анализаторов цепей P4M-18 "Микран" и P9375A "Keysight" и МПЛ с коаксиальными разъемами, имеющими предел по частоте 18 ГГц. Образцы помещались в центр МПЛ на фиксированную позицию, смещение от центрального положения составляло не более 0.5 мм.

Процедура получения значения эффективной полосы поглощения состоит из следующих основных этапов: измерение частотных зависимостей S-параметров пустой МПЛ и МПЛ с образцом; расчет частотной зависимости коэффициента поглощения по следующим формулам:

$$d = 1 - |S_{11}|^2 - |S_{12}|^2, \quad (1)$$

где d – коэффициент поглощения энергии электромагнитного излучения;

$$D_i = d_i - d_0, \quad (2)$$

где D – коэффициент поглощения i -го образца, d_i – коэффициент поглощения МПЛ с i -ым образцом, d_0 – коэффициент поглощения пустой МПЛ; расчет эффективной ширины полосы поглощения по формуле:

$$\Delta f_{\text{eff}} = \frac{1}{D_{\text{max}}} \int_0^{f_{\text{max}}} D(f) df, \quad (3)$$

где D_{max} – максимальное значение коэффициента поглощения во всем измеряемом диапазоне частот, f_{max} – максимальная частота, $D(f)$ – функция зависимости коэффициента поглощения от частоты.

Результаты измерения и расчетов показывают, что полоса частот с наиболее высоким уровнем поглощения (более -10 Дб) находится в области 10 МГц – 2,5 ГГц (рис. 1 б). Характер изменения ширины

полосы поглощения (рис. 1 c) связан с изменением диэлектрической проницаемости образцов [3]. В отсутствие фильтрации, поведение рассчитанной эффективной полосы поглощения (рис. 1 d) сильно отличается от реальных данных. После применения фильтрации рассчитанная зависимость полосы поглощения от концентрации (рис. 1 h) хорошо согласуется с изначальными результатами измерений. При этом фильтрация не сильно сказалась на зависимости S-параметров (рис. 1. a, e) и уровня поглощения (рис. 1 b, f) от частоты.

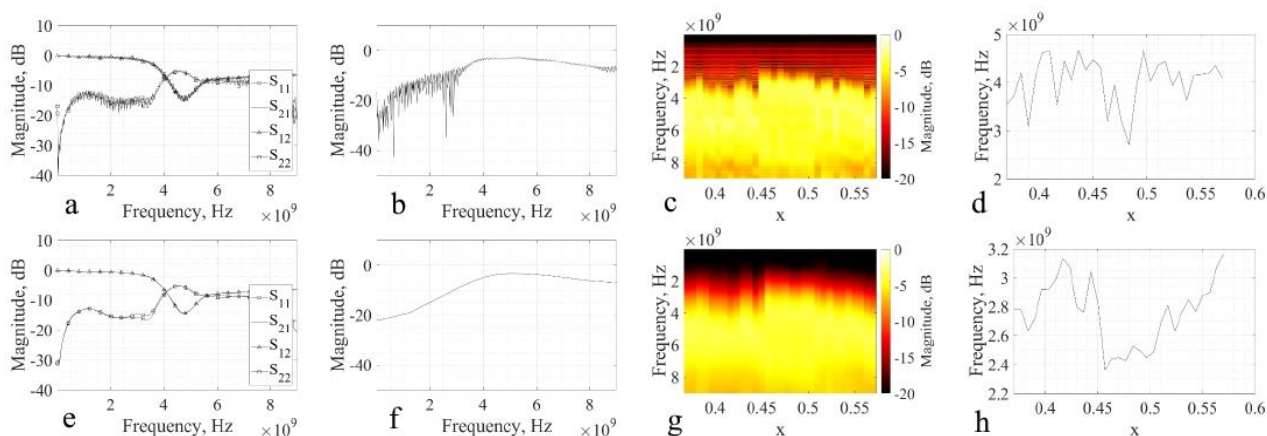


рис.1. Зависимости S-параметров (a, e) и уровня поглощения (b, f) от частоты, зависимости дисперсии уровня поглощения от концентрации $PbTiO_3$ (c, g) и зависимости эффективной ширины полосы поглощения от концентрации $PbTiO_3$ (d, h) до и после фильтрации, соответственно.

Результаты исследования показали, что для повышения точности расчета можно применять фильтрацию зависимостей S-параметров и уровня поглощения от частоты, при этом нужно проводить анализ результатов на всех этапах вычислений, чтобы не снизить фактическую точность измерений.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности, научный проект № 0852-2020-0032), (БА30110/20-3-07ИФ).

Список публикаций:

- [1] A. Tagantsev, et al., *Ferroelectric Materials for Microwave Tunable Applications*, *Journal of Electroceramics* 11, 66 (2003). DOI: 10.1023/B:JECR.0000015661.81386.e6
- [2] Рейзенкинд Я. А., Клещенков А. Б., Лерер А. М., Нойкин Ю. М. // Сравнительная экспресс-оценка потерь энергии электромагнитного поля в электрически активных материалах с помощью микрополосковой линии. Ростов-на-Дону; Таганрог: Изд-во Южного федерального ун-та. 2021. 82 с.
- [3] Астафьев П. А., Павелко А. А., Нойкин Ю. М. Электродинамические свойства твердых растворов $0.98(xPbTiO_3 - yPbZrO_3 - zPbNb_2/3Mg_1/3O_3) - 0.02PbGeO_3$ в СВЧ диапазоне // Актуальные проблемы пьезоэлектрического приборостроения. Сборник трудов III молодежной всероссийской научной конференции с международным участием (20 – 23 сентября 2021 г.). 2021. С. 167-171.
- [4] Астафьев П.А., Павелко А.А., Нойкин Ю.М. Твердые растворы $0.98(xPbTiO_3 - yPbZrO_3 - zPbNb_2/3Mg_1/3O_3) - 0.02PbGeO_3$: взаимосвязь состава и электродинамических параметров в СВЧ диапазоне // Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов. Моделирование эко-систем (Анализ современного состояния и перспективы развития): сборник трудов Десятого Международного междисциплинарного молодежного симпозиума (Ростов-на-Дону, 27–28 декабря 2021 г.): в 2 т. 2021. Т. 2. С. 26-29.

Структура, диэлектрические и магнитные свойства систем твердых растворов на основе манганита лантана- висмута, модифицированного оксидом ниобия

Волков Дмитрий Вячеславович

Павелко Алексей Александрович, Шилкина Лидия Александровна, Вербенко Илья Александрович

Южный федеральный университет

Вербенко Илья Александрович

dvolkov@sfedu.ru

В настоящее время одними из наиболее интенсивно изучаемых объектов в материаловедении являются мультиферроики, благодаря их широкому спектру возможных применений. Одной из интересных, и, в то же время, не в полной степени изученной является бинарная система твердых растворов (ТР) $Bi_{1-x}La_xMnO_{3\pm\delta}$. Однако, особенности их магнитной структуры и диэлектрических свойств не позволяют достичь необходимых для широкого практического применения значений физических характеристик. Так, к дискуссионным вопросам

относится происхождение высоких значений магнитоэлектрического эффекта [1]. Причиной их возникновения может быть комбинация магнитоэлектрического эффекта, релаксации поляризованных структур типа Максвелла-Вагнера и явлений, связанных с объемным и межслоевым магнетосопротивлением. Исследованию диэлектрических и магнитоэлектрических свойств указанных ТР препятствует другая известная проблема подобных соединений – образование примесных фаз, что наряду с переменной валентностью катионов, входящих в состав ТР, обеспечивает им высокую электропроводность, критически зависящую от условий изготовления керамик. Частичного решения указанных трудностей можно ожидать при замещении Mn^{3+}/Mn^{4+} на катион Nb^{5+} .

Таким образом, целью настоящей работы явилось установление влияние на структурные, диэлектрические и магнитные свойства состава керамик ТР $Bi_{0,5}La_{0,5}Mn_{0,98}Nb_{0,02}O_{3\pm\delta}$.

В работе методом двухстадийного твердофазного синтеза ($T_1=1073$ К, $\tau_1=10$ ч. и $T_2=1223$ К, $\tau_2=10$ ч.), были получены модифицированные ТР на основе $Bi_{1-x}La_xMnO_{3\pm\delta}$. Модифицирование проводили внедрением оксида ниобия Nb_2O_5 , в соответствии с формулой $Bi_{0,5}La_{0,5}Mn_{0,98}Nb_{0,02}O_{3\pm\delta}$. Спекание проводили по обычной керамической технологии ($T_{сп.}=1293$ К, $\tau_{сп.}=2,5$ ч.). Структура керамик была исследована на дифрактометре ДРОН 3. Электрическое сопротивление образцов определяли с помощью измерителя высоких сопротивлений Agilent 4339В в присутствии постоянной магнитной индукции $H=0,86$ Тл. Исследовались образцы диаметром 6 мм и толщиной 1 мм при напряженности электрического поля $E=1$ В/мм. Образцы помещали между полюсов электромагнита в заливной криостат, сделанный из немагнитных материалов, который наполнялся жидким азотом. Исследование диэлектрических свойств проведено в интервале температур от $T=(80\div 300)$ К и широком диапазоне частот от 100 Гц до 1 МГц.

Показано, что изученные в работе керамические образцы однофазны, практически беспримесны, имеют высокую экспериментальную плотность и структуру близкую к кубической (при комнатной температуре). На термочастотных зависимостях диэлектрической проницаемости наблюдаются аномалии, поведение которых связано с изменением частоты электрического поля. Природа такого поведения уточняется. Экспериментальные значения тангенса диэлектрической проницаемости, позволяют связать полученные результаты с эффектами, вызванными ростом электропроводности многослойной структуры, образованной зернами и границами между ними. Подобные аномалии ранее наблюдались в соединениях кислородно-октаэдрического типа, содержащих ионы переменной валентности [2-4]. В присутствии внешнего магнитного поля было обнаружено отрицательное магнетосопротивление, величина и характер которого позволяют отнести его к колоссальному магнетосопротивлению.

Полученные данные целесообразно использовать при дальнейшей разработке новых материалов на основе мультиферроиков.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект № 0852-2020-0032)/(БА30110/20-3-07ИФ) под руководством директора НИИ физики ЮФУ, д.ф.-м.н, Вербенко И.А. ЦКП НИИ физики ЮФУ.

Список публикаций:

- [1] Павленко А.В., Турик А.В., Резниченко Л.А., Шилкина Л.А., Климантин Г.М. // Письма в ЖТФ. 2013. 39(1). 47-53.
- [2] Turik A.V., Pavlenko A.V., Reznichenko L.A. // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2014. №78(8). 1042-1045.
- [3] Pavlenko A.V., Turik A.V., Reznichenko L.A., Koshkidko Yu.S. // Physics of the Solid State. 2014. №56(6). 1093-1099.
- [4] Wu Y.J., Lin Y.Q., Gu S.P. & Chen X.M. // Applied Physics A. 2009. 97. 191-194.

Влияние механоактивации на структуру и свойства твердого раствора

$Bi_{0,95}Pb_{0,05}Fe_{0,98}Nb_{0,012}W_{0,008}O_3$

Глазунова Екатерина Викторовна

Шилкина Лидия Александровна

Южный федеральный университет, научно-исследовательский институт физики

Вербенко Илья Александрович, д.ф.-м.н.

kate93g@mail.ru

Введение

Одним из бурно развивающихся в настоящее время направлений является физика мультиферроиков. К мультиферроикам относятся материалы, сочетающие в себе два и более типов упорядочений: сегнетоэлектрические, магнитные и/или сегнетоэластические (СЭ). Их взаимодействие приводит к возникновению эффектов (магнитоэлектрический, магнитоэлектрический), необходимых для создания устройств управления электрическим и магнитным полями и развития спин- и стрейнтроники. Наиболее

исследованным однофазным мультиферроиком является феррит висмута (BiFeO_3) ввиду того, что он имеет относительно высокие температуры СЭ и магнитного переходов $T_C = 1123 \text{ K}$, $T_N = 643 \text{ K}$ [1]. Кроме того, в тонких пленках BiFeO_3 впервые был обнаружен гигантский магнитоэлектрический эффект [2], что позволило говорить о возможности его практического применения [3]. Однако, практическому применению BiFeO_3 препятствует низкий уровень магнитоэлектрических взаимодействий, обусловленный особенностями структуры и большой разницей в температурах СЭ и магнитного переходов. Эту проблему можно попытаться решить методом создания твердых растворов (ТР) на основе феррита висмута с другими мультиферроиками и управления их свойствами в рамках обычной керамической технологии.

В связи с этим актуальным представляется установление влияния механоактивации (МА) на структуру и свойства ТР состава $\text{Bi}_{0.95}\text{Pb}_{0.05}\text{Fe}_{0.98}\text{Nb}_{0.012}\text{W}_{0.008}\text{O}_3$.

Объекты и методы исследования

В качестве объекта исследования выступил ТР состава $\text{Bi}_{0.95}\text{Pb}_{0.05}\text{Fe}_{0.98}\text{Nb}_{0.012}\text{W}_{0.008}\text{O}_3$. Изготовление ТР осуществляли методом двухстадийного твердофазного синтеза при температурах $T_1 = 800^\circ\text{C}$; $T_2 = 850^\circ\text{C}$; $\tau_1 = \tau_2 = 10$ часов; и спекания по обычной керамической технологии, $T_{\text{сп.}} = 870^\circ\text{C}$, $\tau = 2$ часа. МА осуществляли в шаровой планетарной мельнице высокоэнергетического помола АГО-2 на стадии изготовления пресс-порошка, подготовленных к спеканию. Помол производился в спиртовой среде в течение 15 мин., частота вращения барабана составляла 1050 об/мин.

Рентгенофазовый анализ проводили на дифрактометре ДРОН 3.0 (CoK_α – излучение, фокусировка по Брэггу – Брентано). Точность определения параметров ячейки: линейных $\Delta a = \Delta c = \Delta b = \pm 0.003 \text{ \AA}$; угловых $\Delta \alpha = \pm 0.05^\circ$; объема $\Delta V = \pm 0.05 \text{ \AA}^3$. Исследование микроструктуры сколов образцов осуществляли с помощью сканирующего электронного микроскопа JSM-6390L. Комплексную относительную диэлектрическую проницаемость измеряли на изготовленном в НИИ физики ЮФУ Лабораторном стенде "Kalipso" с использованием измерителей импеданса "Agilent E 4980A", и Hioki 3522-50 в интервале температур от 25°C до 400°C и в частотном интервале от 200 до 10^6 Гц.

Результаты и обсуждения

Рентгенофазовый анализ ТР $\text{Bi}_{0.95}\text{Pb}_{0.05}\text{Fe}_{0.98}\text{Nb}_{0.012}\text{W}_{0.008}\text{O}_3$ показал, что он имеет структуру типа перовскита с ромбоэдрически искаженной элементарной ячейкой. На обеих дифрактограммах, как без применения МА, так и с применением МА присутствуют рентгеновские пики примесных фаз $\text{Bi}_{36}\text{Fe}_2\text{O}_{57}$ и $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$, характерных для соединений на основе BiFeO_3 . Относительная интенсивность рентгеновских пиков примесных фаз не превышает 5-7 %.

Рентгеноструктурный анализ полученных ТР показал, что объем элементарной ячейки увеличивается от 62.38 \AA^3 в ТР без МА до 62.53 \AA^3 в ТР с применением МА. Это может быть связано с образованием в процессе МА точечных дефектов (вакансий), что приводит к распуханию ячейки [12]. Также, важно отметить, что после применения МА относительная плотность керамики повысилась на 5 %, что свидетельствует о положительном влиянии МА на спекаемость ТР.

Исследования микроструктуры ТР $\text{Bi}_{0.95}\text{Pb}_{0.05}\text{Fe}_{0.98}\text{Nb}_{0.012}\text{W}_{0.008}\text{O}_3$ показали, что применение МА приводит к значительному уменьшению среднего размера зерен от 8 мкм до 2 мкм, и к увеличению прочности керамики, ввиду того, что скол керамики проходит не по границе зерен, а сквозь их объем, что свидетельствует о сопоставимой прочности самого зерна по сравнению с межзеренной границей.

Исследования действительной, ϵ'/ϵ_0 , и мнимой, ϵ''/ϵ_0 , частей относительной комплексной диэлектрической проницаемости от температуры для ТР $\text{Bi}_{0.95}\text{Pb}_{0.05}\text{Fe}_{0.98}\text{Nb}_{0.012}\text{W}_{0.008}\text{O}_3$ показали, что для него характерно наличие широкого размытого по частоте максимума в области температур $T = 370 - 550 \text{ K}$. Анализ поведения мнимой части диэлектрической проницаемости свидетельствует о высокой электропроводности $\text{Bi}_{0.95}\text{Pb}_{0.05}\text{Fe}_{0.98}\text{Nb}_{0.012}\text{W}_{0.008}\text{O}_3$ при указанных температурах.

Применение МА приводит к снижению диэлектрической проницаемости, прежде всего, её мнимой части, что, вероятно, связано с подавлением электропроводности. При этом происходит рост дисперсии диэлектрической проницаемости в области фазового перехода. Подобное поведение может быть связано с изменением характера микроструктуры образца, так как снижение размера зерна и увеличение его прочности способствует увеличению электрического сопротивления [5,6].

Выводы

Установлено, что применение МА к ТР $\text{Bi}_{0.95}\text{Pb}_{0.05}\text{Fe}_{0.98}\text{Nb}_{0.012}\text{W}_{0.008}\text{O}_3$ способствует уменьшению среднего размера зерна в 4 раза и способствует снижению мнимой части диэлектрической проницаемости, обусловленной электропроводностью ТР, хотя и не позволяет при выбранных режимах существенно снизить содержание примесей.

Полученные результаты целесообразно использовать при разработке новых материалов на основе изученных ТР.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект №0852-2020-0032/(БА30110/20-3-07ИФ) при использовании оборудования Центра коллективного пользования «Электромагнитные, электромеханические и тепловые свойства твердых тел» НИИ физики ЮФУ.

Список публикаций:

- [1] Венецев Ю.Н., Гагулин В.В.. *Сегнетомагнетики*. // Изв.АН СССР. 1982. № 4. С 78.
- [2] Wang J. et al. *Epitaxial BiFeO₃ multiferroic thin film heterostructures* // Science. 2003. V.299. № 5613. P.1719-1722.
- [3] Reznichenko L. A. et al. *On the Prospects for Technical Applications of BiFeO₃. Compounds Substituted with Rare-Earth Elements, Bulletin of the Lebedev Physics Institute*. 2010. V. 37. № 1. P. 16-17.
- [4] Архаров В.И. *Мезоскопические явления в твердых телах и их мезоструктура* // Проблемы современной физики. Наука.: Л. 1980. С. 357-382.
- [5] Чембарисова Р.Г. *Влияние границ зерен на электропроводность медных славов* // ЖТФ. 2020. Т.90. №4. С.618-620.
- [6] Блатт Ф. *Физика электронной проводимости в твердых телах*. М.: 1971. 470с.

Особенности электронной структуры MeOx/МУНТ

Дмитриев Виктор Олегович

Халил Малин, Богославская Елена Сергеевна, Невзорова Ника Михайловна, Шматко Валентина Анатольевна

Южный федеральный университет

Яловега Галина Эдуардовна, д.ф.-м.н.

vdmitriev@sfedu.ru

Композиты на основе углеродных нанотрубок и оксидов переходных металлов обладают уникальными физическими и химическими свойствами, что делает их подходящими для множества применений, включая использование в качестве катализаторов, сенсоров, суперконденсаторов. В работе была изучена электронная структуры нанокompозитных материалов на основе оксидов переходных металлов (Cu, Ni) и многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ) с помощью методов ближней тонкой структуры рентгеновского поглощения XANES (X-ray absorption near edge structure) и оптической спектроскопии в ультрафиолетовом и видимом диапазонах.

Согласно спектроскопии рентгеновского поглощения, при образовании нанокompозита MeOx/МУНТ происходят изменения в степени окисления и фазовом составе наночастиц CuOx. Рентгеновские спектры поглощения К-края меди в композитах CuOx/МУНТ имеют особенности, связанные с взаимодействием CuOx с нанотрубками, а также изменениями локальной структуры вокруг поглощающего атома. По сравнению с чистыми наночастицами наблюдаются увеличение фазы CuO и уменьшение фазы Cu₂O [1]. Данные рентгеновского поглощения указывают на формирование новых химических связей в углеродных нанотрубках в результате образования нанокompозита NiOx/МУНТ, связанное с химическим взаимодействием NiOx и нанотрубок. Анализ спектров XANES К-края поглощения Ni показывает, что Ni в составе нанокompозита обладает степенью окисления +2, а также то, что в композите присутствует Ni с разным кислородным окружением [2].

Были измерены спектры оптического поглощения исследуемых образцов. Проведено сравнение спектральных профилей различных образцов. Было обнаружено, что функционализация МУНТ наночастицами оксидов переходных металлов имеет слабое влияние на профили спектра поглощения. В то же время введение наночастиц оксидов металлов может привести к модификации поверхности нанотрубок, что, в свою очередь, приводит к изменению ширины запрещенной зоны.

Список публикаций:

- [1] V. Shmatko, G. Yalovega, A. Barbashova, A. Kuriganova, E. Bogoslavskaya, N. Smirnova // *Key Engineering Materials*. – 2016 – Vol. 683. – P. 215-220.
- [2] V. Shmatko, D. Leontyeva, N. Nevzorova, N. Smirnova, M. Brzhezinskaya, G. Yalovega // *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* – 2017.- N 220 P.76-80.

Ab initio исследование мартенситной фазы модулированных структур сплавов Ni-Mn-In с избытком Mn

Ерагер Ксения Романовна

Байгуллин Данил Расулович, Бучельников Василий Дмитриевич

Челябинский государственный университет

Соколовский Владимир Владимирович, д.ф.-м.н.

eragerk@rambler.ru

В последние годы магнитные сплавы с эффектом памяти формы привлекают большое внимание из-за значительных деформаций, индуцированных магнитным полем, и большого магнитокалорического эффекта, используемого в современных технологиях. Наличие больших обратимых магнитодеформаций связано с возникновением модулированных низкосимметричных структур в мартенситной фазе вследствие бездиффузионного мартенситного перехода из высокотемпературной аустенитной фазы с кубической структурой. Модулированные мартенситные структуры представляют собой периодический сдвиг атомных плоскостей решетки с определенной амплитудой и периодом, приводящий к соразмерным и несообразным орторомбическим или двойниковым моноклинным структурам. Несмотря на то, что многие стехиометрические сплавы Ni_2MnX имеют серьезные ограничения в их полноценном применении, связанные с рабочим температурным интервалом, поскольку температура Кюри достаточно велика, то управление температурами мартенситного и магнитного перехода можно реализовать посредством введения нестехиометрии.

В данной работе первопринципные вычисления модулированных структур сплавов $Ni_2Mn_{1.75}In_{0.25}$ с расположением атомов Mn в «шахматном» и «послойном» порядке были выполнены с помощью теории функционала плотности, реализованной в программном пакете VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) [1], в приближении GGA-PBE [2]. Плотность к сетки, применявшейся для геометрической оптимизации составляла ~15000 точек на атом обратной решетки. Энергия обрезки плоских волн составляла 460 eV, а параметр сходимости по энергии равнялся 10^{-8} eV/атом.

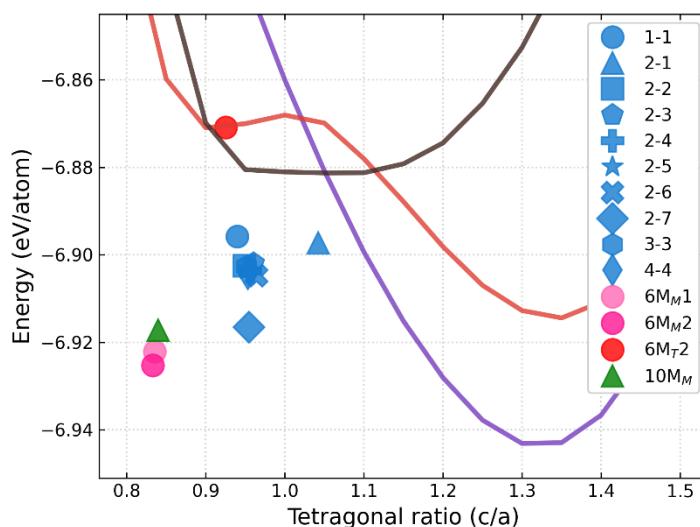


рис.1. Зависимость энергии основного состояния от тетрагонального искажения модулированных структур сплава $Ni_2Mn_{1.75}In_{0.25}$ с расположением атомов в «шахматном порядке», синими символами обозначены нанодвойниковые структуры, розовыми точками - структуры 6M, зеленым треугольником - 10M

На рис.1 представлена зависимость энергии основного состояния различных модулированных структур сплава $Ni_2Mn_{1.75}In_{0.25}$ от тетрагонального искажения (c/a). По полученным данным, модулированные моноклинные структуры 6M демонстрируют большую устойчивость, относительно структур с расположением атомов в шахматном порядке. Структуры с расположением атомов в послойном порядке демонстрируют неустойчивое поведение и, после геометрической оптимизации, наблюдается переход в фазу немодулированного мартенсита L1₀.

Финансирование работы. Работа выполнена при поддержке проекта РФФ № 17-72-20022.

Список публикаций:

[1] Kresse G., Furthmüller J. // *Physical Review B*. 1996. V. 54. P. 11169.

[2] Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. // *Physical Review Letters*. 1996. V. 77. P. 3865.

Исследование анизотропии в пленках $\text{Sr}_{0.61}\text{Ba}_{0.39}\text{Nb}_2\text{O}_6$

Жидель Карина Михайловна

Южный федеральный университет

Павленко Анатолий Владимирович, д.ф.-м.н.

karinagidele@gmail.com

В современном материаловедении стали актуальными вопросы получения и исследования свойств тонкослойных гетероструктур на основе сегнетоэлектрических материалов, в частности, ниобатов бария-стронция $\text{Sr}_{1-x}\text{Ba}_x\text{Nb}_2\text{O}_6$. В эпитаксиальных прозрачных пленках, ориентированных в направлении оптической оси c одноосного кристалла, фактор анизотропии приводит к дополнительным изменениям в трактовке результатов эллипсометрических измерений.

В настоящей работе представлены результаты эллипсометрических исследований тонких пленок ниобатов бария-стронция $\text{Sr}_{0.61}\text{Ba}_{0.39}\text{Nb}_2\text{O}_6$ (SBN-61), нанесенных на кристаллические подложки MgO (001). Пленки SBN-61 были получены методом ВЧ-катодного распыления керамической мишени на предварительно подготовленные под гетероэпитаксиальное осаждение монокристаллические подложки MgO (001). Время напыления SBN-61 на MgO составило 115 мин. Для определения оптических параметров нами были проведены спектральные исследования методом эллипсометрии. Измерения проводились на спектральном эллипсометре «ЭЛЛИПС-1991». ЭЛЛИПС-1991 создан на основе статической измерительной схемы. Спектры эллипсометрических параметров ψ и Δ измерялись в диапазоне от 350 до 1000 нм с шагом 2 нм. Образцы устанавливались на прецизионном вращающемся столике для выполнения измерений в зависимости от азимута, а угол поворота в плоскости ϕ изменялся от 0 до 90°. При каждой ориентации в плоскости данные снимались под углами падения (45°-65°). Такая схема измерения с угловым разрешением необходима для полной характеристики произвольных оптически анизотропных образцов.

На рис. 1 представлены экспериментальные спектры эллипсометрических параметров ψ и Δ в видимом диапазоне. Спектры построены для угла падения зондирующего луча 45° и ориентациях в плоскости для положения условного нуля и поворота на 45°. Видно, что образцы SBN-61 не демонстрируют анизотропного оптического поведения, о чем свидетельствуют совпадающие экспериментальные кривые.

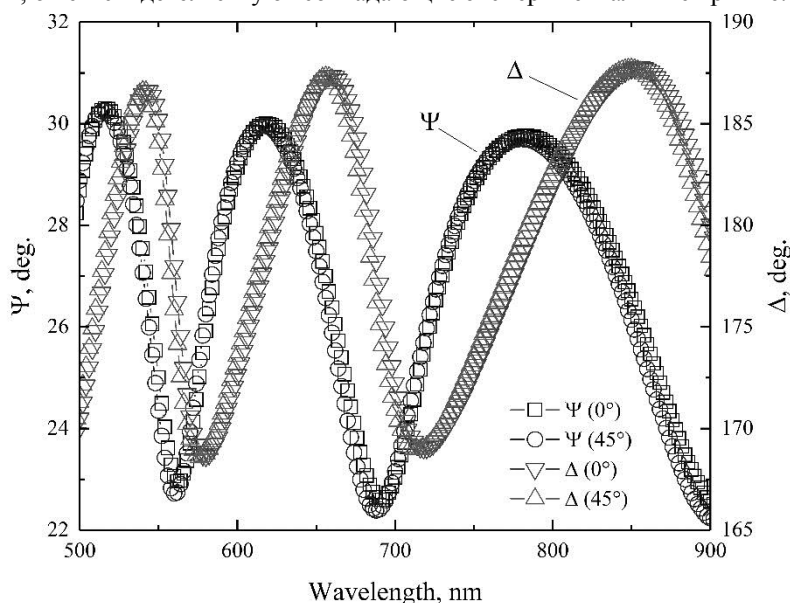


рис.1. Зависимости Ψ и Δ как функции длины волны

Эллипсометрические измерения показали, что все исследованные SBN-пленки характеризуются естественным направлением роста, которое совпадает с направлением оптической оси c кристалла. Таким образом, поворот плоскости падения зондирующего луча не приводит к изменению значений ψ и Δ . Исследуемые пленки можно рассматривать в рамках изотропной модели.

Благодарности. Использовано оборудование ЦКП «Объединенный центр научно-технологического оборудования ЮНЦ РАН (исследование, разработка, апробация)».

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект № (0852-2020-0032)/(БАЗ0110/20-3-07ИФ)).

Особые участки теплового расширения эпитаксиальной пленки со структурой феррит-граната

Максимов Глеб Сергеевич

Крымский федеральный университет имени В.И. Вернадского

Максимова Елена Михайловна, к.ф.-м.н.

neondreamer00@gmail.com

Структурное совершенство феррит-гранатовых пленок во многом определяет конечные свойства разрабатываемых устройств [1]. Основными причинами возникновения напряжений в монокристаллических пленках являются несоответствие параметров решетки пленки и подложки, различие их коэффициентов теплового расширения, возникновение спонтанной деформации при фазовом переходе [2]. Поэтому исследования тепловых свойств пленок как одной из причин появления в них внутренних напряжений по-прежнему остаются актуальной задачей.

В работе исследовалась эпитаксиальная феррит-гранатовая пленка $(\text{BiGdLu})_3(\text{FeGa})_5\text{O}_{12}$, выращенная методом жидкофазной эпитаксии из раствора в расплаве, на подложке из галлий-гадолиниевого граната $\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ кристаллографической ориентации (111). Структурные исследования проводились на рентгеновском дифрактометре XRD 7000 Shimadzu. Съемка производилась в $\text{Cu K}\alpha$ -излучении с использованием графитового монохроматора в высокотемпературной камере Shimadzu при температурах 20, 100, 200, 300, 400, 500 °C.

Параметры элементарных ячеек пленки и подложки были рассчитаны по следующей формуле для кристаллов кубической сингонии:

$$a = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \quad (1)$$

где λ – длина волны рентгеновского излучения; θ – угол Брегга; h, k, l – индексы интерференции.

График зависимости параметров элементарных ячеек пленки и подложки от температуры представлен на рис. 1.

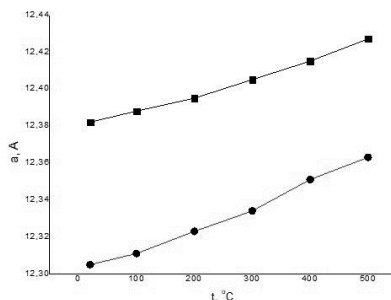


рис. 1. Температурные зависимости параметров элементарных ячеек пленки (кружки) и подложки (квадраты).

Для количественной оценки термического расширения образца были рассчитаны коэффициенты теплового расширения (КТР) пленки и подложки по формуле:

$$\alpha = \frac{\Delta l / l}{\Delta T} = \frac{1}{a_0} \frac{\Delta a}{\Delta t} \quad (2)$$

где Δt – разность температур в конце и начале температурного интервала; Δa – разность параметров элементарных ячеек в конце и начале температурного интервала; a_0 – значение параметра в начале температурного интервала.

Результаты расчетов приведены в следующей таблице.

$t_{\text{нач.}} - t_{\text{кон.}}, \text{ } ^\circ\text{C}$	20 - 100	100 - 200	200-300	300-400	400-500
$\alpha_{\text{пленки}}, \cdot 10^{-6}, \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$	5,99	9,83	8,85	13,20	10,3
$\alpha_{\text{подложки}}, \cdot 10^{-6}, \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$	5,65	5,97	7,83	7,82	10,55
$\alpha_{\text{пленки}}/\alpha_{\text{подложки}}, \cdot 10^{-6}, \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$	1,06	1,65	1,1	1,69	0,98

Из таблицы видно, что для ряда температурных интервалов КТР пленки и подложки практически равны, в то время как на интервалах 100-200 °C и 300-400 °C коэффициент теплового расширения пленки в 1,7 раза больше, чем у подложки. Такая разница в тепловом расширении пленки и подложки очевидно связана с тем,

что в этих температурных интервалах происходит изменение магнитного порядка в структуре пленке. А именно, в обращении в ноль намагниченности феррит-граната при температуре компенсации и температуре Кюри.

В работе использовался образец феррит-гранатовой пленки, выращенной в Научно-исследовательском центре Функциональных материалов и нанотехнологий Физико-технического института Крымского федерального университета имени В.И. Вернадского.

Список публикаций:

[1] Y.H. Kim, J.S. Kim, S.I. Kim, M.J. Levy *Korean Phys. Soc.*, 43 (3), 400-405 (2003).

[2] A.N. Shaposhnikov, A.R. Prokopov, A.V. Karavainikov, V.N. Berzhansky, T.A. Mikhailova, V.A. Kotov, D.E. Balabanov, I.V. Sharay, O.Y. Salyuk, M. Vasiliev, V.O. Golub *Materials Research Bulletin.*, 55., 19–25 (2014).

Формирование структурных фрагментов в дихалькогенидах титана, замещённых 3d-переходными металлами

Меренцов Александр Ильич

Шкварин Алексей Сергеевич, Титов Александр Натанович

Институт физики металлов УрО РАН им. М.Н. Михеева

Alexander.Merentsov@urfu.ru

Слоистые дихалькогениды переходных металлов (СДПМ) с общей формулой MCh_2 ($Ch = S, Se, Te$) представляют собой квазидвумерные материалы с чередующимися слоями $Ch-M-Ch$. Внутри слоёв химическая связь имеет преимущественно ковалентный характер, в то время как между слоями связь относительно слаба, что даёт возможность к получению так называемых интеркалатных материалов, в которых примесь попадает в межслоевое пространство. При этом образуются дополнительные связи между интеркалантом и решёткой-матрицей, а при высокой концентрации интеркаланта могут образовываться связи непосредственно между атомами интеркаланта (как, например, в системе Fe_xTiSe_2 [1]), приводя к их упорядочению в виде одномерных атомных цепочек. Многообразие комбинаций интеркалант-матрица даёт возможность варьировать свойства интеркалированных СДПМ в широком диапазоне.

Ещё одним способом модификации свойств СДПМ является замещение по одной из подрешёток (переходного металла [2-4] или халькогена [5]). При таком допировании не образуются дополнительные связи между примесью и решёткой в направлении, перпендикулярном плоскости слоёв, что, в частности, не приводит к подавлению эффективного магнитного момента примеси, если она является магнитной, а также позволяет сохранить относительную слабость взаимодействия между соседними слоями $Ch-M-Ch$. Такого рода материалы удобны для использования в качестве твёрдых электролитов для литиевых батарей, поскольку замещение существенно снижает предел растворимости лития и увеличивает ионную подвижность.

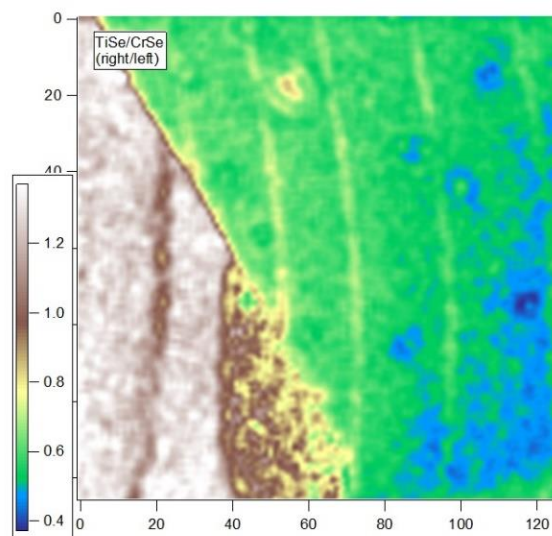


рис. 1. Поверхность 100×100 мкм монокристалла $Cr_{0.78}Ti_{0.36}Se_2$ в контрасте Se 3d. Цветом показана относительная интегральная интенсивность, значения по осям x и y – пиксели.

В монокристаллах замещённой системы $\text{Cr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{Se}_2$ методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии в кристалле с $x = 0.83$ было обнаружено [3] два пика Se 3d: один соответствовал селену в матрице TiSe_2 , другой же имел энергию связи на 1.3 эВ больше. Появление второго пика интерпретировалось как образование в материале слоёв CrSe_2 , когерентно связанных с матрицей TiSe_2 . Прямого подтверждения этому, однако, до последнего времени не было. Непосредственно подтвердить наличие структурных фрагментов удалось используя методику SPEM (Scanning Photoemission Electron Microscopy), реализованной на линии Spectromicroscopy синхротрона ELETTRA (г. Триест, Италия). Благодаря фокусировке размер пучка достигает диаметра 120 нм, что позволяет исследовать наноразмерные включения. На *рис. 1* представлено изображение поверхности 100×100 мкм монокристалла $\text{Cr}_{0.78}\text{Ti}_{0.36}\text{Se}_2$ в контрасте Se 3d. Левый фрагмент – решётка на основе TiSe_2 , правый фрагмент – решётка на основе CrSe_2 . Аналогичные структурные фрагменты образуются и в монокристаллах системы $\text{V}_x\text{Ti}_{1-x}\text{Se}_2$ в составе с $x = 0.75$.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-33-60031.

Список публикаций:

- [1] Shkvarin A.S., Yarmoshenko Yu.M., Merentsov A.I., Shkvarina E.G., Suslov E.A., Brezhestovsky M.S., Bushkova O.V., Titov A.N. // *RSC Advances*. 2016. ЖЭТФ. 2003. 6. 106527.
 [2] Shkvarin A.S., Merentsov A.I., Yarmoshenko Yu.M., Shkvarina E.G., Zhukov Yu.M., Titov A.A., Titov A.N. // *Journal of Chemical Physics*. 2017. 146. 164703.
 [3] Merentsov A.I., Yarmoshenko Yu.M., Skorikov A.N., Titov A.N., Buling A., Råkers M., Neumann M., Galieva E.G., Slepudin P.A. // *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*. 2010. 182. 70.
 [4] Kirby R. D., Freund G. A., Fagerquist R. L. // *Bull. Am. Phys. Soc.* 1980. 25. 201.
 [5] Shkvarin A.S., Merentsov A.I., Titov A.A., Yarmoshenko Yu.M., Shkvarina E.G., Pis I., Nappini S. Titov A.N. // *Journal of Materials Chemistry C*. 2018. 6. 12592.

Электрофизические характеристики твёрдых растворов системы PZT-CdNb₂O₆

Мойса Максим Олегович

Андрюшин Константин Петрович, Саху Сушрисангита, Воробьёв Артём Алексеевич

Южный федеральный университет

Резниченко Лариса Андреевна

moysa@sfedu.ru

В настоящее время пьезоэлектрические материалы, преобразующие энергию между электрической и механической формами, используются для контроля динамических процессов в качестве первичных преобразователей информации. В качестве основы вышеуказанных наиболее перспективны и привлекательны среды с особыми электрическими свойствами, прежде всего, сегнетопъезокерамики со структурами типа перовскита и родственных, обладающие рядом уникальных характеристик (высокие значения пьезооткликов, стабильность свойств при воздействии внешних критических воздействий). Ввиду того, что пьезоэлектрические и диэлектрические свойства являются фундаментальными характеристиками таких объектов, актуальным представляется проследить влияние состава на электрофизические характеристики в твёрдых растворах (ТР) системы $(1-x)\text{Pb}(\text{Ti}_{0.5}\text{Zr}_{0.5})\text{O}_{3-x}\text{Cd}_{0.5}\text{NbO}_3$.

Объектом исследования явились ТР системы $(1-x)\text{Pb}(\text{Ti}_{0.5}\text{Zr}_{0.5})\text{O}_{3-x}\text{Cd}_{0.5}\text{NbO}_3$ с $x = 0.0125 - 0.5$, $\Delta x = 0.0125$. Образцы получены твердофазным синтезом в две стадии с последующим спеканием по обычной керамической технологии: $T_{\text{синт.1}} = 1170$ К, $\tau_{\text{синт.1}} = 4$ ч., $T_{\text{синт.2}} = 1220$ К, $\tau_{\text{синт.2}} = 10$ ч., $T_{\text{спек.}} = 1490$ К, в зависимости от состава. Электрофизические параметры поляризованных образцов при комнатной температуре измерялись с помощью LCR-meter Agilent 4980A методом резонанса-антирезонанса [1]. Определяли относительные диэлектрические проницаемости неполяризованных (ϵ/ϵ_0) и поляризованных ($\epsilon_{33}^T/\epsilon_0$) образцов, пьезоэлектрический модуль, $|d_{31}|$, пьезоэлектрический коэффициент (пьезоэлектрическая чувствительность), $|g_{31}|$, коэффициент электромеханической связи планарной моды колебаний, K_p . Пьезомодуль d_{33} и, соответственно, пьезоэлектрический коэффициент g_{33} измеряли при комнатной температуре квазистатическим методом при помощи прибора Piezo d_{33} Test System (YE2730A d_{33} METER).

На *рис. 1* представлены диэлектрические, пьезоэлектрические и сегнетоэластические свойства ТР системы $(1-x)\text{Pb}(\text{Ti}_{0.5}\text{Zr}_{0.5})\text{O}_{3-x}\text{Cd}_{0.5}\text{NbO}_3$. Обнаружен немонотонный ход зависимостей диэлектрических и пьезоэлектрических характеристик в зависимости от состава. Так, $|d_{33}|$ и g_{33} имеют точку перегиба при $x = 0.025$, K_p – ярко выраженный минимум при $x = 0.0375$, а $\epsilon_{33}^T/\epsilon_0$ характеризуется резким ростом при переходе в псевдокубическую фазу.

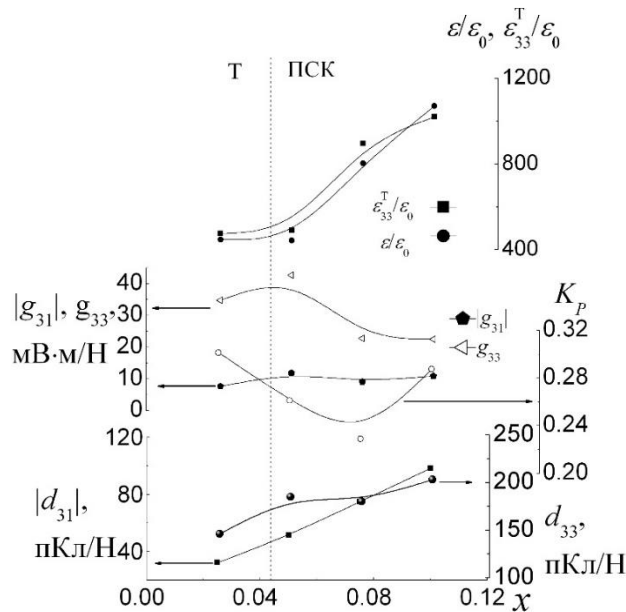


рис. 1. Зависимость пьезоэлектрических и сегнетоэластических свойств TP системы $(1-x)Pb(Ti_{0.5}Zr_{0.5})O_{3-x}Cd_{0.5}NbO_3$ с $x = 0.0125 - 0.05$

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект № (0852-2020-0032)/(БА30110/20-3-07ИФ)

Список публикаций:

[1] ОСТ 11 0444-87. Материалы пьезокерамические. Технические условия. // Введены 01.01.88. Группа Э-10. -41с

Электрофизические свойства кремния при высоких давлениях

Никулин Андрей Алексеевич

Тебеньков Александр Владимирович

Уральский федеральный университет имени первого президента России Б.Н. Ельцина

Тебеньков Александр Владимирович

Eternalenvy123@gmail.com

В нашем исследовании предпринята попытка определить границы фазовых переходов в кремнии в диапазоне давлений 16–50 ГПа в зависимости от скорости увеличения давления.

Кремний давно исследуется при высоких давлениях, известно около двенадцати фаз высокого давления. Несмотря на это, до сих пор межфазные границы в диапазоне 30–40 ГПа точно не определены, и различные авторы по-разному указывают эти границы в зависимости от условий эксперимента. На сегодняшний день фазовая диаграмма кремния в диапазоне 16-50 ГПа выглядит приблизительно следующим образом: с 16 до 32 ГПа – это простая гексагональная структура Si-V, с 36 до 42 ГПа – изоструктурный тип Cs V Si-VI и при давлении выше 48 ГПа – гексагональная плотноупакованная Si-VII [1].

Для генерации высоких давлений использована камера высокого давления с токопроводящими наковальнями, изготовленными из синтетического поликристаллического алмаза. Межкристаллитные области данного материала заполнены металлической связкой, обеспечивающей низкое электрическое сопротивление наковален. Это позволяет изучать электрические характеристики вещества в широком диапазоне давлений. Рабочий диапазон давлений для камеры составляет от 16 до 50 ГПа.

В ходе эксперимента проводилось измерение электросопротивления кремния при фиксированных давлениях с выдержкой в течение 2 минут. На (рис.1) представлена барическая зависимость электросопротивления кремния в полулогарифмических координатах. На графике показаны четыре полных цикла увеличения и снижения давления для одного и того же образца. Два цикла с шагом 0.5 ГПа и по одному циклу с шагом 1 ГПа и 2 ГПа соответственно. Для шага 0.5 ГПа можно выделить 3 линейных участка в диапазонах давлений 16–29 ГПа, 37–44 ГПа, выше 44 ГПа, что с небольшим различием согласуется с

литературой. В свою очередь, по мере увеличения шага до 1 ГПа и 2 ГПа наблюдается заметное снижение количества резких скачков электросопротивления и весь график приблизительно стремится к одной монотонной близкой к линейной зависимости, что особенно видно при шаге в 2 ГПа, где не наблюдается резких скачков электросопротивления. Это связано с тем, что по мере увеличения шага требуется больше времени для протекания релаксационных процессов.

Таким образом, по результатам исследования был установлен факт, что скорость увеличения давления влияет на то, при каких давлениях регистрируются границы фазовых переходов.

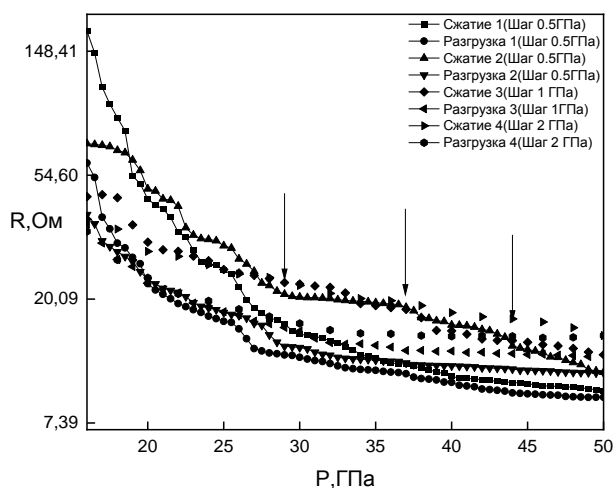


рис.1 – Барические зависимости электросопротивления кремния. Стрелочками обозначены точки, в которых ожидаются фазовые переходы

Список публикаций:

[1] Тебеньков А.В., Г.В. Суханова, А.Н.Бабушкин Фазовые переходы и время релаксации проводимости в кремнии // Известия Уфимского научного центра РАН - 2021. - №2. - С. 30–32.

Электронная структура и химическая связь в BeAP_2 (A=C, Si)

Поляков Савелий Викторович

Кемеровский государственный университет

Гордиенко Алексей Болеславович, д.ф.-м.н.

savelij.polyakov@mail.ru

Целью настоящей работы является систематическое исследование электронных свойств гипотетических соединений BeAP_2 (A=C, Si) со структурой халькопирита (пространственная группа $I-42d$), которые представляют интерес, как перспективные полупроводниковые соединения.

Вычисления выполнялись в локальном приближении теории функционала плотности [1-3] с использованием сохраняющих норму, сепарабельных HGH-псевдопотенциалов [4], базиса псевдо-атомных орбиталей [5, 6] в форме *triple- ζ* функций *s*-, *p*- и *d*-типа для всех атомов, а также **k**-сетки размерности 4x4x4 для интегрирования по зоне Бриллюэна. Полная оптимизация кристаллической структуры, включая параметры решетки и координаты атомов, выполнялась методом VFGS [7]. Ниже кратко представлены результаты для кристалла BeSiP_2 .

Оптимизированные значения постоянных решетки BeSiP_2 составляют $a = 5.048 \text{ \AA}$, $c = 10.077 \text{ \AA}$, соответственно величина тетрагонального сжатия $\gamma = c/a = 1.996$ практически совпадает с идеальным значением 2.0 для удвоенной решетки сфалерита. Равновесные длины неэквивалентных связей Be-P и Si-P равны Be-P 2.1303 и 2.2413 \AA , что определяет величину параметра смещения анионов $x = 0.231$.

Зонная структура BeSiP_2 и плотность состояний приведены на рис.1(а, б). Как видно, рассматриваемый кристалл является полупроводником, при этом вершина валентной зоны реализуется в центре зоны Бриллюэна (точка Γ), а конкурирующие минимумы зоны проводимости располагаются в точках Γ и T с практически

равными энергиями переходов, которые составляют 0.97 эВ. Структура валентной зоны BeSiP_2 , содержащей 16 подзон, имеет вид, характерный для полупроводниковых соединений и состоит из трех полос электронных состояний, из которых две слегка перекрываются в области энергий порядка -7.0 эВ. Анализ проектированной плотности состояний показывает, что по типу атомных вкладов все группы зон имеют смешанный характер, при этом для первой и третьей зон характерны большие вклады состояний атомов бериллия и фосфора, в то же время, как наиболее заметный вклад состояний атомов кремния наблюдается в пределах второй подзоны в интервале энергий от -6.0 до -8.0 эВ.

Распределение полной валентной и деформационной электронной плотности в плоскости $(1\bar{1}0)$ BeSiP_2 показано на рис. 1(в, г). Основной заряд сосредоточен на атомах фосфора и кремния, при этом форма электронного облака на атомах фосфора близка к сферической, но заметно деформирована в направлении атомов бериллия и кремния, что указывает на формирование ковалентных связей Be-P и Si-P. В то же время, максимальные значения заряда сильно смещены в сторону атомов фосфора.

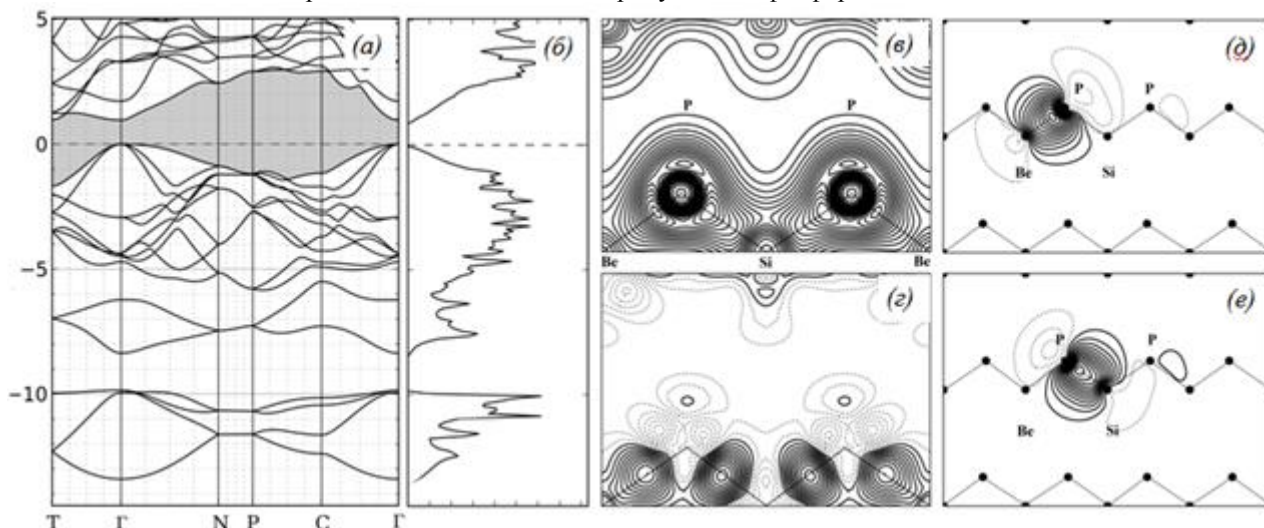


рис.1. BeSiP_2 : зонная структура (а), плотность состояний (б), полная валентная (в), деформационная (г) плотность заряда, функции Ванье связей Be-P (д) и Si-P (е).

Аналогичные особенности можно наблюдать также и на картине деформационной плотности заряда ($\delta\rho$): избыточный заряд присутствует на линии Be-P, где он имеет слегка асимметричную форму и максимум, смещенный в сторону атома фосфора, а также на линии Si-P вдоль которой $\delta\rho$ имеет профиль характерный для ковалентных связей. Таким образом, химическая связь в BeSiP_2 имеет преимущественно ковалентный характер, но с заметной долей ионной составляющей, характерной для связи Be-P. Более детальные выводы о характере химической связи можно сделать на основе исследования структуры функций Ванье (ФВ). Вычисления, выполненные для всех валентных зон, приводят к 16 ФВ, из которых независимыми являются только две, отвечающие связям Be-P и Si-P, рис.1(д, е), а остальные связаны с указанными преобразованиями группы симметрии тетраэдра. Как видно, ФВ имеют форму sp^3 гибридных орбиталей, что характерно для ковалентных соединений с тетраэдрической координацией, при этом ФВ связи Be-P более компакта, чем ФВ связи Si-P.

В работе также вычислены поляризованные спектры мнимой части диэлектрической проницаемости ($\varepsilon_2(E)$), анализ которых показывает, что амплитуды минимальных переходов достаточно малы, либо обращаются в ноль по симметрии, а заметное поглощение начинается с энергий порядка 2.0 эВ. При этом, профили $\varepsilon_2(E)$ для разных направлений поляризации света оказываются достаточно близкими, включая особенности и пики, которые формируются в основном за счет прямых переходов в центре зоны Бриллюэна.

Список публикаций:

- [1] Hohenberg P., Kohn W. // *Phys. Rev.* 1964. V.63. №3. P.864-871.
- [2] Kohn W., Sham L.J. // *Phys. Rev.* 1965. V.140. P. A1133-1138.
- [3] Perdew J. P., Zunger A. // *Phys. Rev. B.* 1981. V. 23. P. 5048–5079.
- [4] Hartwigsen C., Goedecker S., Hutter J. // *Phys. Rev. B.* 1998. V.58. №7. P.3541-3662.
- [5] Jansen R. W., Sankey O. F. // *Phys. Rev. B.* 1987. V. 36. P. 6520–6531.
- [6] Gordienko A.B., Poplavnoi A.S. // *Phys. Stat. Sol.(b)* 1997. V.202. P.941-949.
- [7] J. Nocedal and S. J. Wright. *Numerical Optimization. Springer Series in Operations Research.* Springer. 1999, 634 P.

Влияние давления в системе сплавов Гейслера Ni₂MnX (X = Ga, In, Sn, Sb)

Раев Андрей Александрович

Байгутлин Данил Расулович, Ерагер Ксения Романовна, Бучельников Василий Дмитриевич

Челябинский государственный университет

Соколовский Владимир Владимирович, д.ф.-м.н.

landrew637@mail.com

В настоящее время большие усилия научных групп во всем мире направлены на создание и интенсивное изучение новых функциональных материалов. Интерес к таким материалам вызван, прежде всего, поиском новых физических свойств, которые могут быть использованы в современных технологиях. При магнитоструктурных фазовых переходах наиболее ярко проявляется связь между кристаллической решеткой и магнитной спиновой подсистемой, что приводит к одновременному изменению структуры и магнитных свойств под действием внешних параметров (давление, магнитное поле, температура) и проявлению таких эффектов, как гигантское магнитосопротивление, магнитокалорический эффект, магнитоуправляемый эффект памяти формы [1,2] и др.

Исследование влияния внешнего давления на систему сплавов Гейслера Ni₂MnX (X = Ga, In, Sn, Sb) при максимальном значении P = 30 ГПа для 4-атомной суперячейки проводилось с помощью программного пакета VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) [3] в приближении функционалов PBE [4] и SCAN [5]. Интегрирование зоны Бриллюэна проводилось на сетке Монхорса-Пака (15x15x15). Энергия обрезки плоских волн составляла 450 eV, а параметр сходимости по энергии равнялся 10⁻⁷ eV/атом.

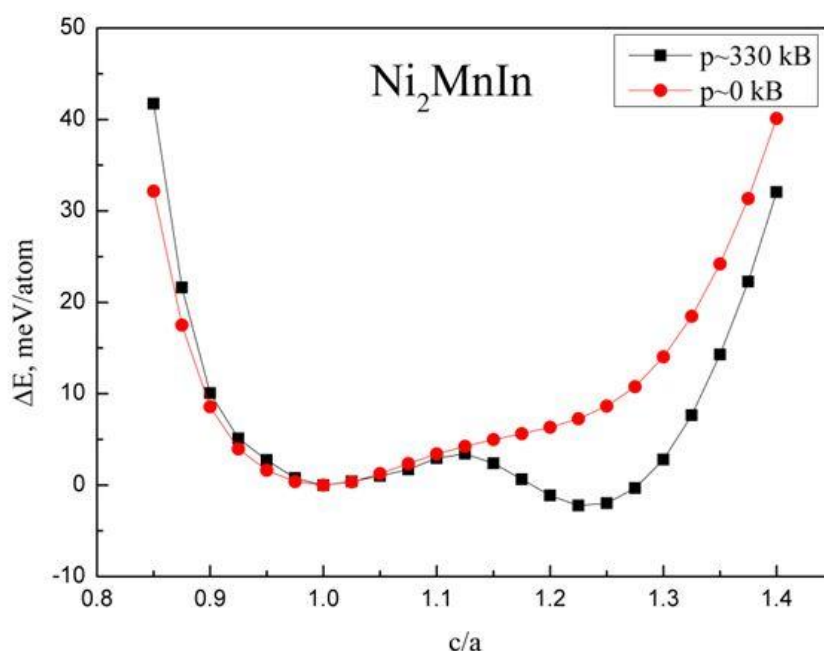


рис.1. Зависимость энергии основного состояния от тетрагонального искажения сплава Ni₂MnIn без воздействия давления и при приложенном внешнем давлении 330 кБ

На рис.1 представлена зависимость энергии основного состояния кубической и тетрагональной фазы сплава Ni₂MnIn без воздействия давления и при приложенном внешнем давлении. По данным расчётов, наблюдается практическое вырожденное состояние аустенитной и мартенситной фазы при внешнем воздействии давления на структуру.

Финансирование работы. Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 17-72-20022.

Список публикаций:

[1] Koshkid'ko, Y.S. // JMMM. 2017. V. 433. P. 234- 238.

[2] Pecharsky, V.K. // J. Appl. Phys. 1999. V. 86. P. 565–575.

[3] Kresse G., Furthmüller J. // Physical Review B. 1996. V. 54. P. 11169.

[4] Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. // Physical Review Letters. 1996. V. 77. P. 3865.

[5] Sun, J., Ruzsinszky A., Perdew J. P. // Phys. Rev. B. 2015. V. 115. 036402

Исследование из первых принципов структурных свойств сплавов Гейслера на основе $\text{Co}_2\text{Ni}_{1+x}\text{Z}_{1-x}$ ($Z=\text{Al, Ga, In, Sn}$)

Саносян Артур Азатович

Соколовский Владимир Владимирович, Бучельников Василий Дмитриевич

Челябинский государственный университет

Соколовский Владимир Владимирович, д.ф.-м.н.

arthursanosyan@mail.ru

Функциональные сплавы Гейслера на основе Co являются перспективными с точки зрения создания постоянных магнитов [1] в силу их низкой стоимости и конкурентоспособности с современными постоянными магнитами на редкоземельных элементах, таких как (Dy, Nd) [2]. В связи с этим перед фундаментальной наукой стоит задача поиска новых высокоэнергетических, без редкоземельных, - магнитотвердых материалов. Их уникальность объясняется высокими показателями намагниченности и магнитной анизотропии, благодаря сильному спин-орбитальному взаимодействию.

В данной работе рассмотрены сплавы Гейслера семейства $\text{Co}_2\text{Ni}_{1+x}\text{Z}_{1-x}$ ($Z = \text{Al, Ga, In, Sn}$). Исследования из первых принципов выполнены с помощью программного пакета «VASP» [3,4]. Расчеты магнитных и структурных свойств проведены для супер-ячейки, состоящей из 16 атомов, в приближении обобщенного градиента электронной плотности (GGA-PBE). В качестве кристаллической структуры аустенитной и мартенситной фазы рассмотрено пять кристаллических мотивов с различным атомным упорядочением (рис. 1). В результате рассчитаны равновесные состояния для каждой структуры с различным соотношением атомов Ni и Z, где ($Z = \text{Al, Ga, In, Sn}$). Показано, что соединения с In и Sn оказались энергетически невыгодными вследствие положительного значения энергии формирования. Для устойчивых соединений получены зависимости энергии кристалла от параметра решетки и степени тетрагонального искажения c/a (рис.2.).

На примере сплавов Co-Ni-(Al, Ga) из (рис.2.) видно, что обычная $L2_1$ структура невыгодна по энергии формирования и не может конкурировать с остальными рассматриваемыми композициями. Отсутствие минимумов при $c/a = 1$ позволяет сделать вывод, что аустенитные структуры этих соединений будут нестабильны. Мартенситные фазы, напротив, оказались устойчивы во всех рассмотренных случаях, которые демонстрируют минимальную энергию формирования при $c/a > 1$. Для сплава Co_2NiAl обратная структура наиболее выгодна с $c/a = 1.292$, в то время с увеличением избытка Ni энергетически выгодной становится T^p структура с более высоким тетрагональным искажениями $c/a = 1.380$ при $x = 0.25$ и 0.5 .

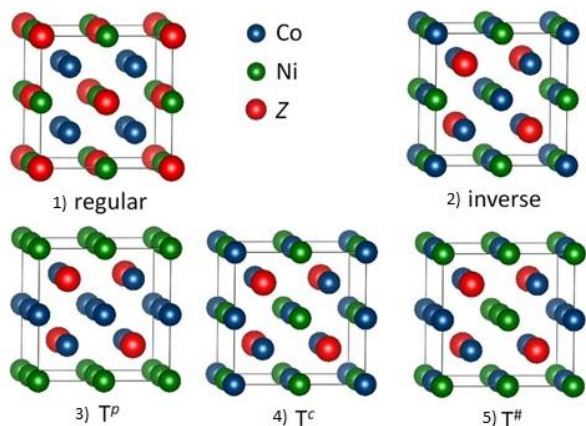


рис.1. Типы рассматриваемых кристаллических структур.

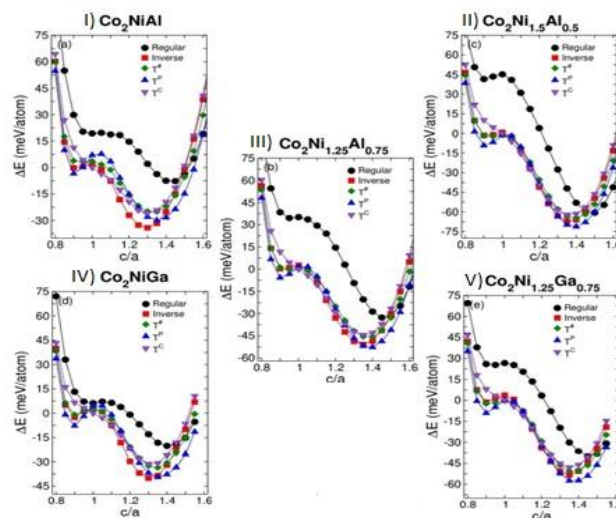


рис.2. Зависимость энергии кристалла $\text{Co}_2\text{Ni}_{1+x}\text{Z}_{1-x}$ ($Z=\text{Al, Ga}$)

Исследования выполнены при финансовой поддержке проекта государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации № 075-01391-22-00.

Список публикаций:

[1] A. Planes et al. // *J.Phys.: Condens. Matter*. 2009. Vol. 21. 233201.

[2] M.J. Kramer, R.W. McCallum, I.A. Anderson, S. Constantinides // *JOM*. 2012. Vol. 64, 752.

[3] G. Kresse and J. Furthmüller // *Phys. Rev. B*. 1996. Vol. 54. 11169.

[4] G. Kresse and D. Joubert // *Phys. Rev. B*. 1999. Vol. 59. 1758.

Расчет зонной структуры AgCrS_2
Сафаргалиев Данир Ильдарович
Латыпова Айназ Рамзиловна
Башкирский государственный университет
Давлетшина Алиса Данисовна
davletshinaalisa@rambler.ru

Исследование соединений AgCrS_2 представляет большой интерес с точки зрения магнитных свойств, электронной и ионной проводимостей, высокотемпературной сверхпроводимости, термоэлектрических свойств и других [1-4]. Характерной особенностью данных соединений является то, что одновалентные ионы обладают высокой подвижностью в базисных плоскостях гексагональной решетки и явление суперионной проводимости имеет двумерный характер. Двумерный суперионный проводник AgCrS_2 при температуре 300 К и 673 К имеют гексагональную структуру (R3m).

Рассмотрим зонную структуру AgCrS_2 при температуре 300 и 673 К (рис. 1 а, б). Согласно парциальной и полной плотности состояний в зависимости энергии от волнового вектора для данных соединений наблюдается spd-гибридизация энергетических уровней. При изменении температуры наблюдается изменение ширины запрещенной зоны. При $T = 300$ К ширина запрещенной зоны имеет значение 0,23 эВ, а при $T = 673$ К - 0,16 эВ в точке Г и А. В направлении Г-М имеет место пересечение зоной проводимости уровня Ферми, образованной р- и d-состояниями Cr с незначительным вкладом s-, р-состояний Ag и s-, р-состояний S.

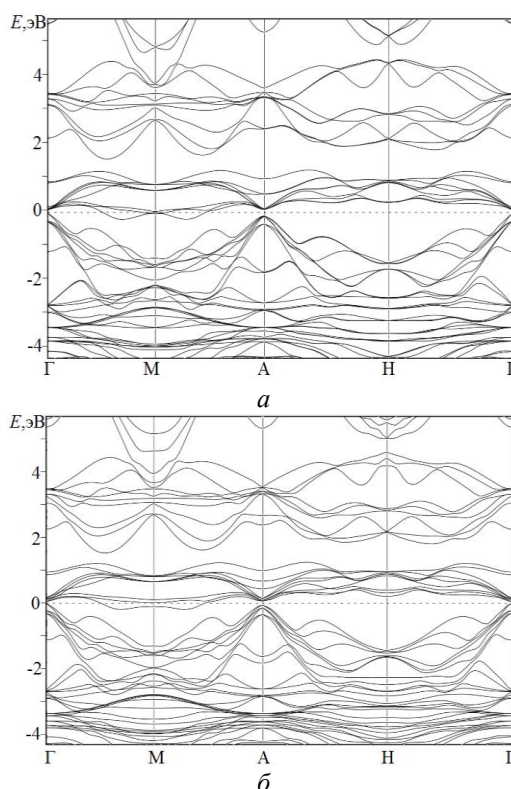


рис.1. Зонная структура AgCrS_2 при температуре а) 300 К; б) 673 К

На основе полученных результатов расчета можно сделать вывод о том, что соединение AgCrS_2 в высокотемпературной фазе является полупроводником с непрямым переходом. При повышении температуры наблюдается уменьшение ширины запрещенной зоны. Химическая связь в соединении AgCrS_2 имеет преимущественно ковалентный характер.

Список публикаций:

- [1] Акманова Г.Р., Биккулова Н.Н., Давлетшина А.Д. // *Электрохимия*. 2013. Т. 49. № 8. С. 921.
- [2] Ушаков А.В.: дис. ... канд. физ.-мат. наук. Екатеринбург, 2018. 149 с.
- [] Srivastava D., Tewari G.C., Karppinen M., Nieminen R.M. // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2013. V. 23. P. 105504.
- [] Васильева И.Г., Кардаш Т.Ю., Малахов В.В. // *Журнал структурной химии*. 2009. Т. 50. № 2. С. 302.

Пленки диоксида олова, полученные ВЧ-магнетронным напылением с ионно-лучевой обработкой

Соломенникова Александра Станиславовна

Закирова Раушания Мазитовна, Федотова Ирина Витальевна, Крылов Петр Николаевич

Удмуртский государственный университет

Крылов Петр Николаевич, к.ф.-м.н.

solomennikova@udman.ru

В настоящее время одними из самых перспективных тонкопленочных покрытий являются прозрачные проводящие покрытия на основе оксидов металлов (цинка, олова, индия). Прозрачные проводящие покрытия (ППП) обладают высокой электропроводностью и хорошей оптической прозрачностью.

В рамках данной работы тонкие пленки SnO₂ получали методом реактивного ВЧ-магнетронного напыления на модернизированной установке типа УРМ. Пленки напыляли на стеклянные подложки в смеси газов: кислород – 10% и аргон – 90%, рабочее давление газовой смеси составило 0,36 Па. Пленки осаждали на подложки без нагрева (при комнатной температуре, 22°C) и при температуре 200°C. Образцы были получены без ионно-лучевой обработки и с ионно-лучевой обработкой, т.е. при токах $I_{is} = 0, 10, 20, 30, 40, 50$ и 60 мА разряда ионного источника "Радикал М-100". Синтезированные образцы пленок подвергались отжигу при температуре 450 °С в течение 3 часов. Анализ фазовых составляющих пленок исследовали с помощью дифрактометра ДРОН-3.0 в монохроматизированном излучении $Fe-K_{\alpha}$ с длиной волны 0,193 нм. Оптические спектры пропускания исследовали с помощью спектрофотометра СФ-56 в диапазоне от 300 до 1100 нм. Толщину пленок d определяли с помощью микроинтерферометра МИИ-4. Удельное поверхностное сопротивление пленок измеряли четырёхзондовым методом.

Образцы, полученные при температуре конденсации 200 °С, имеют более резкий край поглощения по сравнению с образцами, полученными при температуре конденсации 22 °С. Пологий край поглощения, обусловленный «хвостами» Урбаха [15], может свидетельствовать об аморфной структуре пленок, что подтверждается результатами рентгенофазового анализа. Пленки SnO₂, полученные на холодных подложках являются рентгеноаморфными, а на горячих – поликристаллическими. Сопутствующая ионно-лучевая обработка пленок SnO₂, полученных при температуре конденсации 200 °С, приводит к изменению преимущественной ориентации кристаллитов. Пленки, полученные без ионно-лучевой обработки, имеют максимальное интерференционное отражение от плоскости (211). Введение ионно-лучевой обработки и увеличение тока ионного источника приводят к росту интенсивности интерференционного отражения от плоскости (110), а также вызывает смещение положения интерференционных максимумов в сторону меньших углов 2θ , т.е. вызывает увеличение параметров решётки диоксида олова. Можно предположить, что рост тока ионного источника приводит к изменению макронапряжений в системе плёнка-подложка из-за роста числа дефектов, возникающих в ходе ионно-лучевой обработки.

Толщины пленок, полученных на горячей подложке, практически не зависят от I_{is} и находятся в диапазоне 670–770 нм, а на толщины пленок, полученных при температуре 22 °С, ток ионно-лучевой обработки оказывает заметное влияние. В этом случае d меняется в диапазоне 740 – 1110 нм.

Исследования показали, что пленки, полученные при температуре 22 °С, имеют удельное сопротивление меньшее, чем пленки, полученные при температуре конденсации 200 °С. Сопутствующая ионно-лучевая обработка пленок SnO₂, полученных при температуре конденсации 22 °С, приводит к росту удельного сопротивления пленок от 10^{-4} Ом·см до $7 \cdot 10^{-1}$ Ом·см. Удельное сопротивление пленок, полученных при температуре конденсации 200 °С, с введением ионно-лучевой обработки увеличивается от $4 \cdot 10^{-2}$ Ом·см до 40 Ом·см (ток ионной обработки 40 мА), затем уменьшается до 7 Ом·см (ток ионной обработки 60 мА).

После хранения пленок на воздухе, спектры пропускания не изменили свой вид. При хранении удельное сопротивление для пленок, полученных при температуре 22°C, незначительно уменьшилось, кроме образца, полученного при токе ионной обработки 60 мА, для которого удельное сопротивление уменьшилось практически в 2 раза ($3,9 \cdot 10^{-1}$ Ом·см). Наибольшие изменения при хранении наблюдались у пленок SnO₂, сформированных на горячих подложках: происходит значительное увеличение удельного сопротивления пленок; в зависимости от тока разряда ионного источника, пленки могут приобретать диэлектрические свойства. Рентгенофазовый анализ не выявил изменений в пленках при длительном хранении на воздухе.

Из рис. 1 а видно, что после термической обработки, спектры пропускания для пленок, осажденных на подложку при температуре 22 °С, изменились. Эти изменения наиболее ярко проявляются в области длин волн 350 - 650 нм, где коэффициенты пропускания пленок на заданных длинах волн (в зависимости от длины волны) возрастают до нескольких раз. Для пленок, осажденных на подложки при температуре 200 °С, изменения спектров пропускания после термической обработки не существенны (рис. 1 б).

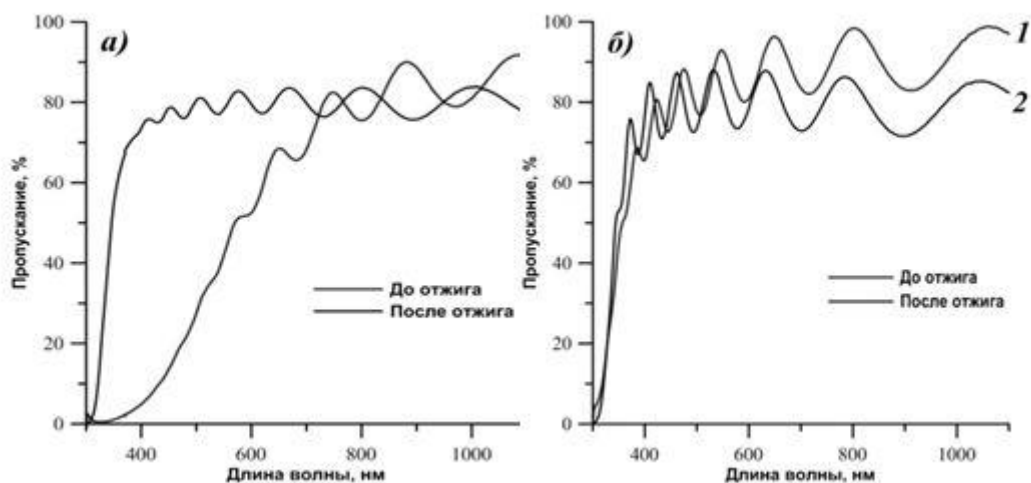


рис. 1. Спектры пропускания пленок SnO_2 , полученных при температурах подложек $22\text{ }^\circ\text{C}$ и без ионно-лучевой обработки (а) и $200\text{ }^\circ\text{C}$ с сопутствующей ионно-лучевой обработкой при токе разряда ионного источника 10 mA (б), до (кривые 1) и после отжига (кривые 2)

После термического отжига пленки, полученные при температуре осаждения $22\text{ }^\circ\text{C}$, стали поликристаллическими. Обнаружено появление кубической фазы SnO_2 после отжига для всех пленок. Отжиг не повлиял на ориентацию кристаллитов в пленках, осажденных при температуре $200\text{ }^\circ\text{C}$. После отжига на воздухе при температуре $450\text{ }^\circ\text{C}$ в течение трех часов все пленки приобрели диэлектрические свойства.

Электронное строение и динамика решетки Ve_2NCl

Тимофеев Вячеслав Сергеевич

Кемеровский государственный университет

Гордиенко Алексей Болеславович, д.ф.-м.н.

slava.timofeev.mail@gmail.com

Целью работы является исследование из первых принципов структурных параметров, электронной структуры, диэлектрических свойств, химической связи и динамики решетки гипотетического кристалла Ve_2NCl со структурой анти-халькопирита, которая отличается от классической структуры обратным порядком следования катионов и анионов.

Вычисления выполнялись с использованием пакета программ Quantum ESPRESSO [1] в локальном приближении теории функционала плотности. Для исследования была сформирована следующая схема псевдопотенциалов (ПП): Ve - сохраняющий норму ПП PZ (Perdew-Zunger) [2], N - сохраняющий норму ПП PZ, Cl - ультрамягкий ПП PZ. Энергии обрезания для плоских волн и представления электронной плотности составляли 100 и 1000 Ry соответственно, \mathbf{k} -сетка $4 \times 4 \times 4$. Оптимизация структуры проводилась квазиньютоновским методом по алгоритму Бройдена — Флетчера — Гольдфарба — Шанно (BFGS) [3]. Ниже кратко представлены результаты для кристалла Ve_2NCl .

Итоговые параметры решетки: $a = 8.44$ Бор (4.47 \AA) и $c = 15.84$ Бор (8.38 \AA). Тетрагональное сжатие $c/a = 1.88$. Равновесные длины неэквивалентных связей Ve-Cl и Ve-N равны 2.24 \AA и 1.64 \AA , соответственно, что определяет параметр смещения катионов $u = 0.37$.

Зонная структура кристалла Ve_2NCl представлена на рис.1(а). Как видно, рассматриваемый кристалл представляет собой диэлектрик с шириной запрещенной зоны $E_g = 3.33$ эВ. Максимум валентной зоны реализуется в центре зоны Бриллюэна (точка Г) и совпадает с конкурирующим минимумом зоны проводимости, следовательно, кристалл прямозонный. Структура валентной зоны схожа с, характерной для родственных кристаллов, решеткой халькопирита. Валентная зона разделена на три разрешенные полосы. Анализ проектированных плотностей состояний показал, что нижняя полоса валентной зоны принадлежит состояниям s-электронов атомов Cl, средняя полоса валентной зоны принадлежит состояниям s-электронов атомов N и верхняя полоса валентной зоны имеет смешанный характер, она состоит из p-состояний электронов Cl и N. Состояния электронов атомов Ve располагаются преимущественно в зоне проводимости.

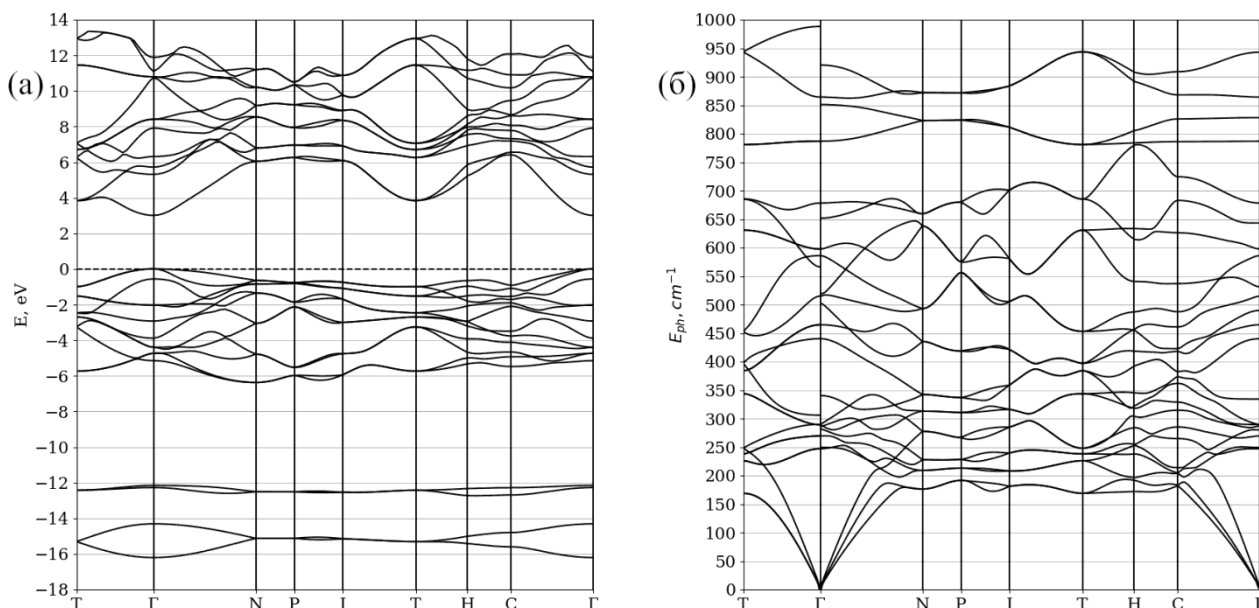


рис.1. Зонная структура (а) и фоновый спектр (б) кристалла Be_2NCl .

Характер распределения заряда, форма функции электронной локализации (ELF), значения эффективных зарядов Борна и высокочастотная диэлектрическая проницаемость ($\epsilon_{xy}=4.63$, $\epsilon_z=4.19$) указывают на ионный тип химической связи.

Фоновый спектр представлен на рис.1(б). Полная ширина порядка 1000 см^{-1} . Отсутствие мнимых частот подтверждает устойчивость гипотетического кристалла Be_2NCl со структурой анти-халькопирит. Также были рассчитаны вклады атомов в фоновые колебания в точке Γ . Вычислены полная и парциальные плотности фоновых состояний.

Список публикаций:

- [1] GENERAL DOCUMENTATION for Quantum ESPRESSO Режим доступа: <https://www.quantum-espresso.org/resources/users-manual> (Дата обращения: 21.02.2022)
 [2] Perdew J. P., Zunger A. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems // Phys. Rev. B. — 1981. — May. — Vol. 23, 10. — P. 5048–5079.
 [3] Nocedal, Jorge; Wright, Stephen J. Numerical Optimization. - 2nd edition. — USA: Springer, 2006. — ISBN 978-0-387-30303-1.

Разработка метода решения задачи перекрывающихся диапазонов в EXELFS спектроскопии

Хаметова Элина Фанилевна
 Бакиева Ольга Ринатовна

Удмуртский государственный университет

Бакиева Ольга Ринатовна, к.ф.-м.н.

elinaphanilevna851@gmail.com

В настоящее время самые актуальные разработки и инновации сконцентрированы вокруг материалов с низкой размерностью – это и сложная наноструктурированная керамика, и нанокompозитные материалы для фотоники, и топологические сверхпроводники для нового поколения квантовых компьютеров. Классическим методом исследования локальной атомной структуры вещества является спектроскопия EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure), которая реализована на станциях синхротронного излучения [1-3]. Для исследования легких элементов и сильно локализованных особенностей вместо рентгеновского возбуждения удобно использовать моноэнергетичный электронный пучок – спектроскопия EXELFS (Extended Electron Energy Loss Fine Structure). В результате электронного удара в спектре наблюдаются края характеристических потерь, за которыми расположены осцилляции периодом 15-20 эВ и протяженностью несколько сотен эВ, которая обусловлены когерентным рассеянием вторичного электрона на локальном окружении возбуждаемого атома [4-6]. Фурье-анализ таких спектров дает информацию о том, на каком расстоянии расположены атомы, какого сорта и в каком количестве. Однако, при исследовании многокомпонентных систем, до сих пор существует

проблема анализа спектров, в которых происходит наложение сигналов нескольких химических элементов в одном диапазоне энергий.

Например, в EXELFS спектре диоксида титана (рис. 1) присутствуют $L_{2,3}$ край возбуждения титана ($E_{loss} = 461$ эВ), за которым расположены осцилляции, протяженность которых, по данным модельных расчетов, может достигать 400-500 эВ. Фурье-анализ этой осциллирующей структуры может дать информацию о параметрах связей Ti-Ti и Ti-O. Однако, в этом же диапазоне энергий расположен K-край возбуждения кислорода ($E_{loss} = 532$ эВ), за которым также есть осцилляции, содержащие информацию о связях O-Ti и O-O. В результате экспериментальный спектр предстает собой суперпозицию возбуждений атомов титана и кислорода (рис. 1). Существующие на данный момент пакеты программ (Feffit, Viper, и др.) для анализа как EXAFS, так и EXELFS спектров не предназначены для анализа таких перекрывающихся структур.

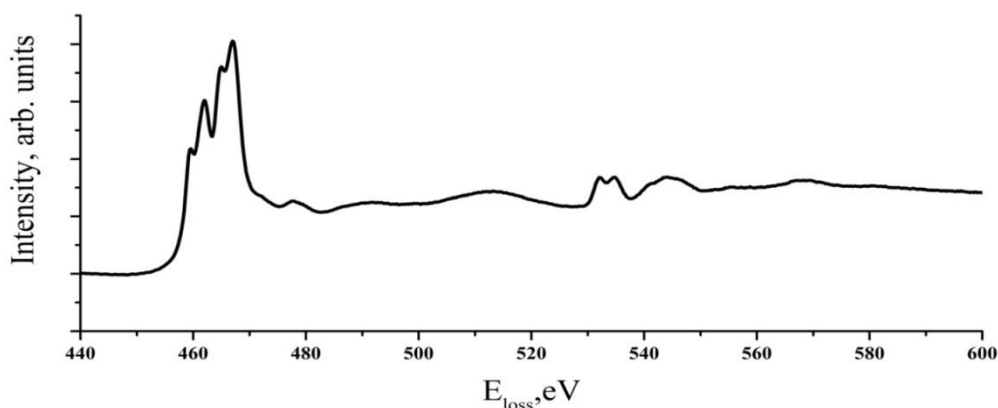


рис. 1. Спектр TiO_2 [7]

Решение данной проблемы было рассмотрено ранее для спектров, полученных в геометрии отражения вторичного электрона от поверхности образца [8]. В настоящей работе предложен алгоритм позволяющий анализировать спектры перекрывающихся диапазонов EXELFS спектров, полученных в геометрии эксперимента на просвет. Такие спектры получают на просвечивающих электронных микроскопах. Апробация метода была проведена на EXELFS спектре диоксида титана TiO_2 со структурой рутила (рис. 1.). Метод основан на моделировании сигналов титана и кислорода и учета их в экспериментальных данных. Полученные результаты параметров химических связей Ti-Ti, Ti-O, O-O (парциальные координационные числа, длины химической связи и параметры их дисперсии) показали хорошее соответствие с известными кристаллографическими параметрами.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ №121030100002-0. Исследования выполняли с использованием оборудования ЦКП «Центр физических и физико-химических методов анализа, исследования свойств и характеристик поверхности, наноструктур, материалов и изделий» УдмФИЦ УрО РАН.

Список публикаций:

- [1] P.A. Lee, P.H. Citrin, P. Eisenberger, B.M. Kincaid, *Extended X-ray absorption fine structure—its strengths and limitations as a structural tool* // *Rev. Mod. Phys.* 1981. V.53. pp. 769-806. doi:10.1103/RevModPhys. 53.769
- [2] B. Teo, D. Joy, *EXAFS Spectroscopy and Related Techniques* // Plenum, New York .1981
- [3] J. Rehr, R. Albers, *Theoretical approaches to X-ray absorption fine structure* // *Rev. Mod. Phys.* 3 (72) (2000), pp. 621-654. doi:10.1103/RevModPhys. 72.621
- [4] Yu.V. Ruts, D.E. Guy, D.V. Surnin, V.I. Grebennikov, *Secondary Electron Fine Structure – A Method of Local Atomic Structure Characterization*, in: H.S. Nalwa (Ed.)// *Handbook of Surfaces and Interfaces of Materials*, Academic Press, New-York. 2001.V. 2.
- [5] D. Guy, O. Bakieva, V. Grebennikov, D. Surnin, Y. Ruts, *Electron Energy Loss Spectroscopy for quantitative analysis of the local atomic structure of superthin oxide films on the surface of 3d-metals*// *J. El. Spectr. Rel. Phen.* 182 (2010) 115.
- [6] I.K.Averkiev, O.R.Bakieva, O.M.Nemtsova, A.A.Kolotov, F.Z.Gil'mutdinov, *Changes in the chemical compound and local atomic structure of ultrathin surface layers of Fe due to implantation of argon and oxygen ions* // *Applied Surface Science.* 2021. V.539
- [7] P. Ewels, T. Sikora, V. Serin, C. P. Ewels and L. Lajaunie. *A Complete Overhaul of the Electron Energy-Loss Spectroscopy and X-Ray Absorption Spectroscopy Database: eelsdb.eu.* "Microscopy and Microanalysis, available on CJO2016. doi:10.1017/S1431927616000179.
- [8] O.R.Bakieva, O.M.Nemtsova, *Electron energy loss spectroscopy equation for spectra with overlapping oscillations and its solution by a regularization method* // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms.* 2016. V.368. pp.103-111.

