

2 - Физика конденсированного состояния вещества

Астафьев Павел Андреевич, аспирант 4 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Резонансные свойства антисегнетоэлектриков в СВЧ диапазоне
Резниченко Лариса Андреевна, д.ф.-м.н.
e-mail: l.b.e.9.w.4.a.9.p@yandex.ru стр. 34

Баранов Даниил Константинович, аспирант 1 года обучения
Екатеринбург, Институт электрофизики УрО РАН, лаб. теоретической физики
Теоретическое исследование электрофизических свойств магнитных нанокompозитов металл-диэлектрик на основе Ni и Fe.
Некрасов Игорь Александрович, д.ф.-м.н.
e-mail: tony.baranov@mail.ru стр. 35

Глухов Кирилл Ильич, 4 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, институт естественных наук и математики
Структура и динамика решетки $Gd_2Sn_2O_7$ и $Y_2Sn_2O_7$: ab initio расчет
Чернышев Владимир Артурович, к.ф.-м.н.
e-mail: glukhovk172@yandex.ru стр. 36

Гусейнов Тимур Забитович, 4 курс
Ижевск, Удмуртский государственный университет, институт математики, информ-х технологий и физики
Определение скорости распыления тонких пленок Co и Cr методом послойного профилирования
Бакиева Ольга Ринатовна, к.ф.-м.н.
e-mail: ftiran@mail.ru стр. 37

Дорофеева Вера Вячеславовна, 4 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Локальные состояния и температуры магнитных фазовых переходов в $PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3$, $BiFe_{0.5}Sc_{0.5}O_3$ и $BiFe_{0.5}Cr_{0.5}O_3$
Кубрин Станислав Петрович, к.ф.-м.н.
e-mail: dorofeeva.v.501@gmail.com стр. 38

Жидель Карина Михайловна, аспирант 4 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Влияние GeO_2 на электрофизические параметры твердых растворов на основе BFO и PFN
Павленко Анатолий Владимирович, д.ф.-м.н.
e-mail: karinagidele@gmail.com стр. 39

Константинова Елизавета Ивановна, ст. преподаватель
Калининград, Калининградский государственный технический университет, Институт цифровых технологий
Исследование диэлектрических и оптических свойств шероховатых пленок серебра в поверхностно-усиленном комбинационном рассеянии
e-mail: konstantinovaeliz@gmail.com стр. 40

Коренистов Павел Сергеевич, аспирант
Екатеринбург, Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН
Структура, электрические и магнитные свойства интерметаллических соединений марганца Mn_3X ($X = Al, Ga, Ge$) после различных обработок
Марченков Вячеслав Викторович, д.ф.-м.н.
e-mail: korenistov@imp.uran.ru стр. 42

Коренистов Павел Сергеевич, аспирант
Екатеринбург, Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, лаб. низких температур
Об экспериментальной реализации теоретически предсказанных новых сплавов Гейслера. Спиновый бесщелевой полупроводник $FeCrTiAl$
Марченков Вячеслав Викторович, д.ф.-м.н.
e-mail: korenistov@imp.uran.ru стр. 41

Кочкин Андрей Сергеевич, аспирант 1 года обучения
Барнаул, Алтайский государственный технический университет, специальных технологий
Исследование локальных тензоров сольватированного 5-мерного пептида
Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н.
e-mail: andre211@mail.ru стр. 42

Кузнецова Александра Юрьевна, инженер-исследователь
Екатеринбург, Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, лаб.электрических явлений
Изучение и сравнение электронных структур интеркалатных систем FexTiSe_2 и TixTiSe_2
e-mail: kau@imp.uran.ru стр. 43

Макаренко Андрей Александрович, магистрант 1 года обучения
Ростов-на-Дону, НИИ физики Южного федерального университета
Уточнение стехиометрии титаната- ниобата стронция методом Ритвельда
Куприна Юлия Александровна, к.ф.-м.н.
e-mail: amakaren@sfedu.ru стр. 45

Меренцов Александр Ильич, с.н.с.
Екатеринбург, Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, лаб. электрических явлений
Метод сканирующей рентгеновской фотоэлектронной микроскопии (SPEM) и его реализация в синхротронных центрах
e-mail: Alexander.Merentsov@urfu.ru стр. 46

Меренцова Кристина Александровна, аспирант 2 года обучения, инженер исследователь
Екатеринбург, Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, отдел наноспинтроники
Зависимость фазового состава тонких плёнок $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ от температуры термообработки
Носов Александр Павлович, д.ф.-м.н.
e-mail: merencovak@imp.uran.ru стр. 46

Недоедкова Ольга Вадимовна, аспирант 1 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Исследование особенностей атомной и электронной структуры нанокompозитов ПАНИ/Ме: методы рентгеновской и оптической спектроскопии поглощения
Яловега Галина Эдуардовна, д.ф.-м.н.
e-mail: nedoedkova@sfedu.ru стр. 47

Нечитайлова Ирина Олеговна, 4 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Влияние механоактивации на сегнетоэлектрические материалы со структурой перовскита по данным рентгеновской спектроскопии XANES
Сухарина Галина Борисовна, к.ф.-м.н.
e-mail: inec@sfedu.ru стр. 48

Огнев Сергей Олегович, 2 курс
Томск, Томский политехнический университет, Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, отделение экспериментальной физики
Особенности фазовых превращений в сплавах титана с ванадием и молибденом: расчеты из первых принципов
Святкин Леонид Александрович, к.ф.-м.н.
e-mail: soo1@tpu.ru стр. 49

Перевалова Александра Николаевна, м.н.с.
Екатеринбург, Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, -
Особенности структуры, электро- и магнитосопротивления монокристалла MnBi_2Te_4
Марченков Вячеслав Викторович, д.ф.-м.н.
e-mail: domozhirova@imp.uran.ru стр. 51

Поносова Екатерина Евгеньевна, 3 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Структура активных центров медьсодержащих цеолитов: спектроскопия рентгеновского поглощения и компьютерное моделирование
Сухарина Галина Борисовна, к.ф.-м.н.
e-mail: ponosova02@bk.ru стр. 52

Терентьева Дарья Витальевна, 2 курс
Томск, Томский политехнический университет, инженерная школа ядерных технологий
Электронная структура поверхностного сплава Ag₂Bi на поверхностях (111) и (423) серебра
Святкин Леонид Александрович, к.ф.-м.н.
e-mail: dvt17@tpu.ru стр. 52

Тимофеев Вячеслав Сергеевич, аспирант 1 года обучения
Кемерово, Кемеровский государственный университет, институт фундаментальных наук
Электронное строение кристаллов Mg₂NA (A = F, Cl) с решеткой антихалькопирита
Гордиенко Алексей Болеславович, д.ф.-м.н.
e-mail: slava.timofeev.mail@gmail.com стр. 54

Трифонов Иван Олегович, 5 курс
Первоуральск, Уральский федеральный университет, физико-технологический институт
Влияние корреляционных эффектов на электронную структуру и магнитные свойства CuCO₂S₄: расчеты в рамках DFT+DMFT
Скорняков Сергей Львович, д.ф.-м.н.
e-mail: probrakeup@gmail.com стр. 55

Уткин Максим Алексеевич, аспирант 2 года обучения
Пермь, Пермский государственный национальный исследовательский университет, физический
Исследование дефектов в цилиндрической капле нематического жидкого кристалла
Макаров Дмитрий Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: utkinmaksim@gmail.com стр. 57

Фоминых Богдан Михайлович, 5 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, физико-технологический институт
Электронные транспортные свойства топологического полуметалла PtSn₄
Марченков Вячеслав Викторович, д.ф.-м.н.
e-mail: fominynkh@imp.uran.ru стр. 58

Чернов Евгений Денисович, м.н.с.
Екатеринбург, Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН
Электронная структура и магнитные свойства MnTe
Лукоянов Алексей Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: chernov_ed@imp.uran.ru стр. 59

Шашков Денис Игоревич, преподаватель
Краснодар, Кубанский государственный университет, физико-технический
Влияние циклической заморозки на динамику нанокластеров серебра на поверхности полипропиленовых и полиэфирных волокон
e-mail: ShiniX88@mail.ru стр. 60

Шкварин Алексей Сергеевич, с.н.с.
Екатеринбург, Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, лаб. рентгеновской спектроскопии
Кристаллическая и электронная структура Cu_{0,5}ZrSe₂
e-mail: shhkvarin@imp.uran.ru стр. 61

Юлдашева Алина Рифовна, ассистент
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Устойчивость скирмионов в фрустрированных антиферромагнитных/сегнеэлектрических бислоях с треугольной решеткой
e-mail: alina.yuldasheva.92@mail.ru стр. 62

Резонансные свойства антисегнетоэлектриков в СВЧ диапазоне

Астафьев Павел Андреевич

Иванов Иван Александрович, Борзых Александр Романович

Южный федеральный университет

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

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

Сегнетоэлектрические материалы нашли широкое применение в СВЧ технике в качестве материалов СВЧ резонаторов, фильтров, фазовращателей. Наиболее подходящим для данных приложений материалом считается титанат бария стронция благодаря низкими потерями в СВЧ диапазоне. Все же, до сих пор предпринимаются попытки улучшить свойства базовой системы, например, при помощи модификации ее структуры или усложнения элементного состава и создания композитов. В рамках подхода усложнения элементного состава, двухкомпонентные и многокомпонентные твердые растворы на основе PbTiO_3 (PT) и PbZrO_3 (PZ) также могут быть использованы в различных радиоэлектронных компонентах. Однако, в настоящее время не так много внимания уделяется электродинамическим свойствам данных материалов в областях концентрационных и температурных фазовых переходов. Между тем, наш предыдущий опыт измерения сегнетоэлектрических, антисегнетоэлектрических материалов, а также сегнетоэлектриков-релаксоров показал наличие резонансного поведения образцов различной формы и размера в электромагнитных полях СВЧ диапазона различных конфигураций. Рассматривались как двухкомпонентные, так и многокомпонентные твердые растворы на основе $(x-1)\text{PbZrO}_3$ - $x\text{PbTiO}_3$ (PZT) в области концентрационных и температурных фазовых переходов, при этом высокочастотные резонансы были обнаружены только в антисегнетоэлектрической фазе. Система $(x-1)\text{NaNbO}_3$ - $x\text{KNbO}_3$ (NKN) имеет схожую фазовую x -T диаграмму, поэтому, для подтверждения ранее полученных результатов требуется провести исследование иных составов, а также дополнительное исследование системы PZT с использованием иных методик измерения.

Таким образом, целью настоящей работы был поиск резонанса электромагнитных волн в образцах двухкомпонентных твердых растворов сегнето-антисегнетоэлектриков в СВЧ диапазоне.

Для проведения данного исследования был выбран ряд составов системы PZT в окрестностях концентрационного сегнетоэлектрического-антисегнетоэлектрического фазового перехода (молярная доля PbTiO_3 – 0...5 %), а также ряд составов системы NKN в антисегнетоэлектрическом состоянии (молярная доля KNbO_3 – 0...4 %). Образцы были выполнены в виде цилиндров высотой 1 мм и диаметром 12 мм с погрешностью по высоте не более 5%. Исследования проводились с использованием векторного анализатора цепей P9375A "Keysight" и нескольких измерительных ячеек. Прямая микрополосковая линия (МПЛ) с коаксиальными разъемами, имеющими предел по частоте 18 ГГц, использовалась для измерения коэффициента поглощения образцов материала, при этом образцы помещались в центр МПЛ на фиксированную позицию. Плата с двумя параллельными МПЛ использовалась для обнаружения резонансов, образцы помещались между МПЛ.

Результаты измерения и расчетов показывают, что по мере приближения к морфотропной области, у образцов состава PZT наблюдается снижение интенсивности и добротности резонансных максимумов поглощения, при этом в морфотропной области наблюдается резкое увеличение уровня поглощения в диапазоне частот 3-8 ГГц, не связанное с резонансом (рис. 1).

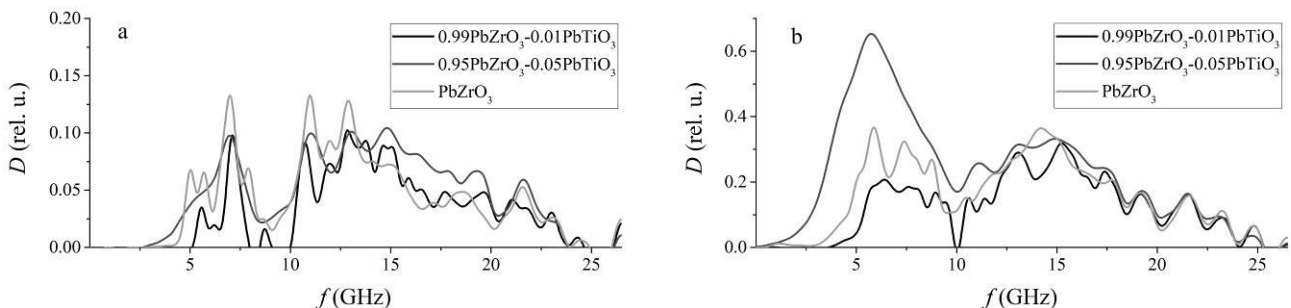


рис.1. Зависимости коэффициента поглощения от частоты образцов PZT измеренных в ячейке с двумя параллельными МПЛ (a) и в ячейке с прямой МПЛ (b).

В образцах состава NKN также наблюдается увеличение интенсивности и ширины максимумов поглощения, не связанное с резонансом (рис. 2 b). Об этом свидетельствует отсутствие существенных изменений в интенсивности и добротности резонансных максимумов (рис. 2 a).

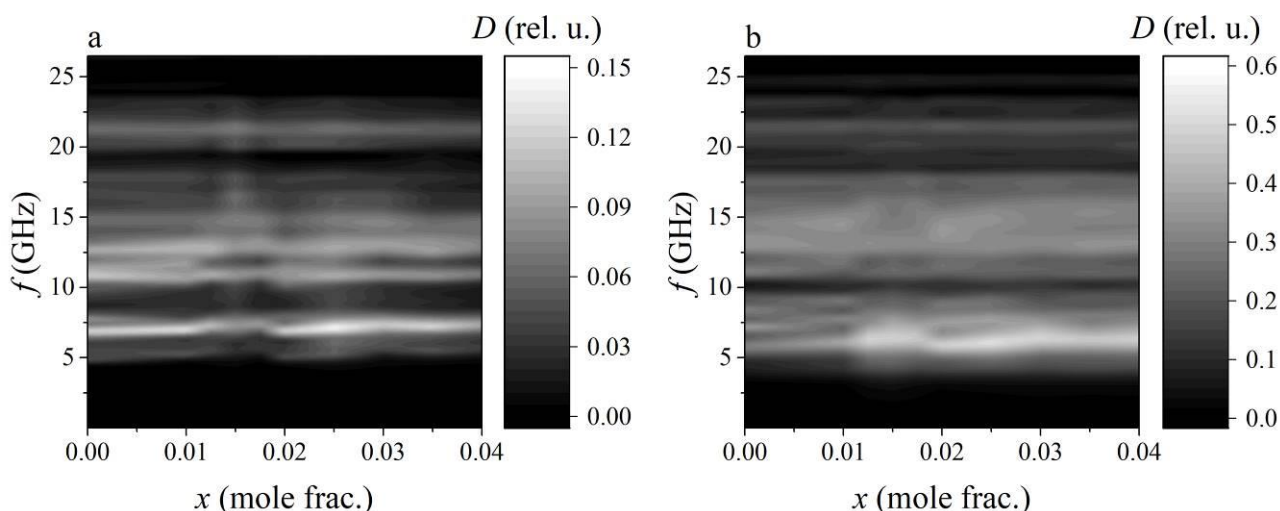


рис.2. Зависимости коэффициента поглощения от частоты и концентрации KNbO_3 образцов NKN измеренных в ячейке с двумя параллельными МПП (а) и в ячейке с прямой МПП (б).

Результаты исследования показали, что по мере приближения к морфотропной области увеличивается уровень и ширина полосы СВЧ поглощения как в системе PZT, так и в системе NKN. В обеих системах наблюдается резонансное поведение в антисегнетоэлектрической области, которое существует независимо от уровня поглощения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности 2023 г.). Проект № FENW-2023-0010/(Г30110/23-11-ИФ).

Название исследование электрофизических свойств магнитных нанокompозитов металл-диэлектрик на основе Ni и Fe

Баранов Даниил Константинович

Некрасов Игорь Александрович, Бекетов Игорь Валентинович, Багазеев Алексей Викторович, Малкин Александр Иванович, Князев Николай Сергеевич, Апресян Леон Арсенович

Институт электрофизики УрО РАН

Некрасов Игорь Александрович, д.ф.-м.н.

tony.baranov@mail.ru

Одним из направлений изучения физических свойств наночастиц является исследование их взаимодействия с электромагнитным излучением: исследование прохождения, отражения и поглощения электромагнитной волны композитным материалом с наночастицами в зависимости от их размера, формы и т.д. Основными величинами, которые характеризуют электрофизические свойства таких композитов, являются комплексные диэлектрическая и магнитная проницаемости.

В данной работе будет представлено экспериментальное и теоретическое исследование электрофизических свойств магнитных композитов на основе Fe и Ni с массовой долей наночастиц 10%, 20% и 40% при различных толщинах образцов в частотном диапазоне 8-23 ГГц. Для создания данных исследуемых композитов используется нанопорошок с диаметром частиц 75 нм, который получают методом электрического взрыва проволоки [1]. После чего этот нанопорошок размешан в эпоксидной смоле с ее дальнейшим затвердеванием. Для изучения роли агломераций также были выполнены композиты на основе карбонильного железа, частицы которого намного крупнее частиц нанопорошка, и проведено измерение их свойств в том же частотном диапазоне.

Комплексные величины коэффициентов отражения от границы образца конечной толщины для случая прямоугольного волновода получены методом линии передачи с использованием векторного анализатора цепей [2]. На основе полученных экспериментальных данных вычислены диэлектрическая и магнитная проницаемости исследуемых нанокompозитов с использованием математического аппарата метода NRW (Nicolson–Ross–Weir) [3].

Теоретический расчет эффективной диэлектрической проницаемости магнитных нанокompозитов в данной работе был проведен в рамках метода Бруггемана с учетом агломерации наночастиц [4]:

$$\varepsilon'_{obl/pr} = \varepsilon_1 \frac{1 + \frac{1}{2}(\beta_{obl/pr} - 3)f_2}{1 - \beta_{obl/pr}f_2} \quad (1)$$

где β - параметр анизотропии; ε_2 - диэлектрическая проницаемость металла; f_1 - объемная доля эпоксидной смолы; f_2 - объемная доля наночастиц; ε'_{obl} - эффективная диэлектрическая проницаемость нанокompозита со сплюснутыми агломератами; ε'_{pr} - эффективная диэлектрическая проницаемость нанокompозита с вытянутыми агломератами. Далее были вычислены коэффициенты отражения для случая падения электромагнитной волны в прямоугольном волноводе на границу слоя конечной толщины [5].



рис.1. Зависимость действительной части эффективной диэлектрической проницаемости от объемной концентрации наночастиц в композите с учетом агломерации наночастиц

На рис.1 представлена зависимость действительной части эффективной диэлектрической проницаемости от объемной концентрации наночастиц в композите с учетом агломерации наночастиц. Квадратный маркер соответствует экспериментальным данным, сплошная линия соответствует данным полученным в рамках метода Бруггемана, остальные маркеры соответствуют данным полученным с помощью формулы (1) с учетом агломерации наночастиц. Параметр ρ отображает отношение полуосей сфероидальных агломератов наночастиц.

Список публикаций:

- [1] Котов Ю. А. // *Нанотехнологии в России*. 2009. V. 4. P. 415.
- [2] Малкин А. И., Князев Н. С. // *CEUR Workshop Proceedings*. 2017. T. 1814. C. 45.
- [3] De Paula A.L., Rezende M.C., Barroso J.J. // *SBMO/IEEE MTT-S Int. Microw. Optoelectron. Conf.* 2011. P. 488.
- [4] D.A.G. Bruggeman // *Ann. Phys.* 1935. V. 416. P. 636.
- [5] Q. Chen et al. // *AIP Advances*. 2019. V. 9. P. 015113.

Структура и динамика решетки $Gd_2Sn_2O_7$ и $Y_2Sn_2O_7$: ab initio расчет

Глухов Кирилл Ильич

Чернышев Владимир Артурович

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

Чернышев Владимир Артурович, к.ф.-м.н.

glukhovk172@yandex.ru

Кристаллы со структурой пироклора $R_2B_2O_7$ (R – редкоземельный ион, B – Ti, Ge, Zr, Sn), привлекают внимание благодаря потенциальному применению в качестве люминофоров. Станнат иттрия $Y_2Sn_2O_7$ и станнаты с подрешеткой редкоземельных ионов также активируют другими редкоземельными ионами [1]. Представляет интерес исследование фононного спектра и упругих свойств редкоземельных станнатов. В работе проведен ab initio расчет фононного спектра $Gd_2Sn_2O_7$ и $Y_2Sn_2O_7$, определены частоты и типы ИК и КР мод. Рассчитаны упругие постоянные и твердость по Виккерсу всего ряда редкоземельных станнатов. Показано, что расхождение результатов расчета с экспериментом менее 10%, исходя из экспериментальных данных, имеющихся для некоторых представителей ряда.

Исследовано влияние гидростатического сжатия на фононный спектр станнатов гадолиния и иттрия. Расчеты проведены в рамках DFT с гибридными функционалами, учитывающими вклад нелокального обмена в формализме Хартри-Фока. Показана возможность использовать псевдопотенциал для описания внутренних оболочек редкоземельного иона при расчете фононного спектра и упругих свойств редкоземельных станнатов.

Использована программа CRYSTAL [2]. Из анализа векторов смещений, полученных из *ab initio* расчета, определена степень участия ионов в каждой моде.

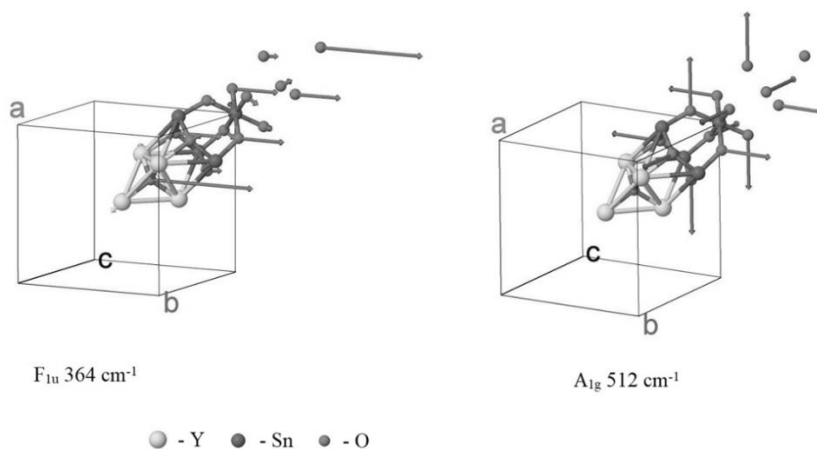


рис.1. Наиболее интенсивные ИК и КР моды в $Y_2Sn_2O_7$

Определены наиболее интенсивные ИК и КР моды стannата иттрия (рис.1) и стannата гадолиния. В моде F_{1u} участвуют преимущественно ионы кислорода, а в моде A_{1g} – только ионы кислорода в позиции 48f.

Определены моды с абсолютным или преимущественным участием кислорода в позиции 48f, характеризуемой координатой x . Показано, что в самой интенсивной КР-моду участвуют преимущественно ионы кислорода, находящиеся в позиции 48f.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № FEUZ-2023-0017)

Список публикаций:

[1] Cao R., Quan G., Shi Z., Chen T., Luo Z., Zheng G., Hu, Z. // *J. Phys. Chem. Solids*. 2018. V. 118. P. 109.

[2] <https://www.crystal.unito.it/index.php>

Определение скорости распыления тонких пленок Co и Cr методом послойного профилирования

Гусейнов Тимур Забитович

Валеев Ришат Галеевич, Бельтюков Артемий Николаевич, Бакиева Ольга Ринатовна

Удмуртский государственный университет

Бакиева Ольга Ринатовна, к.ф.-м.н.

ftiran@mail.ru

Исследования современных материалов требуют соответствующего инструментария и методов анализа. Наноразмерные пленки, слоистые и 2D системы обладают уникальными функциональными свойствами, которые зависят как от элементного состава, так и от размерности слоя. Так, система тонких пленок Co/Cr является перспективной для изготовления жестких магнитных дисков с высокой плотностью записи информации. При этом существенную роль играет как толщина пленок, так и их химическая чистота, поскольку эти параметры влияют на величину коэрцитивной силы [1, 2]. Для контроля химического и элементного состава слоев обычно используются методы электронной и рентгено-электронной спектроскопии. Послойное травление поверхности пленки ионами инертного газа и параллельно с этим получение спектральных данных позволяет определить профиль распределения химических элементов по глубине пленки. Однако существует проблема корректного определения скорости травли материала, поскольку имеющиеся на данный момент справочники содержат информацию для объемных веществ, а не наноразмерных пленок. Так, например для того, чтобы узнать на какой глубине находятся дефекты или неоднородности в элементном составе критически важно знать, сколько нм материала травливается в одном цикле профилирования.

В настоящей работе проведено исследование серии многослойных наноразмерных ферромагнитных систем C/Co/Cr, C/Co, C/Cr нанесенных методом магнетронного напыления (установка ВУП-5) на монокристаллический кремний. Слой углерода толщиной не более 5нм был нанесен на поверхность металлических пленок в качестве запирающего, для предотвращения окисления металла на воздухе. Проведена

аттестация химической чистоты синтезированных пленок. Исследование элементного состава поверхности проведено методом оже-электронной спектроскопии с помощью оже-микроанализатора Jamp 10S (Jeol). Изменение концентрации химических элементов по глубине образца исследовано с помощью профилирования потоком ионов аргона при ускоряющем напряжении 1 и 3 кэВ. Профилирование состояло из нескольких циклов травления ионами аргона. Один цикл – это травление ионами аргона в течение 1 минуты, с последующим получением оже электронного спектра. Показано, что вблизи слоя углерода и подложки кремния металлические пленки содержат кислород, то есть возможно образование оксидов как хрома, так и кобальта. С помощью метода атомно-силовой микроскопии была определена глубина профилирования многослойных систем. Полученные результаты позволили определить средние скорости травления каждого слоя, что является важной информацией необходимой для корректной аттестации систем на основе пленок Co/Cr.

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] С.П. Малюков, С.С. Зиновьев, А.В. Саенко, Ю.В. Клунникова, Д.В. Тимошенко // *Известия ЮФУ. Технические науки*. 2019. №6(208.) С. 25.

[2] S. Somboonsap, W. Rattanasakulthong // *Functional Materials Letters*. 2021. Vol. 14. №1. P. 2151010.

Локальные состояния и температуры магнитных фазовых переходов в $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$, $\text{BiFe}_{0.5}\text{Sc}_{0.5}\text{O}_3$ и $\text{BiFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$

Дорофеева Вера Вячеславовна
Пикуль Анастасия Денисовна
Южный федеральный университет
Кубрин Станислав Петрович
dorofeeva.v.501@gmail.com

Одной из проблем при создании материалов мультиферроиков является возможность управления температурами возникновения магнитных и сегнетоэлектрических переходов. В случае мультиферроиков с разбавленной магнитной подрешёткой особую роль играет локальная структура соединений. В работе проведено исследование образцов керамики $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$, $\text{BiFe}_{0.5}\text{Sc}_{0.5}\text{O}_3$ и $\text{BiFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$, приготовленных твердофазным синтезом. Образцы $\text{BiFe}_{0.5}\text{Sc}_{0.5}\text{O}_3$ и $\text{BiFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$ синтезировались под давлением в 4.5 ГПа. Рентгендифракционное исследование показало, что образцы однофазны и обладают структурой перовскита.

При комнатной температуре, мессбауэровские спектры образцов представляют собой парамагнитные дублеты с параметрами, характерными для ионов Fe^{3+} в октаэдрическом окружении. На рис. 1 представлены зависимости интенсивности парамагнитных линий мессбауэровских спектров $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$, $\text{BiFe}_{0.5}\text{Sc}_{0.5}\text{O}_3$ и $\text{BiFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$. Середины спадов данных зависимостей соответствуют температурам магнитных фазовых переходов (T_N) в данных образцах. Установлено, что в $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$ T_N составляет 150К, а в $\text{BiFe}_{0.5}\text{Sc}_{0.5}\text{O}_3$ и $\text{BiFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$ – 200 и 250К соответственно. Поскольку параметры кристаллических ячеек и микроструктура исследуемых керамик не имеет значимых отличий, то причина в различии T_N вероятно связана с распределением катионов в В-подрешётке. Для проверки этого предположения было проведено исследование локальной структуры исследуемых образцов методами мессбауэровской спектроскопии.

На рис. 2 представлены мессбауэровские спектры образцов $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$, $\text{BiFe}_{0.5}\text{Sc}_{0.5}\text{O}_3$, $\text{BiFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$, измеренные при 14К. Спектры разложены на несколько секстетов. Каждый секстет соответствует локальному состоянию ионов Fe^{3+} с различным числом ионов $\text{Nb}^{5+}/\text{Cr}^{3+}/\text{Sc}^{3+}$ в качестве ближайшего соседа. Расчет числа локальных состояний с помощью биномиального распределения показал, что всего существуют 6 состояний ионов Fe^{3+} , а распределение вероятностей данных состояний имеет симметричный характер. Значения площадей секстетов примерно равны концентрации ионов Fe^{3+} в соответствующих локальных состояниях. Во всех исследуемых образцах наблюдается отклонение распределения В-катионов от теоретического. Наиболее сильное отклонение наблюдается для $\text{BiFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$. В данном соединении происходит сегрегирование ионов Fe^{3+} и Cr^{3+} , что, кроме того, препятствует формированию цепей обмена $\text{Fe}^{3+} - \text{O}^{2-} - \text{Cr}^{3+}$. В железосодержащих оксидах со структурой перовскита T_N определяется числом цепей обмена $\text{Fe}^{3+} - \text{O}^{2-} - \text{Fe}^{3+}$. Чем больше таких цепей, тем выше значение T_N . Возникающая неоднородность распределения катионов В-подрешетки приводит к возрастанию концентрации цепей магнитного обмена. Наибольшая концентрация таких цепей возникает в $\text{BiFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$ в результате формирования кластеров с низким содержанием ионов Cr^{3+} .

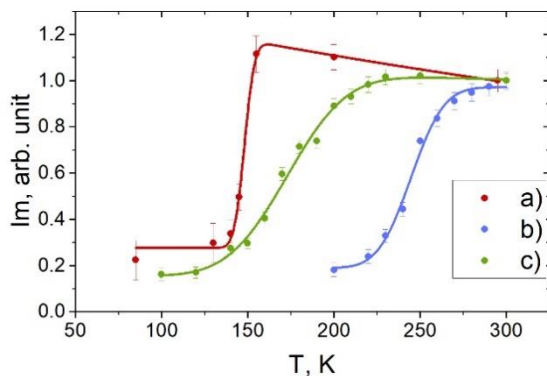


рис. 1. Температурные зависимости интенсивности парамагнитных линий мессбауэровских спектров образцов а) $PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3$, б) $BiFe_{0.5}Sc_{0.5}O_3$, в) $BiFe_{0.5}Cr_{0.5}O_3$ приведенных к их значениям при 300K

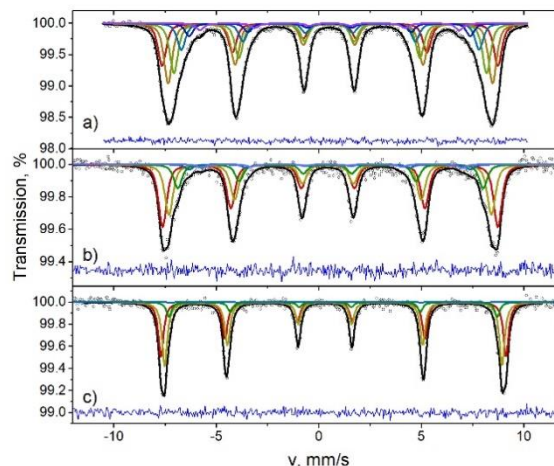


рис. 2. Мессбауэровские спектры образцов керамик а) $PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3$, б) $BiFe_{0.5}Sc_{0.5}O_3$, в) $BiFe_{0.5}Cr_{0.5}O_3$ измеренные при 14K

Таким образом, в $PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3$, $BiFe_{0.5}Sc_{0.5}O_3$, $BiFe_{0.5}Cr_{0.5}O_3$ значение T_N в сильно зависит от локальной структуры. В частности, распределение катионов В-подрешетки определяет число цепочек магнитного взаимодействия между ионами Fe^{3+} .

Влияние GeO_2 на электрофизические параметры твердых растворов на основе BFO и PFN

Жидель Карина Михайловна

Резниченко Лариса Андреевна

Южный федеральный университет

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

karinagidele@gmail.com

Мультиферроики, представляющие собой обширный класс материалов, сочетающих в себе сегнетоэлектрические, ферромагнитные и сегнетоэластические свойства, в настоящее время подробно изучаются в связи с потенциальной возможностью их применения в новых устройствах, основанных на взаимном контроле магнитного и электрического полей [1, 2]. Одними из наиболее изучаемых мультиферроиков являются $BiFeO_3$ (BFO), который обладает высокими значениями температур антиферромагнитного (АФМ) ($T_N = 653$ K) и сегнетоэлектрического (СЭ) переходов ($T_C = 1103$ K), и является наиболее популярным компонентом для конструирования мультиферроидных систем [3], а также $PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3$ (PFN), в котором размытый фазовый переход из параэлектрической в СЭ фазу происходит при $T_C = 370$ K [4]. Несмотря на то, что СЭ- и АФМ-упорядочения в PFN сосуществуют только ниже $T_N = (120 \div 150)$ K [4], слабые магнитоэлектрический и магнитодиэлектрический эффекты в нем могут проявляться и при температурах выше комнатной [5]. Однако широкое использование BFO и PFN ограничено рядом факторов. Так, высокие значения токов утечки, из-за повышенной электрической проводимости твердых растворов (ТР), обусловленной наличием кислородных вакансий, а также примесных фаз, накладывают ограничения на их использование. Решение этой проблемы возможно, в том числе, за счет создания многокомпонентных материалов на основе BFO и PFN со стабилизированной структурой и улучшенными свойствами. При этом одним из путей улучшения технологичности объектов и стабилизации макросвойств является их модификация различными элементами, в частности, приводящая к снижению температуры синтеза и спекания ТР.

В представленной работе описаны результаты исследования влияния модификатора диоксида германия GeO_2 на электрофизические параметры ТР бинарных систем на основе феррита висмута и феррониобата свинца состава $(1-x)BiFeO_3-xPbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3$ с $x = 0.3, 0.95$, модифицированных сверхстехиометрически в количествах $(0.5 \div 1.0)$ масс. %. Образцы получены методом твердофазных реакций с последующим спеканием по обычной керамической технологии. Измерительные образцы изготавливали в виде дисков (диаметр 10 мм, толщина 1 мм). Плоские поверхности обрабатывали алмазным инструментом по 6 классу точности. Металлизацию осуществляли двукратным вжиганием серебряносодержащей пасты при температуре $700^\circ C$ в течение 0.5 часа. Измерения относительной комплексной диэлектрической проницаемости $\epsilon^*/\epsilon_0 = \epsilon'/\epsilon_0 - i\epsilon''/\epsilon_0$ (ϵ' и ϵ'' –

действительная и мнимая части ε^* соответственно, ε_0 – диэлектрическая постоянная) производили в диапазоне частот $f = 20\text{--}2 \cdot 10^6$ Hz в интервале температур 20–650 °C на автоматическом измерительном стенде на базе LCR-метра Agilent E4980A и терморегулятора Варта ТП703 соответственно. P – E -петли диэлектрического гистерезиса исследовались с использованием схемы Сойера–Тауэра при частоте электрического поля $f = 50$ Гц и комнатной температуре. Формирование поляризованного состояния осуществляли методом «горячей» поляризации, при которой электрическое поле к образцам прикладывали при высокой температуре. Исследования пьезоэлектрических и упругих параметров ТР при комнатной температуре проводили методом резонанса—антирезонанса с помощью прецизионного LCR-метра Agilent 4980A. Показано, что введение модификатора привело к изменению характера диэлектрических, сегнетоэлектрических и пьезоэлектрических зависимостей по сравнению с «чистыми» составами ТР данных систем. Предложено объяснение наблюдаемым эффектам.

Использовано оборудование Центра коллективного пользования НИИ физики Южного федерального университета «Электромагнитные, электромеханические и тепловые свойства твердых тел».

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности 2023 г.). Проект № FENW-2023-0010/(ГЗ0110/23-11-ИФ).

Список публикаций:

- [1] Spaldin N.A., Ramesh R. // *Nature materials*. 2019. V. 18. No. 3. P. 203-212.
- [2] Kleemann W. et al. // *IEEE transactions on ultrasonics, ferroelectrics, and frequency control*. 2010. V. 57. No. 10. P. 2228-2232.
- [3] Yuan G.L. et al. // *Solid State Communications*. 2006. V. 138. No. 2. P. 76-81.
- [4] Венецьев Ю.Н., Гагулин В.В., Любимов В.Н. *Сегнетомагнетики*. М.: Наука, 1982. 224 с.
- [5] Турик А.В. и др. // *Физика твердого тела*. 2012. Т. 54. No. 5. С. 891-893.

Исследование диэлектрических и оптических свойств шероховатых пленок серебра в поверхностно-усиленном комбинационном рассеянии

Константинова Елизавета Ивановна

А.В. Цибульникова, А.Ю. Зюбин, В.А. Слежкин, В.В. Брюханов, И.Г. Самусев, П.Н. Медведская, И.И. Лягун

Калининградский государственный технический университет

konstantinovaeliz@gmail.com

Явление оптической генерации поверхностных плазмонов в наночастицах благородных металлов широко используется в производстве сенсоров, в создании наноплазмонных антенн, спазеров и других оптоэлектронных устройств и преобразователей. Индуцированная плазмонным резонансом высокая локализация электромагнитных полей вблизи металлических наночастиц (НЧ) и наноконструкций, формирующих шероховатую микро- и наноповерхность, проявляется в изменении модового состава электронных колебаний, что влияет на эффективность передачи электронной энергии на молекулярные системы. Таким образом, исследования процессов генерации плазмонов на микро- и нанощероховатых поверхностях имеют практический интерес для разработки сенсоров.

В данной работе методами электронной, атомно-силовой микроскопии и рамановской спектроскопии (FIB-SEM Zeiss Crossbeam 540; Centaur U: DPSS: $\lambda = 532$ нм, $W = 50$ МВт; $\lambda = 632$ нм, $W = 5$ МВт) и эллипсометрии (Auto-Se (Horiba)) исследовались шероховатые пленки серебра, полученных электроосаждением из цианидно-тиоцианатного электролита с последующим анодным растворением поверхностного слоя. В результате толщина пленок составила 0,25; 0,50 и 1,25 мкм. Часть образцов была модифицирована НЧ Ag ($R=10$ нм) из водного гидрозоля серебра путем послойной физической адсорбцией ($N_{\text{слой}} \sim 5 \cdot 10^{12}$ см⁻²).

Электронно-микроскопические изображения образцов свидетельствуют о различиях в расположении кристаллитов серебра, а так же агрегации частиц на пленках, модифицированной НЧ Ag. Эллипсометрическое исследование показало красное смещение максимума действительной части $\text{Re}(\varepsilon(\omega))$ спектральной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\omega)$ в длинноволновую сторону, что объясняется изменением эффективности генерации поверхностных плазмонов за счет увеличения шероховатости $\langle \xi \rangle^2$. Сопоставление теоретического распределения и экспериментально измеренной функции $\varepsilon(\omega)$ позволило установить ширину запрещенной зоны исследуемых пленок. Ширина варьировалась от $E_0 \approx 0,7$ эВ до $E_0 = 1,4$ эВ.

Изучение спектров комбинационного рассеяния серебрянных пленок, показало, что при лазерном возбуждении длинами волн $\lambda = 532$ нм и $\lambda = 632$ нм интенсивность пленок со слоями НЧ Ag составила 10^3 , что на один-два порядка выше интенсивности чистых шероховатых пленок. Данное увеличение интенсивности

наблюдалось при нерезонансном возбуждении образцов длиной волны $\lambda = 632$ нм (пик плазмонного резонанса для образцов зарегистрирован на $\lambda \approx 405$ нм). Рассчитанное значение фактора Парселла дает значение усиления локального поля в 10^2 . Предполагаем, что различие в экспериментальных и теоретических значениях усиления связано со вкладом в генерацию поверхностных плазмонов рассеяния плазмонного взаимодействия в агрегатах НЧ Ag пленки. Учитывая эти вклады в изготовлении оптических сенсоров на основе плазмонного резонанса, можно заметно повысить их эффективность и сократить затраты на производство.

Об экспериментальной реализации теоретически предсказанных новых сплавов Гейслера. Спиновый бесщелевой полупроводник FeCrTiAl

Коренистов Павел Сергеевич

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН

korenistov@imp.uran.ru

В последние годы для поиска новых материалов, благодаря возросшим компьютерным мощностям, используют DFT расчеты, с помощью которых, в частности, можно предсказывать термодинамически стабильные структурные состояния [1–3]. Результаты таких предсказаний часто используют для синтеза новых сплавов и соединений, в том числе сплавов Гейслера [4, 5].

В основе планируемой работе лежат предсказания, выполненные К. Гао в 2019 [1]. В своей работе, с помощью высокопроизводительного отсева, в основе которого лежат DFT расчеты, он предсказал 17 новых спиновых бесщелевых полупроводников (СБП), которые могут кристаллизоваться в структуру с симметрией Y -типа и имеют малые значения E_{CH} (E_{CH} – convex hull energy; обозначает термодинамическую устойчивость по отношению к стабильной фазе в данном фазовом пространстве). В соединениях, в которых наблюдаются СБП-состояния, благодаря особенностям электронной структуры вблизи уровня Ферми E_F , а именно – наличию энергетической щели для электронных состояний со спином вниз и нулевой щели для состояний со спином вверх, может возникать близкая к 100 % спиновая поляризация носителей заряда. В таких материалах переход электронов из валентной зоны в зону проводимости может происходить практически без затрат энергии, что является перспективным для использования таких соединений в новых энергетически эффективных устройствах электроники и спинтроники [6, 7].

Цель данной работы – рассказать о теоретико-экспериментальном подходе, направленном на поиск новых сплавов Гейслера, который включает в себя:

1. Описание метода, позволяющего предсказать термодинамически-стабильные структурные состояния соединения.
2. Выбор сплава для экспериментальной реализации и анализ свойств, входящих в него элементов (температура плавления, давление паров жидкой фазы и т.д.).
3. Выбор метода приготовления сплава.

На текущий момент выполнен анализ работы [1], для экспериментального изучения выбрано 4 соединения: FeCrTiAl, FeCrHfAl, MnCrNbAl и NiFeMnAl, имеющие малые значения $E_{CH} < 0.06$ eV/atom.

В дальнейшем планируется приготовить данные соединения методом дуговой плавки, определить режим отжига для получения упорядоченной структуры и изучить свойства полученных материалов, сравнить их с сигнатурами СБП-состояний.

Список публикаций:

- [1] Q. Gao, I. Opahle, H. Zhang // *Physical Review Materials*. 2019. V. 3. № 2. p. 024410.
- [2] J. He, S. S. Naghavi, V. I. Hegde, M. Amsler, C. Wolverton // *arxiv.org/abs/1802.04875*.
- [3] J. He, K. M. Rabe, C. Wolverton // *MRS Bull.* 2022. V. 47. № 6. P. 559.
- [4] S. Anand, M. Wood, Y. Xia, C. Wolverton, G. J. Snyder // *Joule*. 2019. V. 3. № 5. P. 1226.
- [5] H. Zhu et al. // *Nature Communications*. 2019. V. 10. № 1. P. 270.
- [6] D. Rani, L. Bainsla, A. Alam, K. G. Suresh // *Journal of Applied Physics*. 2020. V. 128. № 22. P. 220902.
- [7] Z. Yue, Z. Li, L. Sang, X. Wang // *Small*. 2020. V. 16. № 31. P. 1905155.

Структура, электрические и магнитные свойства интерметаллических соединений марганца Mn_3X ($X = Al, Ga, Ge$) после различных обработок

Коренистов Павел Сергеевич

Семяникова Алена Александровна, Ирхин Валентин Юрьевич, Пилюгин Виталий Прокофьевич, Марченкова Елена Борисовна, Марченков Вячеслав Викторович

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН

Марченков Вячеслав Викторович, д. ф.-м. н.

korenistov@imp.uran.ru

Синтез, исследование структуры и физических свойств интерметаллических соединений на основе марганца Mn_3X ($X = Al, Ga, Ge$ и др.) представляют большой фундаментальный и практический интерес, поскольку в них могут наблюдаться состояния антиферромагнетика, скомпенсированного ферромагнетика, топологического полуметалла и др. Они обладают необычными, весьма чувствительными к внешним воздействиям магнитными и электронными характеристиками, что можно использовать для практических применений. Структура таких соединений, а, следовательно, и их электронные и магнитные характеристики, может сильно зависеть от способов приготовления и обработки. Поэтому представляет интерес изучение взаимосвязи структуры, электронных и магнитных свойств таких материалов. Цель данной работы - изучение роли особенностей структуры, зависящей от способа приготовления и обработки сплава, в формировании электрических и магнитных характеристик интерметаллических соединений марганца Mn_3X ($X = Al, Ga, Ge$).

Объемные поликристаллические сплавы Mn_3X ($X = Al, Ga, Ge$) были синтезированы в индукционной печи в атмосфере очищенного аргона. Приготовленные слитки отжигали в течение 72 ч при 650°C в атмосфере аргона с последующим охлаждением до комнатной температуры. Затем сплавы подвергались быстрой закалке (БЗР) из расплава и интенсивной деформации кручением (ИДК). БЗР-ленты получали из объемных соединений при комнатной температуре под давлением 0.28 атм в атмосфере очищенного аргона при скорости охлаждения $\sim 10^4$ - 10^5 град/сек. ИДК-пластины получали в наковальнях Бриджмена под давлением ~ 10 ГПа с последующим поворотом одной наковальни относительно другой. Аттестация литых и подвергнутых обработке соединений выполнена методами рентгеноструктурного анализа и сканирующей электронной микроскопии в Центре коллективного пользования «Испытательный центр нанотехнологий и перспективных материалов» (ЦКП) ИФМ УрО РАН. Измерения электросопротивления, эффекта Холла и намагниченности также проводили в ЦКП УрО РАН.

В результате проведенных исследований показано, что БЗР- и ИДК-обработка приводит к существенному изменению микроструктуры соединений Mn_3X ($X = Al, Ga, Ge$), что проявляется в поведении их электросопротивления, намагниченности и эффекте Холла. Полученные результаты обсуждаются в рамках существующих теоретических представлений.

Исследования выполнены за счет гранта Российского научного фонда (22-22-00935).

Исследование локальных тензоров сольватированного 5-мерного пептида

Кочкин Андрей Сергеевич^{1,2}

Теников Кирилл Андреевич¹, Сальникова Регина Евгеньевна², Агапов Иван Евгеньевич²

²Алтайский государственный университет

¹Алтайский государственный технический университет

¹Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н.

andre211@mail.ru

Сольватированный 5-мерный пептид — это пептидная молекула, состоящая из пяти аминокислотных остатков, каждый из которых связан с сольватирующими группами, такими как водород, кислород или азот. В контексте белковой химии сольватирование относится к процессу, в котором молекула взаимодействует с молекулами растворителя, образуя гидратированный комплекс. Сольватированные пептиды могут использоваться для изучения взаимодействия пептида с окружающей средой, так как сольватационные группы могут изменять свойства молекулы, такие как растворимость и реакционная способность.

Изучение сольватированных 5-мерных пептидов имеет большую актуальность в различных областях науки и технологии, включая материаловедение и нанотехнологии. Например, сольватированные пептиды могут использоваться для разработки новых материалов, таких как наночастицы [1, 2], которые могут быть использованы для доставки лекарств и других биологически активных веществ в организм. Изучение

сольватированных пептидов также имеет важное значение для биологической науки в целом, так как пептиды играют важную роль во многих биологических процессах, включая метаболизм.

В настоящее время компьютерные симуляции широко используются для изучения этих процессов, так как они могут либо подтвердить, либо опровергнуть научные гипотезы, которые в противном случае могли бы быть невозможны для проверки. Более того, использование компьютерных моделей позволяет экономить деньги, так как эксперименты в реальных условиях могут быть очень дорогими. С помощью компьютерных технологий можно создавать сложные абстрактные модели и приближаться к изучению реальных объектов.

Анализ локальных тензоров деформации сольватированного 5-мерного пептида представляет собой сложную задачу, требующую детального понимания структуры и динамики системы, а также использования передовых вычислительных методов. Для вычисления тензора локальной деформации можно использовать тензор градиента деформации, который описывает деформацию материала в ответ на приложенные силы или напряжения. Для этого необходимо сравнить положения соседних атомов или групп атомов в разные моменты времени во время моделирования молекулярной динамики. Для моделирования сольватированного 5-мерного пептида используется подход, основанный на создании модели атомов пептида, связанных химическими связями, а также окружающих молекул растворителя, которые взаимодействуют между собой. Для моделирования сольватированного 5-мерного пептида необходимо учитывать его структуру и динамику, а также окружающие молекулы растворителя. Это является сложной задачей, требующей использования передовых вычислительных методов, например моделирования молекулярной динамики и анализа данных.

В рамках нашего исследования модель пептида представляется в виде набора атомов, соединённых химическими связями, а окружающие молекулы растворителя - в виде набора частиц с собственными взаимодействиями. Тензор деформации характеризуется девятью скалярными величинами, которые записываются в виде матрицы [3, 4]:

$$T_{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_z \end{pmatrix} \quad (1)$$

В ходе работы в LAMMPS [5] и OVITO [6] было выполнено моделирование по вычислению локальных тензоров деформации на основе относительного движения соседних частиц сольватированного 5-мерного пептида. А именно, мы проанализировали деформацию объёма от деформации сдвига и зависимость выходного тензора деформации от выходного тензора растяжения.

Полученные результаты позволяют нам сделать следующие выводы: в ходе исследования обнаружено, что тензор деформации пептида обратно пропорционален тензору растяжения, в то время как объёмная деформация прямо пропорциональна деформации сдвига. Полученные результаты могут дать ценную информацию о структуре и динамике пептида, а также о его взаимодействиях с окружающими молекулами. Однако, такой анализ требует использования передовых вычислительных методов и инструментов анализа.

Список публикаций:

- [1] Брагин А. О. // Компьютерный анализ связи конформационных пептидов с аллергенностью белков: специальность 03.01.09 "Математическая биология, биоинформатика": автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата биологических наук. Новосибирск. 2013. 17 с.
- [2] Володькин А. А., Арцис М. И., Миль Е. М. // Прогнозирование свойств модифицированных пептидов методом квантовой химии. Вестник Технологического университета. 2020. Т. 23. № 3. С. 23-26.
- [3] Старов А. В. Воронкова Г.В. // Теория упругости. Курс лекций с примерами решения задач. Волгоград: ВолгГАСУ, 2015.
- [4] Якубе Х. Д., Ешкайт Х. // Аминокислоты, пептиды, белки. М: Мир. 1985. С. 92-94.
- [5] LAMMPS Molecular Dynamics Simulator // <https://lammps.org>.
- [6] Ovito. Simulation visualization // <https://www.ovito.org>.

Изучение и сравнение электронных структур интеркалатных систем Fe_xTiSe_2 и Ti_xTiSe_2

Кузнецова Александра Юрьевна

Сулов Евгений Андреевич, Титов Александр Натанович

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН

Титов Александр Натанович

kau@imp.uran.ru

Кристаллическая структура дихалькогенидов титана TiX_2 (X – S, Se, Te) представляет собой слои Ti-X-Ti, связанных между собой ковалентной связью, между слоями существует слабая Ван-дер-Ваальсовой связь. Благодаря межслоевому пространству существует возможность обратимо внедрять атомы или даже целые

молекулы. На рис. 1 представлена структура соединений TiX_2 и отмечены позиции для интеркалантов. При этом полученные новые материалы будут иметь другие свойства отличны от свойств матричной фазы.

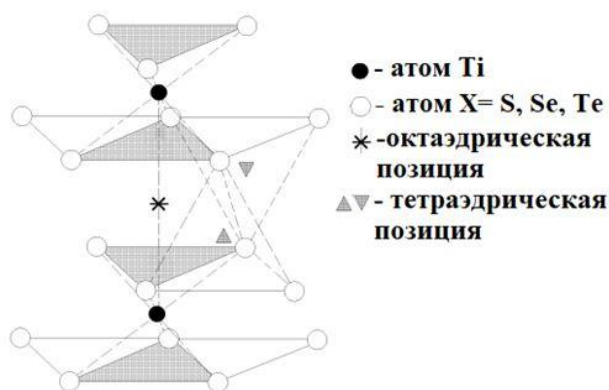


рис.1 Структура слоистых дихалькогенидов титана

Соединения Me_xTiSe_2 (Me – 3d-металлы), вызывают интерес в виду изменения их магнитных и электрических свойств. Такие эффекты связывают с изменением электронной структуры. В работе [1] было проведено исследование системы Ti_xTiSe_2 ($x > 0,5$) методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS). Результаты XPS показали, что присутствие атомов Ti в межслоевом пространстве приводит к образованию связи Ti–Ti между атомами титана в регулярных позициях решетки и атомами в межслоевом пространстве. Применимость метода ЭДС для изучения электронной структуры была показана в работах [2, 3].

Исследование системы Ti_xTiSe_2 при концентрациях в диапазоне $0 < x < 0,5$ и представление о природе связей также вызывают интерес. Однако в литературе данных по соединениям с малыми концентрациями титана не представлено.

Нами было проведено исследование электронной структуры системы Ti_xTiSe_2 при $x < 0,5$, а также проведен сравнительный анализ систем Fe_xTiSe_2 и Ti_xTiSe_2 . На рисунке 2 (а) показана зависимость параметра решетки c от концентрации металла в Me_xTiSe_2 . Для системы Fe_xTiSe_2 в интервале $0 < x < 0,2$ параметр c линейно уменьшается, что говорит о сжатие кристаллической решетки, такой же эффект наблюдается и для системы Ti_xTiSe_2 . При дальнейшем увеличении концентрации железа в системе параметр c остается постоянным, а для системы Ti_xTiSe_2 в интервале $0,2 < x < 0,5$ параметр c монотонно увеличивается, что сопровождается изменением кристаллической решетки с гексагональной до моноклинной.

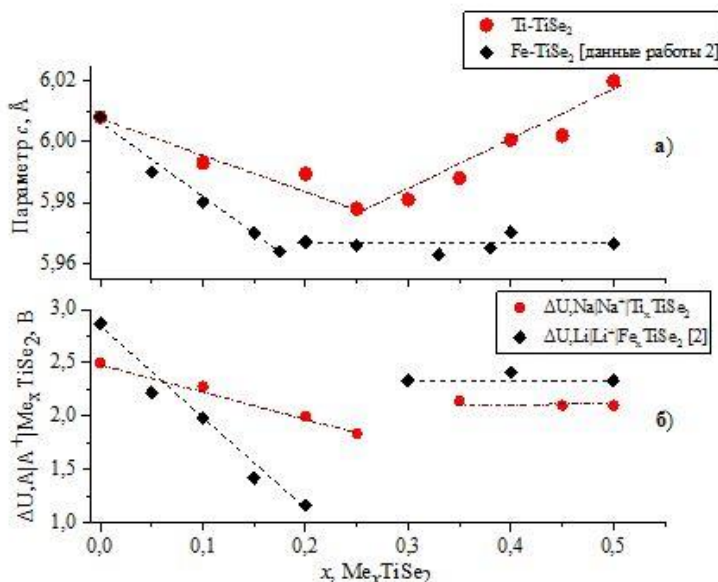


рис.2. Зависимость параметра элементарной решетки c (а) и значения ΔU электрохимических ячеек (б) от содержания металла в Me_xTiSe_2 .

В работе [2] была исследована система Fe-TiSe₂ методом ЭДС с помощью электрохимических ячеек Li|Li⁺|Fe_xTiSe₂. На рис. 2 (б) показана концентрационная зависимость значения ΔU от содержания металла в системе Me_xTiSe_2 . Скачкообразное изменение значений ЭДС при составе Fe_{0,25}TiSe₂, авторы работы [2] объяснили изменением природы связей в системе. Связи Ti-Fe-Ti разрываются и образуются связи Fe-Fe в

межслоевом пространстве. Данные были подтверждены спектральными методами (XPS, XAS, ResPES). Нами была получена концентрационная зависимость значения ΔU от содержания металла в системе Ti_xTiSe_2 методом ЭДС с помощью электрохимических ячеек $Na|Na^+|Ti_xTiSe_2$ (рис.2 (б)). Также как и для системы Fe_xTiSe_2 интервале $0 < x < 0,25$ наблюдается уменьшение ЭДС, что говорит об образовании ковалентных центров Ti-Ti вдоль оси z, при составе $Ti_{0,25}TiSe_2$ происходит скачок ЭДС, в связи с этим ковалентные центры разрываются и образуются связи интеркалированных атомов Ti-Ti вдоль плоскости xy. Данные подтверждаются спектрами, представленные в работе [1].

Таким образом, в системе Ti_xTiSe_2 наблюдается процесс образования локализованных связей при упорядочении ($x=0,25$ и $x=0,5$) между титанами координированными интеркалантами.

Список публикаций:

[1] A. S. Shkvarin et al. // *Inorganic Chemistry*. 2020. V. 60. № 1. P. 185-194.

[2] A.S. Shkvarin et al. // *RSC Advances*. 2016. V 6. P. 106527-106539.

[3] E. A. Suslov, et al. // *The Journal of Physical Chemistry A*. 2021. V 125. № 9. P. 1981-1986.

Уточнение стехиометрии титаната- ниобата стронция методом Ритвельда

Макаренко Андрей Александрович

НИИ физики Южного федерального университета

Куприна Ю.А., к.ф.-м.н.

eamakaren@sfedu.ru

В настоящее время исследованиями оксидов со структурой типа перовскита (ОСП) установлено, что они характеризуются большим разнообразием физических свойств, встречающихся в различных сочетаниях. Многие из них обладают особенными электрическими и магнитными свойствами. Большинство соединений, которые имеют структуру типа перовскита, являются многофункциональными материалами. Перовскиты проявляют определенные интересные химические и физические свойства: они могут обладать электронными структурами как изоляционного, так и металлического характера и даже полуметаллического со спин-поляризованной электропроводностью, могут проявлять сверхпроводимость, магнитные порядки от антиферромагнитного до ферри-ферромагнитного, также могут содержать в себе ферроатомные смещения атомов или ионную проводимость и каталитические свойства. Перовскиты зачастую обладают многими из этих свойств одновременно, проявляя мультиферроичность. Широкий спектр свойств обусловлен композиционной гибкостью перовскитовой структуры ABO_3 [1-3].

Рентгеноструктурный анализ — это метод исследования строения тел, использующий явление дифракции рентгеновских лучей, метод исследования структуры вещества по распределению в пространстве и интенсивностям рассеянного на анализируемом объекте рентгеновского излучения. Рентгеноструктурный анализ является основным методом определения структуры кристаллов. При исследовании кристаллов он даёт наибольшую информацию. Основным подходом к решению задачи уточнения кристаллической структуры при съемке рентгенограмм с поликристаллических образцов является метод предложенный в 1969 г. голландским исследователем Х.М. Ритвельдом. Метод основан на гипотезе об определенной структурной модели изучаемого соединения, которая позволяет рассчитать его теоретическую порошковую дифракционную картину. Все последующие этапы уточнения структуры необходимы для того, чтобы добиться лучшего соответствия между теоретической (расчетной) и экспериментальной дифракционными картинами.

В ходе работы была создана модель перовскита $SrTi_{1/2}Nb_{1/2}O_3$ в кубической фазе с различными соотношениями катионов Ti и Nb. Полученные данные относительных интенсивностей рефлексов путем обработки модельных рентгенограмм методом Ритвелда сравнивались с рентгенограммой образцов кристалла $SrTi_{1/2}Nb_{1/2}O_3$. После проведения полнопрофильного анализа методом Ритвельда удалось уточнить параметр элементарной ячейки $a = 3.9014 \text{ \AA}$ и уточнить стехиометрию со следующим процентным содержанием двух фаз.

Результат уточнения стехиометрии двойного перовскита показывает, что в B подрешетке содержится 0.85%Ti и 0.15%Nb. При этом процентное содержание масс кристаллических фаз резко изменилось: 80% $SrTiO_3$ и 20% $SrTi_{0,85}Nb_{0,15}O_3$. Удалось доказать, что при синтезе происходит независимое структурообразование как простого перовскита $SrTiO_3$, так и двойного $SrTi_{0,85}Nb_{0,15}O_3$.

Список публикаций:

[1] Е.Г. Фесенко. Семейство перовскита и сегнетоэлектричество. М. Атомиздат, 1972 г., 248с.

[2] Pickett WE, Singh DJ. *Phys Rev B* 1996;53:1146.

[3] Kobayashi K-I, Kimura T, Sawada H, Terakura K, Tokura Y. *Nature* 1998;395:677

Метод сканирующей рентгеновской фотоэлектронной микроскопии (SPEM) и его реализация в синхротронных центрах

Меренцов Александр Ильич

Институт физики металлов им. М.Н. Михеева Уральского отделения РАН

Alexander.Merentsov@urfu.ru

Синхротронное излучение (СИ) является мощным инструментом в руках учёных, позволяющим изучать кристаллическую, молекулярную, электронную структуру различного рода материалов. В современных синхротронных центрах реализуется большое число экспериментальных методик (спектроскопия поглощения, фотоэлектронная спектроскопия, томография, дифракция рентгеновского излучения и фотоэлектронов и многие другие), позволяющие исследовать свойства веществ в разных агрегатных состояниях. Один из методов, реализуемых на источниках СИ, является сканирующая рентгеновская фотоэлектронная микроскопия (PEEM, X-PEEM, SPEM), позволяющая получать информацию не только о топологии поверхности кристаллического образца, но и о его локальной электронной структуре. Рентгеновское излучение, попадая на образец, вызывает испускание вторичных электронов (фотоэлектронов). Эти вторичные электроны ускоряются до 10 – 30 кЭв, фокусируются и позволяют получить увеличенное изображение исследуемой поверхности. Первое сообщение о применении метода PEEM относится к 1933 году, когда Эрнст Брюхе представил изображение катода, освещённого ультрафиолетом [1]. За долгие годы методика претерпела значительные изменения, и в настоящее время существуют лабораторные фотоэлектронные микроскопы третьего поколения, использующие в качестве источника излучения УФ-лампы (до 40 эВ) или рентгеновские трубки (до 1486 эВ). Однако, наибольшее распространение методика получила в синхротронных центрах, поскольку позволяет использовать в качестве первичного излучения рентген в широком диапазоне энергий с возможностью её варьирования.

В докладе будет подробно рассказано о линиях ESCA Microscopy [2,3] (синхротрон ELETTRA, Италия) и HERMES (синхротрон SOLEIL, Франция) [4]. На примерах слоистых замещённых систем $\text{Cr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{Se}_2$, $\text{Cr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{S}_2$, $\text{V}_x\text{Ti}_{1-x}\text{Se}_2$ и $\text{V}_x\text{Nb}_{1-x}\text{Se}_2$ будет показано, как метод SPEM позволяет увидеть в на первый взгляд однородных кристаллах области с различным химическим составом и химической связью. Несмотря на отсутствие методики SPEM на действующих в настоящее время в России синхротронах ВЭПП-3 (ИЯФ, г. Новосибирск) и КИСИ-Курчатов (НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва), вкратце будет рассказано об этих синхротронных центрах и строящемся в настоящее время синхротроне СКИФ (г. Кольцово, Новосибирская область).

Список публикаций:

[1] Brüche E. // *Zeitschrift für Physik*. 1933. V. 86. P. 448–450.

[2] Abyaneh M. K., Gregoratti L., Amati M., Dalmiglio M. and Kiskinova M. // *e-J. Surf. Sci. Nanotech*. 2011. V. 9. P. 158-162.

[3] Zeller P., Amati M., Sezen H., Scardamaglia M., Struzzi C., Bittencourt C., Lantz G., Hajlaoui M., Papalazarou E., Marino M., Fanetti M., Ambrosini S., Rubini S., Gregoratti L. // *Phys. Status Solidi*. 2018. V. 215. P. 1800308.

[4] Belkhou R., Stanescu S., Swaraj S., Besson A., Ledoux M., Hajlaoui M. and Dalle D. // *Journal of Synchrotron Radiation*. 2015. V. 22(4). P.

Зависимость фазового состава тонких плёнок $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ от температуры термообработки

Меренцова Кристина Александровна

Изюров Владимир Владимирович, Артемьев Михаил Сергеевич, Десятников Иван Александрович,

Дубинин Станислав Сергеевич

Институт физики металлов имени М. Н. Михеева Уральского отделения РАН

Носов Александр Павлович

merencovak@imp.uran.ru

Гематит (оксид железа $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) обладает уникальными магнитными свойствами: он является антиферромагнетиком ниже температуры Мориана 260 К и «слабым» ферромагнетиком в диапазоне температур от 260 К до температуры Нееля 950 К, выше которой он парамагнитен. Гематит – центрально-симметричный антиферромагнетик с четной главной осью симметрии, в котором «слабый» ферромагнетизм обусловлен симметрией магнитных подрешеток [1] и анизотропным сверхобменным взаимодействием [2]. Гематит рассматривается как перспективный материал для антиферромагнитной спинтроники [3]. Основные исследования физических свойств гематита были выполнены на объемных материалах (моно- и поликристаллах). Однако, в последние годы интерес к нему усилился в связи с потенциальными приложениями в наноспинтроники как материала для тонких пленок и слоев в наногетероструктурах. Целью работы было получение тонких плёнок гематита на монокристаллических подложках сапфира ($\text{c-Al}_2\text{O}_3$) и исследование их фазового состава в зависимости от температуры послеростовой термообработки на воздухе.

Пленки α - Fe_2O_3 толщиной 100 нм были получены методом магнетронного распыления стехиометрической мишени на переменном токе в атмосфере 90% Ar + 10% O_2 . В процессе распыления температура подложки составляла 473 К. После получения пленки термообработывали на воздухе при температурах 673 К и 1023 К в течении 3 часов. Рентгеноструктурные исследования проводили на дифрактометре PANalytical Empyrean. Измеряли спектры в режиме $\theta - 2\theta$.

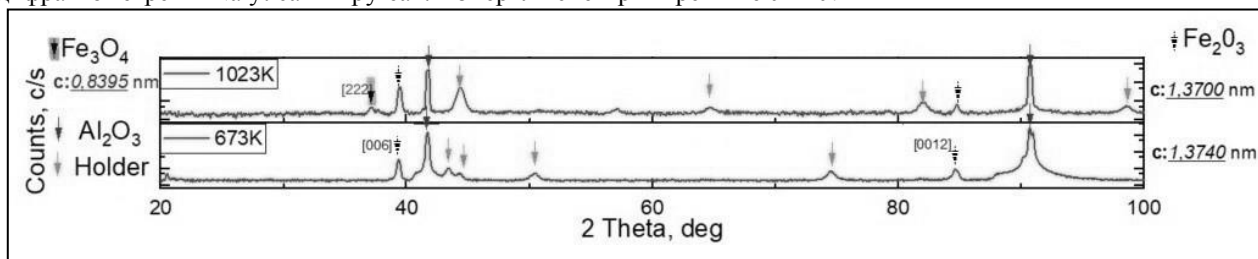


рис. 1. Дифрактограммы образцов, термообработанных при температурах 673 К и 1023 К. Черные стрелки – рефлексы от подложки с- Al_2O_3 . Серые стрелки – рефлексы от держателя подложек дифрактометра (holder). Пунктирные стрелки – рефлексы от фазы α - Fe_2O_3 . Черные стрелки с серым фоном – рефлексы от фазы магнетита Fe_3O_4

На рисунке 1 видно, что при термообработке при 973 К образец является однофазным. Единственной фазой является гематит. При 1023 К начинается формирование дополнительной фазы магнетита Fe_3O_4 .

Параметр решетки c фазы α - Fe_2O_3 для образца, термообработанного при 673 К, соответствует параметру решетки c для объёмного монокристалла [4]. При 1023 К величина этого параметра уменьшается, что может свидетельствовать о сжатии решетки.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Функция», номер госрегистрации 122021000035-6).

Список публикаций:

- [1] I. Dzyaloshinsky // JETP. 1957. 32. P. 1547.
- [2] T. Moriya // Phys. Rev. 1960. 120. P. 91.
- [3] V. Baltz, A. Machnon, M. Tsoi et. al. // Rev. Mod. Phys. 2018. 90. P. 012002.
- [4] https://materials.springer.com/isp/crystallographic/docs/sd_0545731

Исследование особенностей атомной и электронной структуры нанокomпозитов ПАНИ/Me: методы рентгеновской и оптической спектроскопии поглощения

Недоедкова Ольга Вадимовна

Лысенко Виктория Юрьевна, Шматко Валентина Анатольевна

Южный федеральный университет

nedoedkova@sfedu.ru

В настоящее время одним из самых распространенных и изучаемых проводящих полимеров является полианилин (ПАНИ), который получил наибольшее внимание из-за его уникальной структуры, высокой химической стабильности и высокой электрической проводимости при соответствующем модифицировании. Варьирование проводящих свойств полианилина, в основе которых лежит его атомная и электронная структуры, возможно путем модификации полимера различными соединениями, в частности солями металлов.

В работе исследованы атомная и электронная структура полианилина и композитов на его основе спектральными методами: УФ и видимой спектроскопии и рентгеновской спектроскопии поглощения. Образцы исследования получены бескислотным методом с дальнейшим термостатированием [1]. В ходе проведения работы было выявлено, что применение $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $\text{ZrCl}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ в реакции полимеризации анилина приводит к изменениям электронной структуры полимера в составе нанокomпозита, а изменение температуры термостатирования не влечет существенных изменений в структуре полимера в композитах. На основе проведенной интерпретации спектров рентгеновского поглощения полианилина установлено, что цирконий взаимодействует с полимером через азот из иминной группы.

На основе полученных методом УФ-видимой спектроскопии данных была определена ширина оптической запрещенной зоны (E_g) для чистого полианилина и композитов по графикам Тауца. Выявлено, что добавление модифицирующих добавок $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $\text{ZrCl}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ в структуру ПАНИ в процессе синтеза

приводит к уменьшению запрещённой зоны и подобные материалы имеют перспективу применения в суперконденсаторах и оптических устройствах.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-00459 и частично в рамках реализации ГЗ ЮНЦ РАН на 2022 г. № гр. проекта 121100500084-2.

Авторы выражают благодарность Мясоедовой Т.Н. за предоставление образцов для исследования, научным руководителям: профессору кафедры ФНС ЮФУ Яловега Г.Э., доценту кафедры ФНС ЮФУ Шматко В.А.

Список публикаций:

[1] Шматко В.А., Мясоедова Т.Н., Яловега Г.Э. Электронная структура полианилина, модифицированного солями меди и циркония // Оптика и спектроскопия. 2020. Вып. 5. Стр.617

Влияние механоактивации на сегнетоэлектрические материалы со структурой перовскита по данным рентгеновской спектроскопии XANES

Нечитайлова Ирина Олеговна

Глазунова Екатерина Викторовна, Поносова Екатерина Евгеньевна, Шеметова Элина Ивановна,

Нефёдов Михаил Александрович, Ермакова Александра Михайловна,

Сухарина Галина Борисовна, Срабионян Василий Валерьевич, Авакян Леон Александрович, Бугаев Лусеген Арменакович

Южный федеральный университет

Сухарина Галина Борисовна

inec@sfedu.ru

Сегнетоэлектрические материалы со структурой перовскита находят широкое применение в электронной технике, радиотехнике, приборостроении, измерительной и вычислительной технике и многих других областях, поскольку обладают уникальными физико-химическими свойствами, которые во многом зависят от малых структурных искажений, обусловленных различного рода воздействиями, в частности, механоактивацией. В связи с этим, перспективной задачей является изучение влияния механоактивации на структуру и свойства перовскитных сегнетоэлектрических материалов.

Целью настоящей работы стало установление корреляций состав - структура - свойства сегнетоэлектриков со структурой перовскита на основе модельного соединения $\text{PbFe}_{0.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_3$ (PFT).

Проведено исследование малых структурных искажений, образованных в результате механоактивации PFT, при помощи метода XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure) и компьютерного моделирования. Выполнен анализ спектров рентгеновского поглощения за K -краем атома железа и L_3 -краем атома тантала в образцах PFT до и после механоактивации. Для установления наиболее вероятного локального окружения поглощающего атома тантала были рассчитаны XANES-спектры, соответствующие различным структурным моделям (рис. 1).

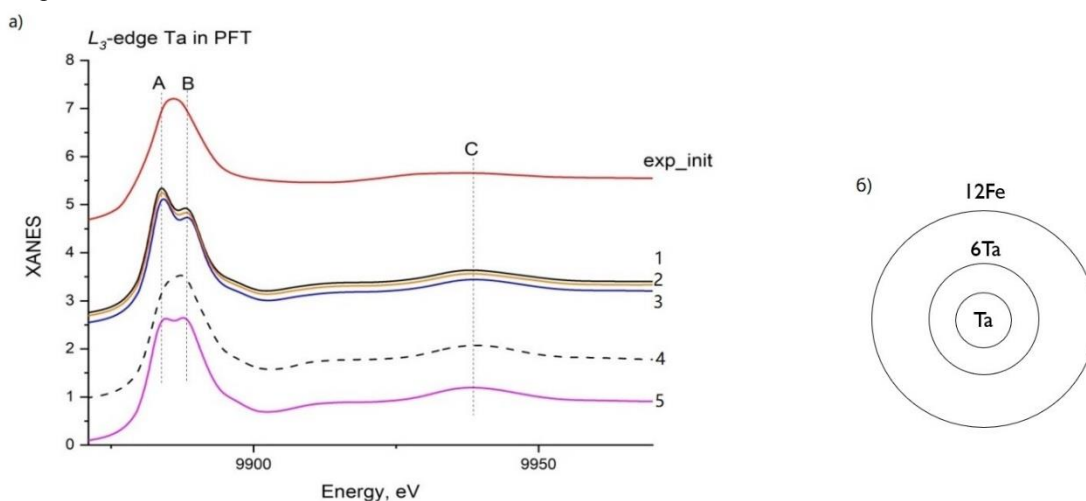


рис.1 (а) - Сравнение XANES-спектров за L_3 -краем атома тантала в PFT, соответствующих различным моделям локальной атомной структуры исследуемого образца; (б) - Схематичное изображение координационных сфер (3 и 5) для наиболее вероятной структурной модели - (4).

В процессе проведенного анализа было выявлено, что изменение формы экспериментальных Та L_3 -XANES-спектров в области основного максимума является результатом изменения локального окружения поглощающего атома, а именно соответствует различному упорядочению атомов железа и тантала. В результате выполненного исследования установлена наиболее вероятная локальная атомная структура синтезированного образца PFT (рис. 1, модель 4).

Список публикаций:

[1] Фесенко Е. Г. // Семейство перовскитов и сегнетоэлектричество. 1972. С. 248

[2] Geguzina G. A. // *Ferroelectrics-magnetics with the perovskite structure. Ferroelectrics*, 2020. № 568. С. 85.

[3] Нестеров А. А., Панич А. А. // *Технологии синтеза порошков сегнетоэлектрических фаз. Ростов н/Д: Издательство ЮФУ*. 2010.

[4] Sukharina G. B. et al // *Structure and Properties of Ferroelectric Materials after Mechanoactivation. Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 2018. № 82 (7) С. 909 – 912.

Особенности фазовых превращений в сплавах титана с ванадием и молибденом: расчеты из первых принципов

Огнев Сергей Олегович

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН

Святкин Леонид Александрович

soo1@tpu.ru

На сегодняшний день достаточно перспективным применением электронно-лучевого аддитивного производства (ЭЛАП) является 3D-печать деталей и узлов из сплавов на основе титана, которые могут быть использованы в аэрокосмической отрасли при производстве компонентов двигателей, таких как роторы, лопатки компрессора и компоненты гидравлической системы. Огромное количество современных исследований посвящено изучению шероховатости поверхности, микроструктуры и механических свойств 3D-напечатанных титановых сплавов, содержащих ванадий, молибден, алюминий и другие легирующие элементы. Установлено, что стабильность микроструктуры и объемная доля вторых фаз определяются распределением легирующих элементов в процессе высокоскоростного охлаждения ванны расплава и многократных циклов нагрева-охлаждения при нанесении последующих слоев в 3D-печати. Целью данной работы является первопринципное исследование фазовых переходов в системах Ti-V, Ti-Mo и Ti-V-Mo.

Для установления влияния элементного состава на структурно-фазовую стабильность титанового сплава была рассчитана полная энергия E_p различных фаз сплавов $Ti_{1-x}V_x$, $Ti_{0.95-x}V_{0.05}Mo_x$ и $Ti_{1-x}Mo_x$. Все расчеты выполнялись в рамках теории функционала плотности с использованием оптимизированного сохраняющего норму псевдопотенциала Вандербиля и приближения виртуального кристалла, реализованного в пакете программ ABINIT. Для описания обменных и корреляционных эффектов использовалось приближение обобщенного градиента в форме Пердью-Бурке-Эрнцера. Энергия обрезания при разложении волновой функции по базису плоских волн, составила 1630 эВ.

Для проведения структурной оптимизации и релаксации сплавов $Ti_{1-x}V_x$, $Ti_{0.95-x}V_{0.05}Mo_x$ и $Ti_{1-x}Mo_x$ использовалась расчетная ячейка с 4 атомами металла (рис. 1). Поскольку согласно экспериментальным исследованиям α' и α'' фазы твердого раствора молибдена или ванадия в титане близки по геометрии связей и соотношениям параметров решетки к чистому α -Ti, то при структурной оптимизации α' и α'' фаз соотношение между параметрами решетки фиксировалось близким к соотношению между параметрами решетки чистого α -Ti. Также была проведена оптимизация структуры α'' фаз без сохранения соотношения между параметрами решетки как в чистом α -Ti, такая структура обозначена в работе для удобства обсуждения как $\alpha_{\text{иск}}''$ фаза. Релаксация считалась завершенной при значении сил, действующих на атомы, менее 25 мэВ/Å. На каждой итерации самосогласования электронной плотности в α , α'' и β фазах рассматриваемых соединений собственные значения гамильтониана рассчитывались соответственно на сетках k точек $16 \times 9 \times 10$, $16 \times 9 \times 10$ и $15 \times 9 \times 10$, генерируемой по схеме Монхорста-Пака. Рассчитанные в работе параметры решетки чистого α - и β -Ti составляют $a_\alpha=2,933$ Å, $c_\alpha=4,669$ Å, $a_\beta=3,258$ Å.

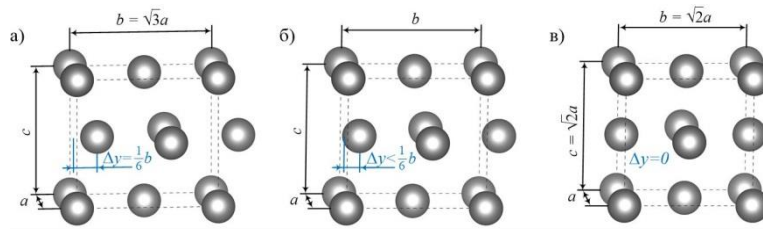


рис.1. Расчетные ячейки α' (а), α'' (б) и β (в) фаз сплавов $Ti_{1-x}V_x$, $Ti_{0.95-x}V_{0.05}Mo_x$ и $Ti_{1-x}Mo_x$. a , b и c – параметры решетки, Δy – смещение атомных слоев относительно друг друга

В работе вычислены разности полной энергии ($E_p - E_a$) в расчете на один атом сплава в зависимости от содержания легирующих элементов (рис. 2). Установлено, что в $Ti_{1-x}V_x$ до концентрации ванадия ~ 14 ат.% α'' фаза является энергетически неустойчивой: при релаксации она переходит в α' фазу. При концентрациях ванадия от 14 до 36 ат.% α'' фаза становится энергетически наиболее выгодной, а при более высоких концентрациях – выгодна β фаза $Ti_{1-x}V_x$. За счет тепловой энергии фазовые переходы будут происходить при более низких концентрациях ванадия: так при комнатной температуре за счет тепловой энергии $\sim kT$ фазовое превращение ($\alpha' \rightarrow \beta$) возможно при концентрациях ванадия ~ 22 ат.%, а фазовое превращение ($\alpha'' \rightarrow \beta$) – при ~ 24 ат.%. С учетом температурного фактора за счет близких по значениям полной энергии решеток α' и α'' до концентрации ванадия 40 ат.% фазовый переход ($\alpha' \rightarrow \alpha''$) возможен, наоборот, при более высоких концентрациях. Однако обратный переход ($\beta \rightarrow \alpha'$) при комнатной температуре будет наблюдаться при более низких концентрациях, чем ($\beta \rightarrow \alpha''$) переход. Таким образом, за счет тепловой энергии в зависимости от концентрации ванадия возможны фазовые переходы ($\alpha' \rightarrow \beta$) и ($\beta \rightarrow \alpha'' \rightarrow \alpha'$).

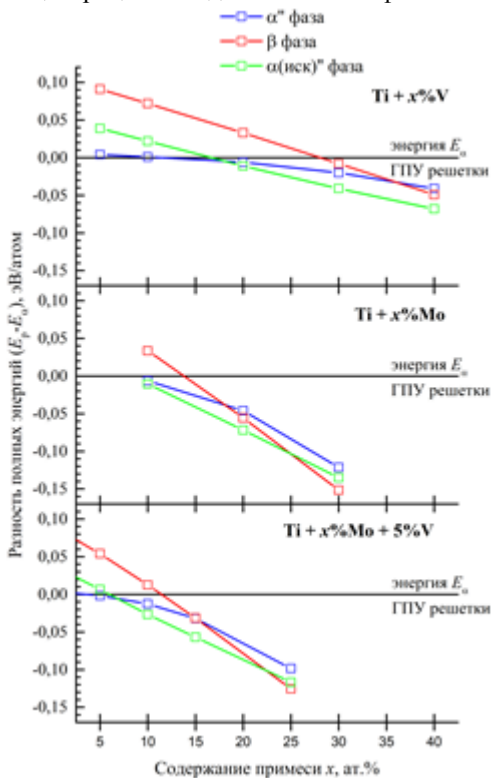


рис.2. Разность полной энергии ($E_p - E_a$) в расчете на один атом сплава в зависимости от содержания легирующих элементов.

В случае легирования титана молибденом картина фазовых превращений качественно схожа с легированием ванадием, но все фазовые переходы происходят при более низком содержании Мо в $Ti_{1-x}Mo_x$. Показано, что в $Ti_{1-x}Mo_x$ α'' фаза является энергетически неустойчивой до концентрации молибдена ~ 9 ат.%, которая превращается в β фазу при концентрациях молибдена ~ 18 ат.%. За счет тепловой энергии фазовые переходы ($\alpha' \rightarrow \beta$) и ($\alpha'' \rightarrow \beta$) возможны при концентрациях молибдена ~ 11 и 13 ат.% соответственно. При легировании титана одновременно ванадием и молибденом рассматриваемые фазовые переходы наблюдаются при общей концентрации атомов Мо и V в решетке $Ti_{0.95-x}V_{0.05}Mo_x$ близкой к содержанию Мо в $Ti_{1-x}Mo_x$ для таких переходов. Таким образом, добавление 5 ат.% ванадия в $Ti_{1-x}Mo_x$ понижает на 2-3 ат.% концентрации Мо необходимые для рассматриваемых фазовых переходов.

Выявлено, что, если учесть сильные искажения в геометрии связей в решетке α -Ti при добавлении примесей V и Mo, то возможно формирование искаженной фазы $\alpha_{иск}''$, характерной чертой которой является заметно меньшее смещение Δy атомных слоев относительно друг друга (рис. 1) по сравнению с α'' фазой. Полная энергия решетки этой фазы заметно ниже в широком диапазоне концентраций легирующих элементов (рис. 2). С учетом тепловой энергии фазовый переход ($\alpha' \rightarrow \alpha_{иск}''$) будет наблюдаться при заметно более низких концентрациях ванадия и молибдена, чем фазовый переход ($\alpha' \rightarrow \alpha''$), а фазовый переход ($\alpha_{иск}'' \rightarrow \beta$) будет происходить при заметно больших концентрациях легирующих элементов, чем переход ($\alpha'' \rightarrow \beta$).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант №21-19-00795).

Особенности структуры, электро- и магнитосопротивления монокристалла MnBi_2Te_4

Первалова Александра Николаевна¹

Фоминых Богдан Михайлович^{1,2}, Наумов Сергей Владимирович¹, Марченкова Елена Борисовна¹,
Марченков Вячеслав Викторович^{1,2}

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН

²Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

Марченков Вячеслав Викторович, д.ф.-м.н.

domozhirova@imp.uran.ru

В настоящее время получение и исследование магнитных топологических материалов является актуальным направлением физики конденсированного состояния, поскольку известно, что наличие нетривиальной топологии электронной зонной структуры и магнетизма может привести к реализации необычных квантовых состояний, таких как квантовый аномальный эффект Холла, аксионный изолятор и полуметалл Вейля [1]. Таким материалом является обнаруженный в последние годы антиферромагнитный топологический изолятор MnBi_2Te_4 [2]. Кристаллическая структура данного соединения состоит из семикратных слоев $\text{Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te}$, между которыми действуют слабые силы Ван-дер-Ваальса, поэтому данный материал легко раскалывается вдоль плоскости $(00l)$ и должен обладать большой анизотропией физических свойств, в частности, электросопротивления и магнитосопротивления, которые и были исследованы в данной работе.

Монокристалл MnBi_2Te_4 был выращен согласно методике, схожей с методом кристаллизации из раствора в расплаве. Аттестация его структуры проводилась методами рентгеновского дифракционного анализа, сканирующей электронной микроскопии и рентгеновского энергодисперсионного микроанализа. Электро- и магнитосопротивление измерены по четырехконтактной методике в диапазоне температур от 2 до 300 К и в магнитных полях до 9 Тл.

На рис. 1 представлена температурная зависимость электросопротивления $\rho(T)$ монокристалла MnBi_2Te_4 , измеренная в плоскости $(00l)$, а также перпендикулярно данной плоскости. Обнаружена анизотропия сопротивления: электросопротивление, измеренное перпендикулярно плоскости $(00l)$ исследуемого монокристалла, на порядок величины превышает сопротивление, измеренное в данной плоскости. Для сравнения на рисунке также приведена температурная зависимость электросопротивления поликристаллического образца MnBi_2Te_4 . Видно, что при температуре ~ 24 К на зависимостях $\rho(T)$ имеется пик, соответствующий температуре Нееля данного соединения. Подобный пик наблюдается также в магнитном поле 1 Тл, однако отсутствует в полях 5 Тл и 9 Тл, что согласуется с результатами работы [3] и может быть связано с магнитным фазовым переходом в ферромагнитное состояние под действием внешнего магнитного поля выше 5 Тл. Таким образом, в результате проведенных исследований была обнаружена анизотропия в сопротивлении монокристалла MnBi_2Te_4 , которая, по-видимому, должна также наблюдаться и в других электронных характеристиках данного соединения, в частности, в его оптических свойствах. Такие исследования проводятся в настоящее время.

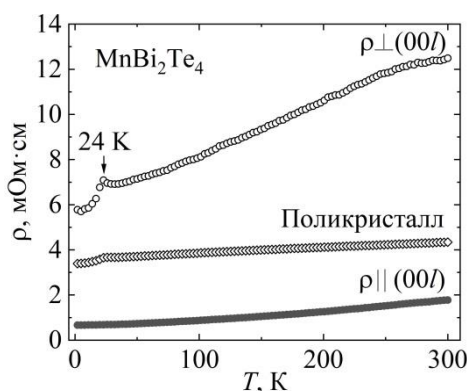


рис. 1. Температурная зависимость электросопротивления MnBi_2Te_4 .

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Спин», № 122021000036-3) при частичной поддержке стипендии Президента РФ молодым ученым и аспирантам (СП-2705.2022.1).

Список публикаций:

[1] Bernevig B.A., Felser C., Beidenkopf H. // *Nature*. 2022. V. 603. P. 41–51.

[2] Otkov M.M., Klimovskikh I.I., Bentmann H. et al. // *Nature*. 2019. V. 576. P. 416–422.

[3] Lee S.H., Zhu Y., Wang Y. et al. // *Phys. Rev. Res.* 2019. V.1. P. 012011(R).

Структура активных центров медьсодержащих цеолитов: спектроскопия рентгеновского поглощения и компьютерное моделирование

Поносова Екатерина Евгеньевна

Ермакова Александра Михайловна, Сухарина Галина Борисовна, Гладченко-Джевелекис Янис Николаевич, Шеметова Элина Ивановна, Прядченко Василий Владимирович, Богданов Вячеслав Артемович, Дурыманов Вениамин Александрович, Авакян Леон Александрович, Бугаев Лусеген Арменакович

Южный федеральный университет

Сухарина Галина Борисовна, к.ф.-м.н.

ponosova02@bk.ru

Широкий интерес к изучению структуры медьсодержащих цеолитов обусловлен важностью задачи поиска эффективных катализаторов реакции получения метанола из метана. В исследовании структуры данных материалов критически важным является определение строения активных металл-кислородных центров. Данные центры, обычно, неравномерно распределены в каркасе цеолита и имеют сложное атомное строение в области ближнего окружения атомов меди. В зависимости от способа синтеза могут получаться катализаторы с различной локальной атомной структурой активных центров меди, что влияет на конечные свойства катализатора[1-3]. Поэтому установление взаимосвязи условий синтеза, структуры и свойств является важным этапом при разработке высокоэффективных катализаторов для задач преобразования метана в метанол.

В данной работе рассматривались активные центры меди в Cu-MOR, полученные с использованием двух типов синтеза: твердофазного и жидкофазного, алгоритм синтеза описан в работе[3]. Исследование локальной атомной структуры активных центров меди в цеолитах типа морденит (MOR) было выполнено на разных этапах каталитического цикла. Для получения структурной информации применялся комплексный подход, включающий спектроскопию рентгеновского поглощения и компьютерное моделирование с использованием теории функционала плотности (DFT) и элементов машинного обучения. Установление наиболее вероятных гипотетических моделей в Cu-MOR было выполнено на основе квантово-химических расчетов в программном комплексе Quantum Espresso[4]. Теоретическое моделирование Cu K-XANES спектров было реализовано с использованием метода конечных разностей в программном комплексе FDMNES[5].

По результатам проведенного анализа экспериментальных и теоретических Cu K-XANES спектров, определены наиболее вероятные модели локальной атомной структуры образовавшихся активных центров меди в цеолите Cu-MOR. Установлено наличие нескольких типов медных центров, содержащих цепочки Cu-Cl-C и Cu-O-Cu, в каркасе Cu-MOR, полученном в процессе твердофазного синтеза. Выполнена генерация различных структурных моделей активных центров цеолитов Cu-MOR и сформирована база данных для структур активных центров меди и соответствующих спектров Cu K-XANES для применения методов машинного обучения к задаче прогнозирования структурных параметров, определяющих локальную атомную структуру активных центров меди в Cu-MOR.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 23-22-00438.

Список публикаций:

- [1] E.M.C. Alayon, M. Nachtegaal, A. Bodi, M. Ranocchiari, J.A. van Bokhoven // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2015. V. 17. PP.7681–7693.
- [2] V. V. Srabionyan, G.B. Sukharina, T.I. Kurzina, V.A. Durymanov, A.M. Ermakova, L.A. Avakyan, E.M.C. Alayon, M. Nachtegaal, J.A. van Bokhoven, L.A. Bugaev // *J. Phys. Chem. C*. 2021. V. 125. PP.25867–25878.
- [3] S.E. Bozbag, E.M.C. Alayon, J. Pecháček, M. Nachtegaal, M. Ranocchiari, J.A. van Bokhoven // *Catal. Sci. Technol.* 2016. V. 6. PP.5011–5022.
- [4] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini et al. // *J. Phys. Condens. Matter*. 2009. V. 21. PP.395502.
- [5] Y. Joly // *Phys. Rev. B*. 2001. V. 63. PP.125120.

Электронная структура поверхностного сплава Ag_2Bi на поверхностях (111) и (423) серебра

Терентьева Дарья Витальевна

Национальный исследовательский Томский Политехнический университет

Святкин Леонид Александрович

dvt17@tpu.ru

Введение. В настоящее время электроника основана на использовании процесса переноса заряда электрона. Однако, возможности традиционной полупроводниковой электроники в части миниатюризации и быстродействия подходят к концу, что приведет к нарушению закона Мура в ближайшее время. Для

увеличения быстродействия вычислительных устройств предлагается использовать не только заряд, но и спин в качестве переносчика информации. В связи с этим возникает необходимость разработки новых материалов, электронные состояния которых могут быть разделены по спину. Примером таких материалов могут быть поверхностные сплавы с осажденными атомами тяжелых элементов, например, висмута или свинца на поверхностный слой серебра. Особый интерес для изучения представляют вицинальные поверхности, на которых за счет ступенчатой формы поверхности возникает дополнительный потенциал, позволяющий получать уникальные электронные состояния. Целью данной работы является выявление особенностей влияния вицинальности поверхности на энергетические спектры поверхностного сплава BiAg_2 на поверхностях $\text{Ag}(111)$ и $\text{Ag}(423)$.

Все расчеты в данной работе были выполнены в рамках теории функционала электронной плотности методом проекционно-присоединенных волн, реализованным в пакете программ VASP. Обменно-корреляционный потенциал рассматривался с использованием обобщенно-градиентного приближения в форме, предложенной Пердью-Бурке-Эрнцверхофом. Для рассмотрения поверхностного сплава BiAg_2 , были рассмотрены ячейки гладкой поверхности (111) со структурой $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$, гладкой поверхности со структурой $(2\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$, вицинальной поверхности (423). Гладкие поверхности моделировались пленкой из 21 слоя. Толщина этих пленок составила $\sim 65 \text{ \AA}$, толщина вакуумного слоя – $\sim 12 \text{ \AA}$. Вицинальная поверхность (423) была представлена ассиметричной 28-ми слойной пленкой толщиной $\sim 70 \text{ \AA}$. В поверхностном слое этой пленки находилось 5 атомов серебра и 2 атома адсорбата Bi. Атомы адсорбата располагались таким образом, что один из них лежал на террасе, а другой формировал ступень. Также в рассмотрение были взяты монослой, бислой (поверхностный слой с атомами адсорбата и однослойной подложкой из серебра), тетраслой (поверхностный слой с атомами адсорбата и трехслойной подложкой из серебра) с поверхностями (111)- $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$ и (423).

В работе были рассчитаны электронные энергетические спектры поверхностных сплавов гладкой поверхности со структурой $(2\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$ и вицинальной поверхности (423). Поскольку поверхностный сплав BiAg_2 обладает большим спин-орбитальным расщеплением, то в структурах $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$ и $(2\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$ присутствуют 6 поверхностных зон, находящихся в запрещенной зоне. Первое поверхностное состояние находится полностью в занятой области и пересекает точку $\bar{\Gamma}$ при энергии $-0,3 \text{ эВ}$. Второе является частично занятым: оно вырождается в точке $\bar{\Gamma}$ при энергии $0,6 \text{ эВ}$ и пересекает уровень Ферми при $k = \pm 0,2 \text{ \AA}^{-1}$. Третье является полностью незанятым. В окрестности точки $\bar{\Gamma}$ при энергии $1,5 \text{ эВ}$ она двухкратно вырождена. При $k = 0,2 \text{ \AA}^{-1}$ состояние p_y орбитали расщепляется на две ветви восходящих парабол, а при $k = -0,2 \text{ \AA}^{-1}$ поверхностное состояние обрывается.

Вицинальность достаточно сильно влияет на энергетический спектр (спектры представлены на рисунке 1). Во-первых, наблюдается смещение электронных состояний в точке $\bar{\Gamma}$ по энергии. Во-вторых, вдоль направления $\bar{\Gamma X}$ наблюдается две ветви зоны p_y орбитали (p_x орбитали, ориентированные параллельно ступени), слабо зависящие от волнового числа. В-третьих, электронные состояния становятся более диффузными. Для поверхности (111) наблюдается эффект закручивания спина. То есть наблюдается четкое разграничение в ориентациях спинов: спин ориентирован по оси x вдоль направления $\bar{\Gamma K}$ ($\bar{\Gamma Y}$), и по оси y вдоль направления $\bar{\Gamma M}$ ($\bar{\Gamma X}$). Характер же спиновой текстуры вицинальной поверхности (423) очень сложен в анализе. Это связано с тем, что электроны, чьи спины ориентированы по направлению вдоль ступени присутствуют как вдоль этого направления ($\bar{\Gamma Y}$), так и перпендикулярного ему ($\bar{\Gamma X}$). То же самое наблюдается и с электронами, чьи спины ориентированы по направлению перпендикулярного ступени.

Для более подробного изучения влияния вицинальности, были построены и исследованы энергетические спектры монослоев, бислоев и тетраслоев поверхностей. При переходе от монослойной системы к бислойной наблюдается лишь смещение зон по энергиям за счет дополнительного потенциала, создаваемого большим количеством атомов серебра. Тем самым, исследование эволюции спектров показало, что трех слоев подложки в виде серебра достаточно для формирования общей картины спектра 28-ми слойной пленки.

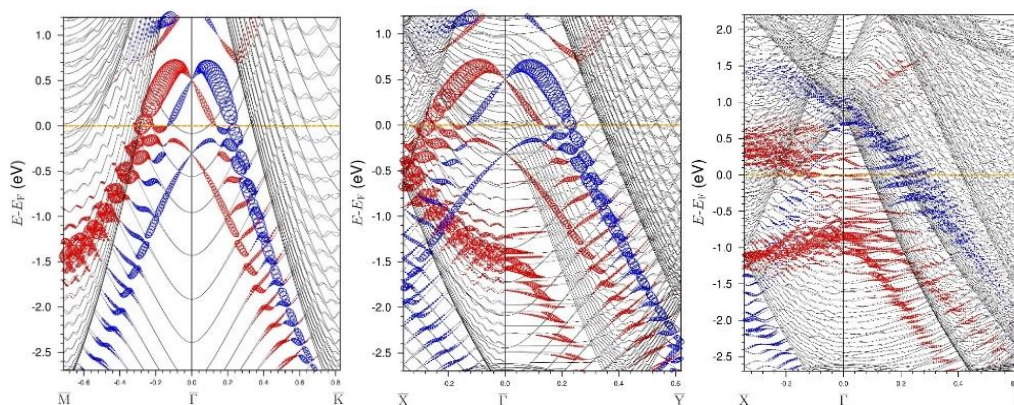


рис. 1. Электронный энергетический спектр поверхностных сплавов BiAg_2 гладкой поверхности со структурой $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ (а), $(2\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ (б) и вициальной поверхности (423) (б, г, е). Синим цветом отмечены поверхностные состояния с преимущественным вкладом p_x орбиталей, красным – p_y орбиталей.

Таким образом, были исследованы поверхностные электронные состояния поверхностных сплавов $\text{BiAg}_2/\text{Ag}(111)$ и $\text{BiAg}_2/\text{Ag}(423)$. Установлено, что вдоль направления параллельного ступени наблюдается размытие электронных орбиталей p_x и p_y . Вдоль направления перпендикулярного ступени наблюдается эффект влияния ступенчатого потенциала на поверхности в виде образования двух бездисперсных p_y состояний вдоль направления $\overline{\Gamma X}$. Причем захватывается только состояние p_y ориентации, а для p_x состояний (p орбитали, ориентированные перпендикулярно ступени) дисперсия не изменяется. Наблюдаемая бездисперсность состояний висмута, состоящих преимущественно из p орбиталей, ориентированных параллельно ступени, в направлении перпендикулярном ступени в поверхностном сплаве $\text{BiAg}_2/\text{Ag}(423)$ говорит о захвате этих состояний ступенчатым потенциалом, что может быть в дальнейшем использовано для формирования каналов передачи информации.

Электронное строение кристаллов Mg_2NA ($A = \text{F}, \text{Cl}$) с решеткой антихалькопирита

Тимофеев Вячеслав Сергеевич

Кемеровский государственный университет

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

slava.timofeev.mail@gmail.com

Фторнитриды и хлорнитриды металлов представляют собой относительно малоизученный класс неорганических материалов. И при этом кристаллы Ve_2NF и Ve_2NCl показывают себя как широкозонные полупроводники [1] с достаточной обширной областью применения. Отсутствие данных для кристаллов Mg_2NF и Mg_2NCl в структуре антихалькопирита определяет актуальность проведения данного исследования для определения необходимости синтеза. Кристаллы Mg_2NF и Mg_2NCl были синтезированы в виде порошка в структуре антикасуэллсилверита [2], которая считается промежуточной между структурами каменной соли и антихалькопирита. Следовательно, синтез исследуемых кристаллов в структуре антихалькопирита при определенных условиях возможен.

Целью работы является определение равновесной конфигурации элементарной ячейки и электронной структуры гипотетических кристаллов Mg_2NA ($A = \text{F}, \text{Cl}$) со структурой антихалькопирита, которая отличается от классической структуры халькопирита обратным порядком следования катионов и анионов.

Вычисления выполнялись с использованием пакета программ Quantum ESPRESSO [3] в локальном приближении теории функционала плотности методом плоских волн. В расчетах использовались сохраняющие норму псевдопотенциалы PZ [4]. Энергии обрезки для плоских волн и электронной плотности составляли 100 и 1000 Ry соответственно, \mathbf{k} -сетка размерности $4 \times 4 \times 4$ была сгенерирована методом Монхорста-Пака [5]. Структура и начальные параметры решетки были взяты из работы [1], и результат оптимизации представлен в таблице:

Кристалл	a, Å	c, Å	c/a	u	Ve-N, Å	Ve-A, Å	Ve-Be, Å
Mg_2NF	4.46	9.36	2.1	0.25	1.9	2.02	3.3
Mg_2NCl	5.03	9.67	1.92	0.25	1.92	2.45	4.25

Зонная структура кристаллов Mg_2NA ($A = F, Cl$) представлена на рис.1. Исследуемые кристаллы представляют собой полупроводники с ширинами запрещенных зон: для Mg_2NF $E_g = 1.66$ эВ, для Mg_2NCl $E_g = 2.83$ эВ. Валентные области обоих кристаллов содержат четыре группы зон с одинаковым распределением по состояниям. Нижняя группа из двух зон принадлежит s-состояниям атома A ($A = F, Cl$), далее идет группа зон s-состояний атома N, и следующие две группы формируются p-состояниями атомов A и N соответственно (снизу вверх). Состояния атома Mg представлены преимущественно в зоне проводимости. Ключевой зависимостью, при переходе от кристалла Mg_2NF к Mg_2NCl , помимо увеличения ширины запрещенной зоны, можно считать уменьшение полной ширины валентной области от 25 до 16 эВ, что определяется уменьшением запрещенных промежутков между группами зон.

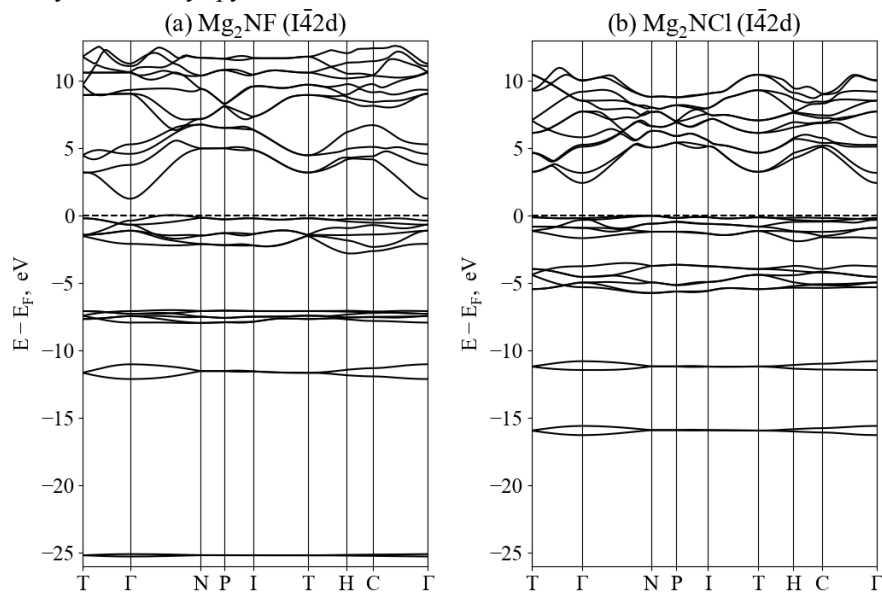


рис.1. Зонная структура кристаллов Mg_2NF (a) и Mg_2NCl (b)

Список публикаций:

- [1] A.B. Gordienko, Yu.M. Basalaeв, V.S. Timofeev // *Electronic structure and lattice dynamics of compounds Be_2NA ($A = F, Cl, Br, I$) with antichalcopyrite structure*, *Solid state Physics*, 2023, V. 65, I. 1, P. 73.
- [2] M. A. Brogan, R. W. Hughes, R.I. Smith, D.H. Gregory // *Structural studies of magnesium nitride fluorides by powder neutron diffraction*, *Journal of Solid State Chemistry*, 2012, V. 185, P. 213.
- [3] P. Giannozzi, et al. // *QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials*. *J. Phys.: Condens. Matter*. 2009, V. 21, P. 395502.
- [4] J. P. Perdew, A. Zunger // *Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems*. *Phys. Rev. B.*, 1981, V. 23, I. 10, P. 5048.
- [5] H.J. Monkhorst, J.D. Pack // *Special points for Brillouin-zone integrations*. *Phys. Rev. B*, 1976, V. 13, P. 5188.

Влияние корреляционных эффектов на электронную структуру и магнитные свойства $CuCo_2S_4$: расчеты в рамках DFT+DMFT

Трифонов Иван Олегович

Скорняков Сергей Львович

Уральский федеральный университет имени первого президента России Б. Н. Ельцина
Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН

Скорняков Сергей Львович, д.ф.-м.н.

probrakeup@gmail.com

Согласно современным представлениям физики конденсированного состояния выделяют два класса сверхпроводников. К первому относятся системы, поведение которых описывает теория Бардина-Купера-Шриффера (БКШ): в них сверхпроводящие куперовские пары образуются за счет электрон-фононного взаимодействия. Во второй класс относят соединения, в которых существенную роль в образовании куперовских пар предположительно играют корреляционные эффекты и спиновые флуктуации [1]. К таковым относятся широко известные высокотемпературные сверхпроводящие системы: купраты, пниктиды и халькогениды железа ($FeSC$) [2,3]. В последние годы активно ведется поиск новых сверхпроводящих соединений, чьи свойства также не описываются в рамках теории БКШ.

Экспериментально сверхпроводимость CuCo_2S_4 со структурой шпинели и критической температурой $T_c = 4.2$ К была подтверждена в 2021 году [4]. К настоящему времени накоплены противоречивые данные касательно симметрии сверхпроводящей щели CuCo_2S_4 и роли кулоновских корреляций в формировании куперовских пар [5]. По этой причине исследование влияния корреляционных эффектов на электронную структуру и магнитные свойства CuCo_2S_4 представляет бесспорный интерес, являясь важным шагом для понимания механизма сверхпроводящего перехода в достаточно ограниченном списке соединений на основе кобальта (Co). В данной работе кулоновские корреляционные эффекты были исследованы методом DFT+DMFT, объединяющим теорию функционала плотности (DFT) и динамическую теорию среднего поля (DMFT).

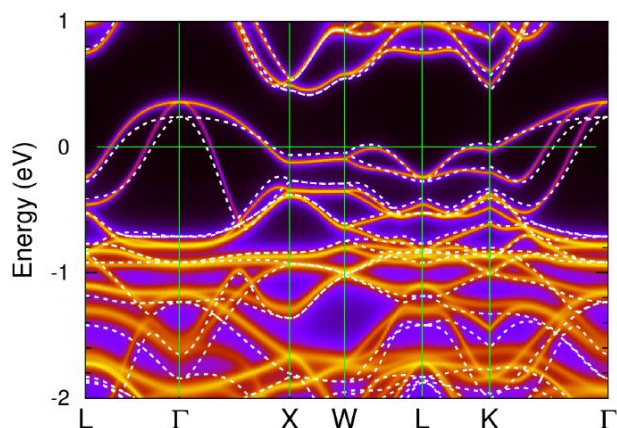


рис.1. Спектральная функция с угловым разрешением для CuCo_2S_4 , вдоль высокосимметричных направлений в зоне Бриллюэна, полученная методом DFT+DMFT (контур) в сравнении с энергетическими зонами, рассчитанными обобщенным градиентным приближением (пунктирные линии).

Расчёты показали, что спектральная функция CuCo_2S_4 соответствует металлу и характеризуется широким пиком на уровне Ферми, преимущественно обусловленный вкладами орбиталей Co t_{2g} симметрии. Было показано, что спектральные функции, рассчитываемые как в DFT, так и DFT+DMFT качественно похожи, а учет кулоновских корреляций в методе DFT+DMFT может быть описан масштабированием и сдвигом спектральной функции, полученной с помощью DFT. Для количественной оценки корреляционных эффектов была рассчитана перенормировка квазичастичной массы $\frac{m^*}{m}$, значения которой составили 1.18 и 1.22 для t_{2g} и e_g состояний, соответственно. Полученные величины $\frac{m^*}{m}$ приблизительно в 2 раза меньше таковых в FeSC системах [2]. Полученные результаты говорят, о слабом влиянии локальных кулоновских корреляций на спектральные свойства CuCo_2S_4 .

Было выяснено, что поверхность Ферми CuCo_2S_4 имеет три листа. Несмотря на слабое влияние корреляционных эффектов на спектральные функции, было установлено, что сдвиг неглубоких электронных карманов в направлении W-L-K зоны Бриллюэна (рис.1a) приводит к компактификации третьего листа поверхности Ферми (рис.1б). Получаемое преобразование поверхности Ферми может говорить о важности учета кулоновских корреляций для описания транспортных свойств CuCo_2S_4 .

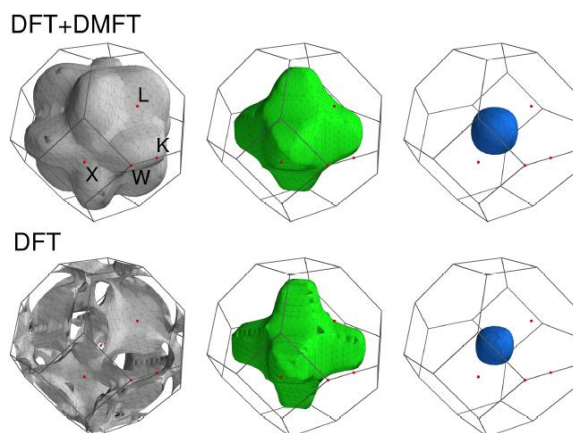


рис.2. Листы поверхности Ферми CuCo_2S_4 полученные методом DFT+DMFT (верхний ряд) для температуры $T = 290$ К и полученные с помощью обобщенного градиентного приближения (нижний ряд).

Было выяснено, что поверхность Ферми CuCo_2S_4 имеет три листа. Несмотря на слабое влияние корреляционных эффектов на спектральные функции, было установлено, что сдвиг неглубоких электронных карманов в направлении W-L-K зоны Бриллюэна (рис.1) приводит к компактификации третьего листа поверхности Ферми (рис.2). Получаемое преобразование поверхности Ферми может говорить о важности учета кулоновских корреляций для описания транспортных свойств CuCo_2S_4 .

Рассчитанный флуктуирующий магнитный момент и локальный момент для 3d состояний кобальта равны 1.00 и 0.18 μ_B соответственно. Данные величины более чем в два раза меньше соответствующих характерных значений, получаемых в подходе DFT+DMFT для FeSC. Полученный результат был интерпретирован как следствие более слабых спиновых флуктуаций в CuCo_2S_4 , чем в FeSC. На этом основании было высказано предположение о неприменимости флуктуационного механизма для объяснения образования сверхпроводящих куперовских пар в CuCo_2S_4 .

Мы благодарим Российский научный фонд за поддержку в рамках проекта 19-12-00012.

Список публикаций:

- [1] Hirsch J.E., Maple M.B., Marsiglio F. // *Physica C*. 2015. V. 514, P.1-8.
- [2] Nekrasov I.A., Pavlov N.S., Sadovskii M.V. // *JETP Letters*. 2015. V. 102. P. 30.
- [3] Yin Z.P., Haule K., Kotliar G. // *Nat. Mater.* 2011. V. 10. P. 932.
- [4] Jin Y.-Y., Sun S.-H., Cui Y.-W., Zhu Q.-Q., Ren Z., Cao G.-H. // *Phys. Rev. Materials*. 2021. V. 5. P. 074804.
- [5] Baskaran G. // *Phys. Rev. Lett.* 203. V. 91. P. 097003.

Исследование дефектов в цилиндрической капле нематического жидкого кристалла

Уткин Максим Алексеевич

Хазимуллин Максим Вильевич, Макаров Дмитрий Владимирович

Пермский государственный национальный исследовательский университет

Макаров Дмитрий Владимирович, к.ф.-м.н.

utkinmaksim@gmail.com

В работе численно исследуется структура капли нематического жидкого кристалла (НЖК) в слое с изотропной жидкостью, зажатым между двумя плоскопараллельными пластинами. Предполагается, что капля имеет цилиндрическую форму с одинаковыми диаметрами на верхней и нижней границах. Свободная поверхность капли НЖК образована вращением дуги окружности вокруг оси цилиндра. В середине слоя НЖК рассмотрено четыре основных дефекта: гиперболический точечный (HP), гиперболический кольцевой (HR), радиальный точечный (RP) и радиальный кольцевой (RR) – для нахождения, реализуемой конфигурации при заданных материальных параметрах системы [1]. Каждый дефект определяется характерным для него зарядом ядра и углом смещения.

Для описания искажений НЖК используется континуальная теория [2], в которой равновесная ориентационная структура слоя НЖК определяется из условия минимума полной свободной энергии. Преимущественная ориентация молекул жидкого кристалла задается с помощью вектора, называемого директором, направление которого в условии данной задачи определяется одним углом, отсчитанным от нижней пластины. Сцепление директора с пластинами и на свободной поверхности считается жестким и гомеотропным. Для описания конфигурации выбрана цилиндрическая система координат, основная плоскость которой располагается на нижней пластине, а ось аппликата вдоль ось цилиндра. Распределение директора жидкого кристалла в капле считается аксиально-симметричным, поэтому зависимость от азимутального угла отсутствует.

В результате решения с помощью методов конечных разностей и верхних релаксаций системы дифференциальных уравнений, полученной при минимизации функционала свободной энергии, построена фазовая диаграмма, определяющая области существования дефектов в цилиндрической капле. Так, при небольших контактных углах, которые соответствуют случаю «мостик-перетяжка» и малых значениях геометрического параметра, отвечающего за отношение диаметра капли на подложках к высоте слоя, устойчивой является конфигурация с дефектом HP. Увеличение геометрического параметра приводит к «сплющиванию» капли и переходу к конфигурации с дефектом HR. С ростом контактного угла происходит переход в RR. При больших контактных углах, соответствующих случаю «мостик-бочка», устойчивым состоянием становится конфигурация с RR при всех значениях геометрического параметра. Переход из конфигурации с HR в RR происходит при больших значениях геометрического параметра и при контактных углах вблизи случая прямого цилиндра.

Список публикаций:

- [1] Ellis P. W., Huang S., Klaneček S. et al. // *Physical Review E*. 2018. V. 97. P. 040701.
- [2] de Gennes P. G., Prost J. // *The Physics of Liquid Crystals*. Oxford: Clarendon Press, 1993. 596 p.

Электронные транспортные свойства топологического полуметалла PtSn₄

Фоминых Богдан Михайлович

Первалова Александра Николаевна, Наумов Сергей Владимирович, Марченков Вячеслав Викторович
Уральский федеральный университет имени первого президента России Б. Н. Ельцина

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН

Марченков Вячеслав Викторович, д.ф.-м.н.

fominykh@imp.uran.ru

Полуметаллы с узловыми линиями представляют собой класс топологических полуметаллов, в которых, в отличие от полуметаллов Вейля и Дирака, зоны пересекаются не в отдельных дискретных точках вблизи уровня Ферми, а вдоль некоторой линии в зоне Бриллюэна [1]. Одним из примеров таких материалов является топологический полуметалл PtSn₄, в котором точки Дирака образуют линию в зоне Бриллюэна, что было экспериментально подтверждено в работе [2]. Благодаря необычным состояниям как в объеме, так и на поверхности такие материалы могут проявлять многие экзотические транспортные свойства, такие как необычно большое магнитосопротивление, отрицательное продольное магнитосопротивление, большая подвижность носителей заряда. Поскольку причины, приводящие к некоторым особенностям их электронного транспорта, до сих пор однозначно не установлены, исследование электросопротивления и гальваномагнитных свойств таких материалов представляет большой интерес.

Целью данного исследования является изучение электронных транспортных свойств топологического полуметалла PtSn₄ для установления основных закономерностей их поведения и выявления возможных механизмов, лежащих в их основе.

Монокристаллы PtSn₄ были получены методом из раствора в расплаве. Химический состав образцов был исследован методом рентгеновского энергодисперсионного микроанализа на сканирующем электронном микроскопе Quanta 200 Regasus с приставкой EDAX в Центре коллективного пользования (ЦКП) «Испытательный центр нанотехнологий и перспективных материалов» ИФМ УрО РАН. Установлено, что химический состав исследуемого кристалла соответствует стехиометрическому PtSn₄. Рентгеноструктурный анализ показал, что полученные монокристаллы имеют орторомбическую структуру с пространственной группой Scca и параметрами решетки: $a \approx 6.31 \text{ \AA}$, $b \approx 11.33 \text{ \AA}$, $c \approx 6.27 \text{ \AA}$. Измерение сопротивления было проведено с использованием четырехконтактной методики при температурах от 4.2 до 300 К в магнитных полях до 10 Т.

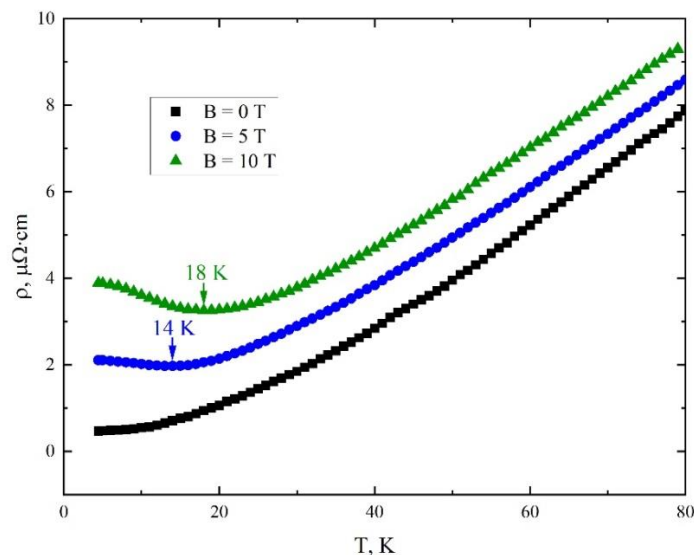


рис. 1. Температурные зависимости электросопротивления монокристалла PtSn₄ в магнитных полях 0 Т, 5 Т и 10 Т. Стрелками указаны значения температур, при которых достигается минимум на соответствующей зависимости.

В результате исследования установлено, что электросопротивление монокристалла PtSn₄ в нулевом магнитном поле зависит от температуры по квадратичному закону при низких температурах. Квадратичная температурная зависимость электросопротивления при низких температурах также наблюдалась в других топологических полуметаллах, в частности WTe₂ и MoTe₂ [3, 4]. Помимо электрон-электронного рассеяния, квадратичный по температуре вклад в электросопротивление может быть связан с рассеянием на поверхности образца. На температурной зависимости сопротивления в магнитных полях 5 Т и 10 Т можно заметить наличие

минимума при температурах 14 К и 18 К соответственно (рис. 1). Подобное поведение сопротивления наблюдалось в монокристалле WTe_2 и может быть объяснено переходом от эффективно сильных ($\omega_c \tau \gg 1$, где ω_c – циклотронная частота, τ – время релаксации носителей тока) к эффективно слабым ($\omega_c \tau \ll 1$) магнитным полям [3]. Помимо этого, из анализа данных по эффекту Холла были проведены оценки концентрации и подвижностей носителей тока. В рамках однозонной модели установлено, что основным типом носителей тока в исследуемом монокристалле $PtSn_4$ являются дырки с концентрацией $n = 6.8 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ и подвижностью $\mu \approx 1950 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ при $T = 4.2 \text{ К}$.

Таким образом, в результате проведенных исследований были выявлены такие особенности электронного транспорта $PtSn_4$, как квадратичная зависимость электросопротивления при низких температурах, минимум на температурной зависимости сопротивления в магнитном поле, предложено другое по сравнению с известными объяснение данного минимума, оценены концентрация и подвижность носителей тока.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема “Спин”, № 122021000036-3).

Список публикаций:

[1] Yang M. X., Luo W., Chen W. // *Advances in Physics: X*. 2022. V. 7. №. 1. P. 2065216.

[2] Wu Y., Wang LL., Mun E., Johnson D.D., Mou D., Huang L., Lee Y., Bud'ko S.L., Canfield P.C., Kaminski A. // *Nature Physics*. 2016. V. 12. №. 7. P. 667-671.

[3] Перевалова А.Н., Наумов С.В., Подгорных С.М., Чистяков В.В., Марченкова Е.Б., Фоминых Б.М., Марченков В.В. // *Физика металлов и металловедение*. 2022. Т. 123. №. 11. С. 1131-1137

[4] Perevalova A. N., Naumov S. V., Marchenkov V. V. // *Metals*. 2022. V. 12. №. 12. P. 2089.

Электронная структура и магнитные свойства $MnTe$

Чернов Евгений Денисович

Лукоянов Алексей Владимирович

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН

Лукоянов Алексей Владимирович

chernov_ed@imp.uran.ru

Теллурид марганца – соединение, которое относится к классу халькогенидов и вызывает научный интерес. Известно, что все халькогениды марганца, в том числе и $MnTe$, являются антиферромагнитными изоляторами [1-4]. Для MnS и $MnSe$ стабильной кристаллической структурой будет фаза каменной соли, хотя MnS и $MnSe$ имеют и другие кристаллические фазы, – цинковой обманки и вюртцита. Однако теллурид марганца отличается от остальных халькогенидов марганца и кристаллизуется в стабильной фазе типа $NiAs$, хотя также имеет высокотемпературную фазу типа $NaCl$ [5]. В данной работе теоретические исследования теллурида марганца проводились при учете антиферромагнитного упорядочения $3d$ электронов марганца и различных спиновых конфигурациях. При расчете электронной структуры использовался программный пакет Quantum ESPRESSO [6] и метод DFT+U [7]. Значение параметра кулоновского взаимодействия составило 6.9 эВ и обменного взаимодействия 0.86 эВ. Исследование проводилось для трех кристаллических фаз: кубической $Fm\bar{3}m$ (номер 225 в списке кристаллографических групп), гексагональной $R\bar{3}m$ (номер 194 в списке кристаллографических групп) и орторомбической $Pnma$ (номер 62 в списке кристаллографических групп). В элементарной ячейке содержалось 4 атома Mn (2 первого типа Mn1 и 2 второго типа Mn1) и 4 атома Te. В ходе исследования было показано, что гексагональная фаза является изолятором с шириной щели порядка 1 эВ, а остальные две фазы проявляют металлические свойства. Наиболее энергетически выгодной спиновой конфигурацией для орторомбической и гексагональной фаз будет конфигурация « $\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow$ ». Также стоит отметить, что орторомбическая фаза обладает ферромагнитным упорядочением и величина магнитных моментов ионов марганца составила 1.88 и 3.32 μ_B . В свою очередь наибольшим магнитным моментом ионов марганца обладает кубическая фаза с величиной момента 4.48 μ_B . Таким образом, в ходе нашего исследования была выявлена наиболее энергетически выгодный тип магнитного упорядочения для гексагональной и орторомбической фазы, а также определена фаза с наибольшим магнитным моментом ионов марганца $MnTe$.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (проект 20-02-00234).

Список публикаций:

[1] Banewicz J. J., Heidelberg R. F., Luxem A. H. // *J. Phys. Chem*. 1961. Vol. 65 № 4. P. 615-617.

[2] Kunitami N., Hamaguchi Y., Shuinchiro A // *J. Physique*. 1964. Vol. 25. № 5 P.568-574.

[3] Yadarka H., Harada T., Hirahara E. // *J. Phys. Soc. Japan*. 1961. Vol. 17 № 5. P. 875-876.

[4] Uchida E., Kondoh H., Fukuoka N. // *J. Phys. Soc. Japan*. 1956. Vol. 11. № 1 P. 27-32.

[5] Hulliger F. // *Structure and Bonding* 1968. Vol. 4. P. 190.

[6] Giannozzi P., et al // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2009. Vol. 21. 395502

[7] Anisimov V. I., Gunnarsson O. // *Phys. Rev. B*. 1991. Vol. 43. № 10. 7570.

Влияние циклической заморозки на динамику нанокластеров серебра на поверхности полипропиленовых и полиэфирных волокон

Шашков Денис Игоревич

Мальшико Вадим Владимирович, Джимак Степан Сергеевич

Кубанский государственный университет

ShiniX88@mail.ru

Наночастицы серебра (AgNPs) нашли применение во многих областях промышленности и медицине [1-3]. Последнее наиболее перспективно в случаях контаминации полирезистентными штаммами микроорганизмов, особенно при сочетанном использовании AgNPs и современных способов доставки наночастиц в инфицированные участки [4, 5]. Данная ситуация обусловлена физико-химическими и биологическими свойствами подобных наночастиц, в связи с чем благодаря их высокой бактерицидной, фунгицидной и противовирусной активности они все шире используются для придания антимикробных свойств раневым повязкам, шовному материалу, различным медицинским полимерам [2, 3]. Таким образом, становится целесообразным изучение динамики процессов образования AgNPs на поверхности материалов из полипропилена, имеющих медицинское назначение.

Для оценки состояния AgNPs на поверхности полипропилена был использован шовный материал «Монофил», состоящий из полипропиленовых волокон. Для сравнения был выбран шовный материал «Полиэстер», состоящий из волокон полиэфира этиленгликоля и терефталевой кислоты. Наночастицы серебра были получены методом кавитационно-диффузионного фотохимического восстановления. В качестве лиганда был использован поливинилпирролидон [6]. Для проведения эксперимента раствор наночастиц серебра разбавляли дистиллированной водой до концентрации 5 мкг/мл, после чего при термостатировании (60°C) добавляли желатин до конечной концентрации 0.9 %, что позволило перевести раствор в состояние геля [7]. Шовные материалы были разделены на отрезки длиной до 1 см, после чего отрезки погружали в полученный гель на 24 часа. Затем отрезки извлекали и проводили 10-кратный цикл заморозки/оттаивания. Для оценки состояния наночастиц на поверхности полимерных волокон выполняли электронную микроскопию.

Анализ полученных микрофотографий позволил выявить увеличение общего количества AgNPs после выполнения циклической заморозки/разморозки на поверхности шовного материала Монофил на основе полипропилена, однако при сравнительном анализе количества наночастиц различных размерных диапазонов были выявлены существенные различия их образования и расположения на волокне после воздействия минусовой температуры. Наблюдаемые изменения характеризовались тем, что при значительном увеличении количества наночастиц серебра размером 1-10 нм (в 8.8 раза) и частиц размером свыше 40 нм (в 3.8 раза), было отмечено увеличение количества наночастиц размером 25-40 нм на 44,0% и снижение среднего количества AgNPs размером 10-25 нм на 20.2 %. Таким образом, установленное увеличение количества небольших, наиболее функциональных наночастиц серебра, сопровождалось уменьшением количества наночастиц средних размеров. При анализе микрофотографий волокон полиэфира также отмечено возрастание общего количества наночастиц серебра. Выявлено увеличение в 1.8 раза среднего количества крупных частиц свыше 40 нм и в 3.3 раза наночастиц в пределах 25-40 нм. Таким образом, циклическая заморозка способствует повышенной сорбции AgNPs на поверхности полипропилена, что может быть использовано для изготовления изделий медицинского назначения.

Работа выполнена при финансовой поддержке госзадания Минобрнауки №FZEN-2023-006.

Список публикаций:

- [1] Потекаев А.И., Лысак И.А., Малиновская Т.Д. и др. // *Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология*. 2020. Т.63(3). С. 94–99.
- [2] Gherasim O., Puiu R.A., Birca A.C. et al. // *Nanomaterials (Basel)*. 2020. V.10(11). P. 2318.
- [3] Pryshchepa O., Pomastowski P., Buszewski B. // *Adv. Colloid Interface Sci.* 2020. V. 284. P. 102246.
- [4] Basov A.A., Fedosov S.R., Malyshko V.V. et al. // *Journal of Wound Care*. 2021. V. 30(4). P. 312–322.
- [5] Popov K.A., Bykov I.M., Tsybalyuk I.Yu. et al. // *Medical News of North Caucasus*. 2018. V. 13(3). P. 525–529.
- [6] Dzhimak S.S., Sokolov M.E., Basov A.A. et al. // *Nanotechnologies in Russia*. 2016. V. 11. P. 835–841.
- [7] Dzhimak S.S., Goryachko A.I., Sokolov M.E. et al. // *Russian Physics Journal*. 2019. V. 62(2). P. 314–322.

Кристаллическая и электронная структура $\text{Cu}_{0.5}\text{ZrSe}_2$

Шкварин Алексей Сергеевич

Меренцов Александр Ильич, Постников Михаил Сергеевич, Титов Александр Натанович
Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН
shkvarin@imp.uran.ru

Исследования мультиферроиков вызвали огромный научный интерес к материалам, в которых одновременно с магнитным возникает сегнетоэлектрический порядок. Повышение температуры упорядочения и усиление взаимодействия между электрической и магнитной подсистемами могут сделать эти материалы перспективными для практического применения. Нами был обнаружен аналог мультиферроика CuCrSe_2 – CuZrSe_2 , в котором медь распределена по тетраэдрическим позициям так же, как и в CuCrX_2 . Структура такого материала аналогична структуре дельтафосита (CuCrO_2) и может быть описана как решетка, состоящая из слоев MX_2 ($M = \text{Cr, Zr; X} = \text{S, Se}$), интеркалированных медью. В низкотемпературной фазе CuCrX_2 отсутствует центр симметрии, и она демонстрирует сегнетоэлектрическое упорядочение. Основная проблема в том, что температура перехода довольно низкая — для CuCrSe_2 она составляет около 50 К. Предположительно температуру перехода можно повысить замещением в подрешетке Cr. Однако все предыдущие попытки, предпринятые в этом направлении, привели к потере самого ценного свойства — нецентросимметричности решетки. Причиной этого является перераспределение атомов Cu из тетраэдрических позиций в октаэдрические, расположенные в центре симметрии элементарной ячейки. Кристаллическая структура Cu_xZrSe_2 в свою очередь при концентрациях меди более $x = 0.4$ располагает атомы меди в тетраэдрических позициях. Ранее мы подробно исследовали электронную и кристаллическую структуру совместно с физическими свойствами системы Cu_xZrSe_2 в концентрационном диапазоне $0 \leq x \leq 0.3$ [1,2]. В данной работе мы исследуем электронную структуру соединения $\text{Cu}_{0.5}\text{ZrSe}_2$ методами XPS (x-ray photoelectron spectroscopy), ResPES (resonant x-ray photoelectron spectroscopy) и XAS (x-ray absorption spectroscopy).

Кристаллическая структура изучена на поликристаллических образцах методом полнопрофильного уточнения в программном пакете GSAS [3]. Согласно уточнению атомы меди занимают тетраэдрические позиции в межслоевом пространстве.

Спектры XPS, XAS и ResPES для монокристалла $\text{Cu}_{0.5}\text{ZrSe}_2$ были получены на линии superESCA синхротрона Elettra (Триест, Италия). Все образцы были сколоты in situ в высоком вакууме при давлении ниже $1 \cdot 10^{-9}$ Торр. Энергии связи фотоэмиссии калибровали по уровню Ферми, измеренному на золотом эталоне. Спектры поглощения получены в режиме полного выхода электронов (TEY) с энергетическим разрешением около 0.1 эВ. Спектры остовных уровней показали хорошее качество монокристалла $\text{Cu}_{0.5}\text{ZrSe}_2$ и сколотой поверхности. Для остовных линий селена и циркония наблюдается сохранение формы линии и сдвиг около 0.55 эВ в сторону меньших энергий связи по сравнению с исходным ZrSe_2 . Одинаковый по величине и направлению сдвиг может означать сдвиг уровня Ферми в результате переноса электронов с интеркалированных атомов меди на решетку ZrSe_2 . Спектр валентной полосы значительно размывается, также наблюдается небольшое смещение спектра в сторону больших энергий. Оба этих эффекта обусловлены возникновением новых состояний, привнесенных атомами меди, в валентной полосе. Форма спектр поглощения меди меняется значительным образом. Пропадает часть пиков, характерных для атома меди в октаэдрическом положении. Это свидетельствует о тетраэдрической координации атома меди в $\text{Cu}_{0.5}\text{ZrSe}_2$.

Впервые выполнено исследование монокристаллического образца $\text{Cu}_{0.5}\text{ZrSe}_2$. Спектры валентной зоны и спектры остовных уровней демонстрируют изменение формы и энергетического положения, что объясняется тетра-координацией атомов меди в $\text{Cu}_{0.5}\text{ZrSe}_2$. Показано, что при тетра-координации меди характер химической связи является ионным и связан с переносом заряда от меди на ZrSe_2 . Не обнаружено следов Ti 3d/Cu 3d – гибридизации, характерной для химической связи интеркаланта с решёткой в случае окта-координации интеркаланта.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-13-00361).

Список публикаций:

- [1] Shkvarin A.S. et al. // *Specific features of the electronic and crystal structure of Cu_xZrSe_2 ($0 < x \leq 0.3$)*. *J. Mater. Chem. C*. 2020. Vol. 8, № 24. P. 8290–8304.
- [2] Shkvarin A.S. et al. // *Band Gap Width Control by Cu Intercalation into ZrSe_2* . *J. Phys. Chem. C*. 2019. Vol. 123, № 1. P. 410–416.
- [3] A. C. Larson and R. B. Von Dreele // *General Structure Analysis System (GSAS)*. *Los Alamos Natl. Lab. [Rep.]*. 2004. P. Report LAUR 86-748.

Устойчивость скирмионов в фрустрированных антферромагнитных/сегнетоэлектрических бислоях с треугольной решеткой

Юлдашева Алина Рифовна

Уфимский университет науки и технологий

Alina.yuldasheva.92@mail.ru

Магнитные скирмионы — наноразмерные топологически защищенные вихри спина — исследовались как потенциальные носители информации в устройствах спинтроники [1, 2, 3]. В этой работе рассмотрены магнитные и сегнетоэлектрические слои с треугольной решеткой. Скирмионы обычно образуются под действием внешнего магнитного поля в нецентросимметричных нанопленках или на интерфейсах в гетероструктурах и межфазных, нарушающих симметрию, сверхрешетках. В данной работе мы рассмотрели магнитный и сегнетоэлектрический слои с треугольной решеткой.

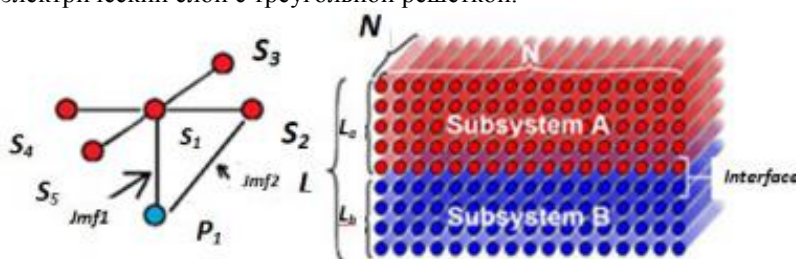


рис.1. Схематичное представление магнитоэлектрического взаимодействия на границе между магнитными и сегнетоэлектрическими слоями.

Целью данной работы является изучение влияния интерфейсной связи Дзялошинского-Мория на свойства скирмионов. Мы изучаем фазовый переход и конфигурации основного состояния в магнитоэлектрических сверхрешетках, образованных чередующимися антиферромагнитными и сегнетоэлектрическими слоями, с использованием моделирования Монте-Карло и метода наискорейшего спуска. Обнаружено образование стабильного скирмионного кристалла в основном состоянии антиферромагнитных/сегнетоэлектрических сверхрешеток с треугольной решеткой при нулевом внешнем магнитном поле. Очень сильные магнитоэлектрические взаимодействия на границе раздела приводят к исчезновению магнитного фазового перехода. Существование скирмионов на магнито-сегнетоэлектрической поверхности в основном состоянии при нулевом магнитном поле очень интересно и может иметь практическое применение в цифровых технологиях и спинтронике. Обнаружено, что при нулевом приложенном магнитном поле скирмионы в бислое антиферромагнетик/сегнетоэлектрик с треугольной решеткой могут образовываться в диапазоне значений межфазного магнитоэлектрического взаимодействия от 0.85 до 1.95. Результаты проведенного нами моделирования методом Монте-Карло подтверждают, что наблюдаемые скирмионы стабильны до конечной температуры $T = 0.570$ в относительных единицах, приведенных к обменной энергии.

Список публикаций:

[1] Rosh A. // *Nat. Nanotechnol.*, 2017, v. 12, pp. 103-104.

[2] Fert A, Cros V, // *Nat. Nanotechnol.*, 2013, v. 8, pp. 152-156.

[3] Koshibae W, Kaneko Y, Iwasaki J, Kawasaki M, Tokura Y, Nagaosa N. // *Japanese Journal of Applied Physics*, 2015, v. 54, p053001.