

2 - Физика конденсированного состояния вещества

Астафьев Павел Андреевич, н.с.
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, НИИ физики
СВЧ поглощение в модифицированных оксидом германия твердых растворах феррита висмута и феррониобата свинца
Резниченко Лариса Андреевна, д.ф.-м.н.
e-mail: astafev@sfedu.ru стр. 48

Вопиловский Алексей Михайлович, 4 курс
Новосибирск, Новосибирский государственный университет, физический факультет
Кинетика затухания люминесценции и светоиндуцированного поглощения кристалла ниобата лития, легированного магнием
Федоренко Станислав Григорьевич,
e-mail: a.vopilovskii@g.nsu.ru стр. 49

Гавриляк Алина Маратовна, аспирант 3 года обучения
Челябинск, Южно-Уральский государственный университет, Институт естественных и точных наук
Влияние концентрации ионов на электрооптический отклик нематического жидкого кристалла
Подгорнов Федор Валерьевич, к.ф.-м.н.
e-mail: alinaishmurzina1609@gmail.com стр. 51

Гвоздикова Екатерина Викторовна, 3 курс
Кемерово, Кемеровский государственный университет, Институт фундаментальных наук
Структура и оптические спектры NLO активного кристалла $\text{Ba}_2\text{NO}_3(\text{OH})_3$
Журавлёв Юрий Николаевич, д.ф.-м.н.
e-mail: ekaterinagvozdikova3@yandex.ru стр. 52

Глазунова Екатерина Викторовна, н.с.
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, НИИ физики
Фазообразование и физико-химические свойства твердых растворов многокомпонентных систем на основе BiFeO_3
Вербенко Илья Александрович, д.ф.-м.н.
e-mail: kate93g@mail.ru стр. 54

Гусейнова Айтэн Физулиевна, 5 курс
Петрозаводск, Петрозаводский государственный университет, Физико-технический факультет
Антимикробные нанокompозитные покрытия на основе анодированной алюминиевой проволоки
Кокатев Александр Николаевич, к.т.н.
e-mail: aytenguseynova@mail.ru стр. 55

Джантемиров Ауес Хасамбиевич, аспирант 3 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический факультет
Моделирование температурной зависимости коэффициента Холла в системах с сильным электрон-фононным взаимодействием и высокой плотностью носителей заряда
Мясникова Анна Эдуардовна, д.ф.-м.н.
e-mail: dzhantemirov.27@yandex.ru стр. 56

Дмитриев Виктор Олегович, аспирант 4 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический факультет
Изучение механизмов взаимодействия MeOx ($\text{Me}=\text{Cu}, \text{Ni}$) с графеновой плоскостью методом XANES спектроскопии
Яловега Галина Эдуардовна, д.ф.-м.н.
e-mail: vdmitriev@sfedu.ru стр. 58

Зубрилин Александр Александрович, 4 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический факультет
О возможностях возникновения новых мультиферроидных состояний в твердых растворах на основе феррита висмута
Вербенко Илья Александрович, д.ф.-м.н.
e-mail: czybrilin15@gmail.com стр. 58

Коробко Кирилл Вячеславович, аспирант 1 года обучения
Кемерово, Кемеровский государственный университет, Институт фундаментальных наук
Вычисление сингулярных интегралов по зоне Бриллюэна
Гордиенко Алексей Болеславович, д.ф.-м.н.
e-mail: kirillir99@mail.ru стр. 60

Кочкин Андрей Сергеевич, аспирант 2 года обучения, преподаватель
Барнаул, Алтайский государственный технический университет, факультет специальных технологий
Молекулярный анализ кристалла Pt₂Al
Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н.
e-mail: andre211@mail.ru стр. 61

Максименкова Мария Андреевна, 11 класс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, специализированный учебно-научный центр
Влияние примеси оксида циркония на процессы спекания на примере твёрдых растворов титаната-цирконата бария
Волков Дмитрий Вячеславович
e-mail: m44820379@gmail.com стр. 62

Мартыненко Александр Александрович, 2 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический факультет
Диэлектрические и пьезоэлектрические свойства высокотемпературных сегнетоэлектрических твердых растворов системы (1-x)BiScO₃-xPbTiO₃
Павелко Алексей Александрович, д.ф.-м.н.
e-mail: alekmar@sfedu.ru стр. 63

Мойса Максим Олегович, н.с.
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, Научно-исследовательский институт физики
Магнитоёмкость в твёрдых растворах (1-x)(Na_{0.5}K_{0.5})NbO₃-xBiFeO₃ при 77 К
e-mail: moysa@sfedu.ru стр. 64

Мукминова Регина Рустамовна, 4курс
Уфа, Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы, Институт физики, математики, цифровых и нанотехнологий
Изучение оптического спектра поглощения полидифениленфталата допированного углеродными наноматериалами
Каримов Рамис Хамитович, к.ф.-м.н.
e-mail: mukminova.regina.01@mail.ru стр. 65

Недоедкова Ольга Вадимовна, аспирант 2 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический факультет
Исследование электрофизических свойств и электронной структуры композитных материалов на основе полианилина
Яловега Галина Эдуардовна, д.ф.-м.н.
e-mail: nedoedkova@sfedu.ru стр. 66

Носова Наталья Максимовна, м.н.с.
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, физический факультет
Влияние условий синтеза и термических обработок на свойства соединений Fe_{0.25}TaCh₂ (Ch = S, Se)
Баранов Николай Викторович, д.ф.-м.н.
e-mail: toporova.natalia@urfu.ru стр. 67

Пикуль Анастасия Денисовна, магистрант 1 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический факультет
Исследование высокоэнтропийных редкоземельных ортоферритов методом мессбауэровской спектроскопии
Кубрин Станислав Петрович, д.ф.-м.н.
e-mail: nasta.pikul.34@gmail.com стр. 68

Подшивалов Алексей Павлович, магистрант 1 года обучения
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, физико-технологический институт
Исследование магнитокристаллической анизотропии в металлических системах при помощи функций Грина с пространственным разрешением
e-mail: a.p.podshivalov@urfu.ru стр. 69

Самигуллина Анжела Ильгизовна, 4 курс
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Спектр спиновых волн в двухслойной структуре решеток скирмионов
Шарафуллин Ильдус Фанисович, д.ф.-м.н.
e-mail: angelasamig2002@gmail.com стр. 70

Соловова Надежда Юрьевна, магистрант 1 года обучения
Новосибирск, Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, физический факультет
Кристаллическая и электронная структура плёнок (2?3x3)Bi/InAs
Голяшов Владимир Андреевич, к.ф.-м.н.
e-mail: n.solovova@g.nsu.ru стр. 71

Тимофеев Вячеслав Сергеевич, аспирант 2 года обучения
Кемерово, Кемеровский государственный университет, институт фундаментальных наук
Структура и зонный спектр кристалла Ca₂NF с решеткой антихалькопирита
Гордиенко Алексей Болеславович, д.ф.-м.н.
e-mail: slava.timofeev.mail@gmail.com стр. 72

Хилько Николай Георгиевич, 1
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, Научно-исследовательский институт физики
Динамические эффекты радужного рассеяния атомов на поверхности кристалла
Малышевский Вячеслав Сергеевич, д.ф.-м.н.
e-mail: khilko@sfedu.ru стр. 73

Шишлов Иван Владимирович, 1 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический факультет
Особенности атомной и электронной структуры композита Co/PAN
Шматко Валентина Анатольевна, к.ф.-м.н.
e-mail: timi.win1408@gmail.com стр. 74

СВЧ поглощение в модифицированных оксидом германия твердых растворах феррита висмута и феррониобата свинца

Астафьев Павел Андреевич

Жидель Карина Михайловна

Южный федеральный университет

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

Astafev@sfedu.ru

В последнее время все больше внимания уделяется исследованию перспектив применения функциональных материалов, таких как сегнетоэлектрики, ферромагнетики и мультиферроики в области СВЧ-электроники в качестве радиопоглощающих материалов (РПМ). Проводится множество исследований электрических и магнитных свойств керамики на основе BiFeO_3 (BFO) в СВЧ-диапазоне. В ряде работ [1–3] исследуются свойства BFO, модифицированного переходными металлами и редкоземельными элементами, который демонстрирует высокий уровень СВЧ поглощения в области частот 10–10.5 ГГц. Наряду с BFO, перспективным материалом для применения в СВЧ-электронике является $\text{Pb}(\text{Fe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5})\text{O}_3$ (PFN) [4]. Сообщается об удовлетворительных радиопоглощающих свойствах данного материала [5] и исследуются свойства твердых растворов (ТР) PFN с $\text{Pb}(\text{Fe}_{2/3}\text{W}_{1/3})\text{O}_3$ и CuMnFeO_4 , которые также рассматриваются в качестве перспективных РПМ [6,7]. Существует два подхода для улучшения поглощающих свойств материала: 1) создание композитов на основе данного материала; 2) модификация исходного состава легирующими компонентами или другими составами схожей структуры. Для достижения высоких показателей поглощения в рамках настоящей работы был выбран второй подход. Таким образом, целью настоящей работы было установление закономерностей формирования СВЧ-отклика керамических материалов на основе BFO и PFN, модифицированных GeO_2 , в зависимости от количества модификатора в системах, приближенных к реальным СВЧ устройствам.

Для проведения настоящего исследования были выбраны составы системы BFO–PFN в окрестностях концентрационных фазовых переходов, содержащих структурные неустойчивости (0.7BFO–0.3PFN — окрестности концентрационной области с содержанием ромбоэдрической и моноклинной фазы, 0.05BFO–0.95PFN — окрестности перехода из псевдокубической фазы в ромбоэдрическую). Образцы были выполнены в виде цилиндров высотой 1 мм и диаметром 12 мм с погрешностью по высоте не более 5%. Радиофизические измерения выполнялись с помощью векторного анализатора цепей (VNA) P9375A «Keysight» (USA, California), имеющего рабочий диапазон частот 300 кГц–26.5 ГГц, и измерительной ячейки, представляющей собой прямолинейный отрезок микрополосковой линии (МПЛ) на подложке из эпоксидного материала, армированного стекловолокном (FR4) с коаксиальными разъемами стандарта SMA 3.5 мм с обоих концов.

Результаты измерения и расчетов показывают (*рис. 1*), что при введении малого количества модификатора (0.5, 1 мас.% GeO_2) в ТР 0.7BFO–0.3PFN зависимости коэффициента рассеяния от частоты изменяются незначительно, что говорит о возможности улучшения технологичности исходных составов при сохранении целевых параметров. При добавлении 0.5 мас.% GeO_2 наблюдается незначительное расширение полосы поглощения, что может быть учтено при разработке высокоэффективных радиопоглощающих материалов. В составах 0.05BFO–0.95PFN, обладающих наиболее широкой полосой поглощения, при добавлении 0.5 мас.% GeO_2 обнаружено как увеличение максимального значения потерь, так и расширения полосы с высокими потерями, причем материалы с наибольшей температурой спекания обладают наиболее широкой полосой поглощения. В сравнении с промышленным поглотителем на основе карбонильного железа и эпоксидной смолы с массовой долей карбонильного железа 60% образцы состава 0.7BFO–0.3PFN обладают схожим максимальным значением потерь, а образцы состава 0.05BFO–0.95PFN — схожей шириной полосы поглощения.

Указанное открывает перспективы применения составов, представленных в настоящей работе, в качестве материалов радиопоглощающих покрытий. Следует отметить, что исследованные материалы представляли собой керамику с высокой относительной плотностью, в отличие от промышленных поглотителей, представляющих собой композиты с относительно низким содержанием радиопоглощающего компонента. Для уточнения полученных результатов следует провести исследование композитов с аналогичным содержанием основного компонента.

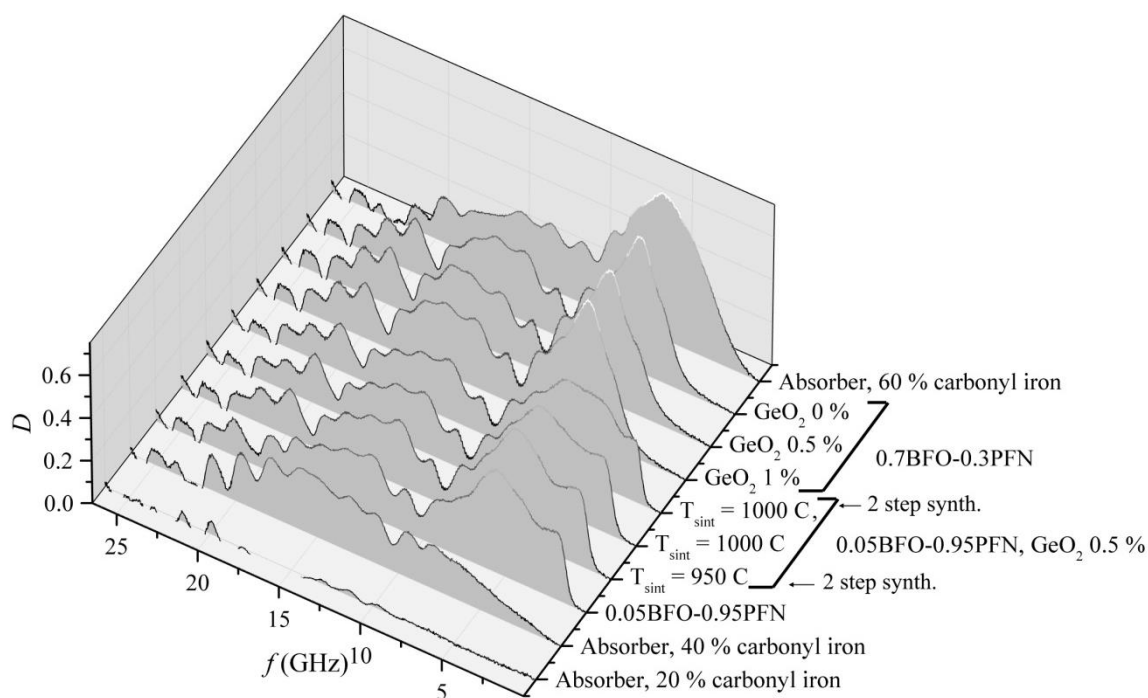


рис.1. Зависимости коэффициента рассеяния от частоты образцов BFO–PFN в сравнении друг с другом и промышленными поглотителями на основе карбонильного железа.

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. Проект № FENW-2023-0010/ГЗ0110/23-11-ИФ). Наименование темы: «Мультикомпонентные интеллектуальные структуры: фазопереходные кроссинг-эффекты и стратегии ускоренного дизайна эко-систем для технологий цифрового проектирования устройств контроля параметров физических сред».

Список публикаций:

- [1] Palaimiene E., Macutkevicius J., Karpinsky D. et al. // *Applied Physics Letters*. 2015. V. 106. P. № 1.
- [2] Yousaf M., Lu Y., Hu E. et al. // *Journal of Colloid and Interface Science*. 2022. V. 608. P. 1868.
- [3] Li Y., Cao W., Yuan J. et al. // *Journal of Materials Chemistry C*. 2015. V. 3. № 36. P. 9276.
- [4] Alvarez G., Font R., Portelles J. et al. // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 2007. V. 68. № 7. P. 1436.
- [5] Khuchua N. // *Proceedings of the International Meeting on Ferroelectrics*. 1966. V. 2. P. 161.
- [6] Shevchuk Y., Gagulin V., Korzhagina S., Ivanova V. // *Inorganic materials*. 2001. V. 37. P. 836.
- [7] Fediy A.A., Kalganov D.A., Filonenko E.M. et al. // *Physics of the solid state*. 2021. V. 63. № 11. P. 1774.

Кинетика затухания люминесценции и светоиндуцированного поглощения кристалла ниобата лития, легированного магнием

Вопиловский Алексей Михайлович

Новосибирский государственный университет

Федоренко Станислав Григорьевич

a.vopilovskii@g.nsu.ru

Ниобат лития является сегнетоэлектрическим оксидом, широко применяемым при создании электрооптических, а также нелинейно-оптических устройств [1], [2]. Этот кристалл также рассматривается в качестве эталона для других сегнетоэлектрических оксидов и обычно используется в качестве пробного материала, где новые концепции и приложения могут быть протестированы как в фундаментальных, так и в прикладных исследованиях [3]. Его уникальные электрические и оптические свойства, в том числе, обусловлены наличием межзонных состояний – поляронов малого радиуса. В частности, он является перспективным материалом для создания оптических ячеек памяти и оптических модуляторов, эффективность которых во многом определяется подвижностью поляронов и их прыжковыми барьерами. В связи с появлением относительно новых экспериментальных данных стал возможным более детальный анализ процессов,

происходящих в кристалле в результате возбуждения лазерным импульсом с целью определения этих параметров. До сих пор кинетические кривые люминесценции и фотоиндуцированного поглощения описывались лишь феноменологически, поэтому создание кинетической модели и определение на ее основе микроскопических параметров системы является актуальной задачей.

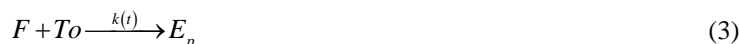
В настоящей работе был проанализирован обширный массив экспериментальных кинетических данных, измеренных в диапазоне температур 50-293 К [4, 5]. На основании анализа были предложены модельные механизмы люминесценции и светоиндуцированного поглощения, в которых основную роль играют взаимопревращения трех видов квазичастиц: электронных и дырочных поляронов, и самозахваченных экситонов.

Для люминесценции был рассмотрен механизм (1), согласно которому самозахваченные экситоны (E) могут аннигилировать с излучением фотона с характерным временем (τ) и параллельно захватываться на ловушках - вакансиях лития (Tv), переходя в состояние (Ep), в котором рекомбинация уже происходит безызлучательно; при этом захват происходит с обменной вероятностью в единицу времени (2).



$$w(T, r_{AB}) = w_T(T) \exp\left(-\frac{2r_{AB}}{l}\right) \quad (2)$$

где $k(t)$ – нестационарная константа скорости тушения. Для поглощения на длине волны, соответствующей свободным электронным поляроном (F) предложен следующий механизм: после индуцирующего лазерного импульса в силу электронейтральности образуется одинаковое количество электронных и дырочных поляронов, дырочные поляроны быстро переходят в связанные состояния с малой подвижностью (позиции кислорода вблизи вакансий лития - To), на которых электронные поляроны (F) в дальнейшем тушатся по реакции (3) тоже с обменной вероятностью (2).



При этом для описания эксперимента предполагается, что при низких температурах тушение происходит с нестационарной константой скорости, а при высоких выходит на стационар. Расчёт обеих констант производился в приближении дифференциальной теории встреч. Определяющий кинетику интеграл от константы скорости при этом равен (4) для начальной нестационарной стадии, и (5) для выхода на стационар.

$$\int_0^t k(t') dt' = \int_R^\infty (1 - \exp(-w(r)t)) d^3r + \frac{Dt^3}{6} \int_R^\infty \left(\frac{dw(r)}{dr}\right)^2 \exp(-w(r)t) d^3r \quad (4)$$

$$\int_0^t k(t') dt' = 4\pi DR_0 t + 8\sqrt{\pi Dt} R_0^2 \quad (5)$$

Здесь D-парный коэффициент диффузии, R-максимальный радиус сближения, $R_0(w_r, l, D, R)$ - характерный радиус захвата, на котором происходит туннелирование при выходе на стационар. Экспериментальные данные были аппроксимированы рассчитанными теоретическими зависимостями методом постатийного анализа, в результате чего были определены и проанализированы прыжковые радиусы взаимодействия и энергии активации процессов, приводящих к релаксации поляронов и экситонов в кристалле, а также коэффициенты диффузии этих квазичастиц.

Список публикаций:

- [1] Zhang M. et al. *Integrated lithium niobate electro-optic modulators: when performance meets scalability* // *Optica*. 2021. V. 8. №. 5. p. 652–667.
- [2] Li Y. et al. *Recent progress of second harmonic generation based on thin film lithium niobate* // *Chinese Optics Letters*. 2021. V. 19. №. 6. p. 060012.
- [3] Reichenbach P. et al. *Polaron-mediated luminescence in lithium niobate and lithium tantalate and its domain contrast* // *Crystals*. 2018. V. 8. №. 5. p. 214.
- [4] Messerschmidt S. et al. *The role of self-trapped excitons in polaronic recombination processes in lithium niobate* // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2018. V. 31. №. 6. p. 065701.
- [5] Krampf A., Messerschmidt S., Imlau M. *Superposed picosecond luminescence kinetics in lithium niobate revealed by means of broadband fs-fluorescence upconversion spectroscopy* // *Scientific Reports*. 2020. V. 10. №. 1. p. 11397.

Влияние концентрации ионов на электрооптический отклик нематического жидкого кристалла

Гавриляк Алина Маратовна

Гавриляк Максим Витальевич

Южно-Уральский государственный университет

Подгорнов Федор Валерьевич, к.ф.-м.н.

AlinaIshmurzina1609@gmail.com

Электрооптический отклик жидкокристаллической (ЖК) ячейки играет важную роль в создании оптических устройств, таких как электрооптические модуляторы света, дисплеи и т.д. При создании ЖК-устройств необходимо учитывать параметры, влияющие на пространственно-временную модуляцию света, прошедшего сквозь ЖК-ячейку. Моделирование электрооптического отклика позволяет оптимизировать параметры ЖК-ячейки для увеличения скорости переключения, уменьшения порогового напряжения и т.д. Одним из важных параметров, который необходимо учесть при моделировании, является концентрация ионов в ячейке. Из-за присутствия ионных примесей в объеме жидкого кристалла происходит перераспределение электрического поля внутри ячейки, что приводит к изменению параметров электрооптического отклика. Целью данной работы является моделирование электрооптического отклика нематического жидкого кристалла с учетом наличия примесных ионов.

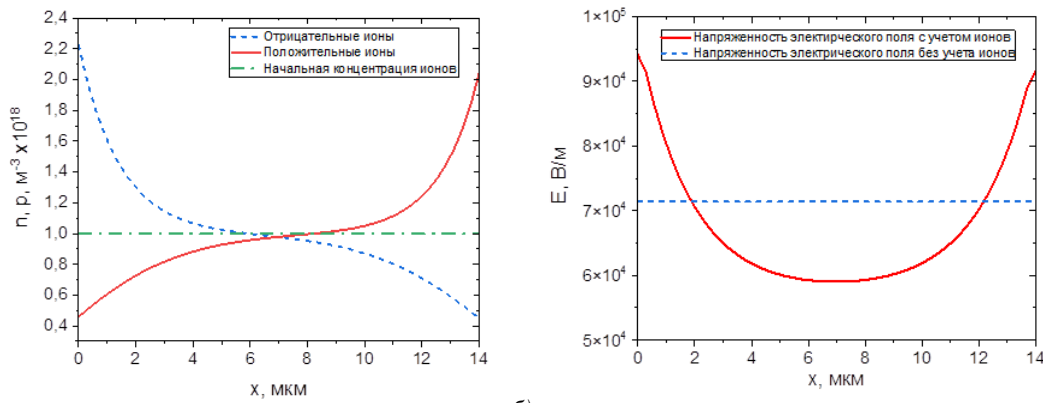
Способность молекул жидких кристаллов переориентироваться под действием внешнего электрического поля дает возможность пространственно-временной модуляции света, прошедшего через ЖК-ячейку посредством изменения его поляризации. Электрооптический отклик света, прошедшего через ЖК-ячейку, рассчитывался по следующей формуле:

$$I = I_0 \left(\sin^2(2\alpha) \sin^2\left(\frac{\Gamma}{2}\right) \right), \quad (1)$$

где I_0 – интенсивность падающего света, α – угол между вектором поляризации падающего луча и исходным направлением директора ЖК, $\Gamma = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta l (n_e(\theta) - n_o)$ фазовый сдвиг (λ – длина волны света, Δl – толщина моделируемого слоя, n_o – показатель преломления света для обыкновенного луча, $n_e(\theta)$ – показатель преломления света для необыкновенного луча, который зависит от угла наклона молекул данного слоя $\theta(z)$. $n_e(\theta)$ рассчитывается по следующей формуле:

$$n_e(\theta) = \frac{n_e n_o}{\sqrt{n_e^2 \cos^2(\theta(z)) + n_o^2 \sin^2(\theta(z))}} \quad (2)$$

Угол наклона молекул жидкого кристалла зависит от распределения электрического поля внутри ячейки. При приложении напряжения к ячейке ионы противоположных знаков смещаются к электродам, тем самым изменяя распределение концентрации разноименных ионов (рис. 1а). Пространственно-разделенные ионы противоположных знаков создают внутреннее электрическое напряжение не равное внешнему приложенному напряжению, тем самым оказывая влияние на динамику переключения молекул жидкого кристалла. Распределение электрического поля внутри ячейки с учетом и без учета ионов представлено на рис. 1б. Гидродинамические эффекты при моделировании во внимание не принимались.



а)

б)

рис.1. а) пространственное распределение концентрации ионов при приложении переменного электрического напряжения; б) пространственное распределение напряженности электрического поля в ЖК-ячейке с учетом и без учета ионов

На рис.2 представлены зависимости нормированной интенсивности света, прошедшего через ЖК-ячейку между двумя скрещенными поляризаторами, полученные в результате моделирования. Из графиков можно заметить, что вид электрооптического отклика зависит от поля внутри ячейки, создаваемого ионами, а также от концентрации. При увеличении концентрации ионов наблюдается исчезновение экстремума в начале цикла и на полупериоде по времени.

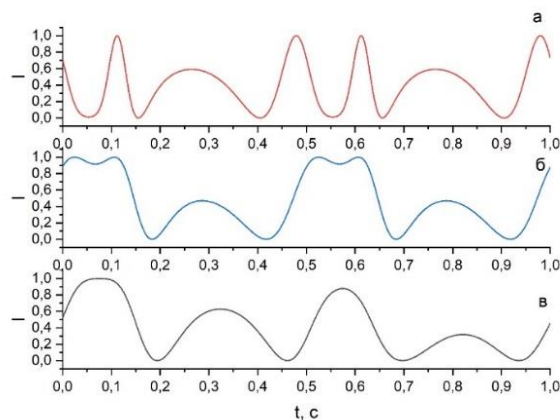


рис. 2. Электрооптический отклик НЖК в планарной ячейке а) для $E(x)=const$ б) с учетом внутреннего поля, создаваемого ионами с концентрацией $n = 10^{16} \text{ м}^{-3}$ в) с концентрацией $n = 10^{18} \text{ м}^{-3}$

Таким образом, было получено, что влияние концентрации ионов приводит к изменению динамики электрического переключения молекул ЖК. Это будет сказываться на форме электрооптического отклика. При моделировании электрооптического отклика жидких кристаллов необходимо учитывать перераспределение электрического поля, создаваемого ионами. Это позволяет оптимизировать параметры ЖК-ячейки с целью улучшения ее характеристик.

Структура и оптические спектры NLO активного кристалла $\text{Ba}_2\text{NO}_3(\text{OH})_3$

Гвоздикова Екатерина Викторовна

Кемеровский государственный университет

Журавлёв Юрий Николаевич, д.ф.-м.н.

ekaterinagvozdikova3@yandex.ru

Разработка и использование нелинейно-оптических кристаллов (NLO) глубокого ультрафиолетового излучения (DUV), являющихся важными материалами для твердотельных лазеров, генерирующих когерентный свет с длиной волны $\lambda=200$ нм посредством каскадного процесса преобразования частоты, оказали значительное влияние на различные области, начиная от фундаментальных научных исследований и заканчивая инженерными приложениями [1]. Одним из таких NLO кристаллов является $\text{Ba}_2\text{NO}_3(\text{OH})_3$, который был синтезирован с помощью модифицированной высокотемпературной твердофазной реакции с использованием $\text{Ba}(\text{OH})_2$ в качестве самотекучего вещества. Кристаллизуется в гексагональную кристаллическую систему с ацентрической пространственной группой симметрии $P\bar{6}2m$ и имеет ширину запрещенной зоны 6.22 эВ. Полученный эффективный коэффициент NLO для $\text{Ba}_2\text{NO}_3(\text{OH})_3$ составляет 1.56 pmV^{-1} [2]. В связи с тем, что экспериментальные исследования его оптических свойств отсутствуют, необходимо выполнить теоретический расчет.

В работе использовался метод компьютерного моделирования с применением теории Хартри – Фока (HF) и теории функционала плотности, который реализован в программном коде CRYSTAL [3]. Для расчетов выбраны наиболее распространённые градиентные и гибридные функционалы: PBE с дисперсионной добавкой D3(BJ), PBESOL0 и непараметрический PBE0, 3-х параметрический B3LYP, который сочетает в себе 20% HF обмен у с обменно-корреляционным функционалом B3. Точность процедуры самосогласования составила 10^{-9} а.е.

В процессе оптимизации геометрии кристалла были получены следующие параметры: постоянные решетки a и c , объем V и расстояния между атомами. В элементарной ячейке содержится один неэквивалентный атом Ba, два неэквивалентных атома O1 и O2 с расстоянием 2.2089 Å, один неэквивалентный атом N и один неэквивалентный атом H. Длина связи N – O1 равна 1.2753 Å, а N – O2 0.985 Å. Расстояния

между атомами катиона Ва – O₁ равно 2.9740 Å и Ва – O₂ 2.7862 Å. Особенностью этих соединений является наличие двух функциональных групп: нитрогруппы NO₃ и гидроксид OH, которые и образуют два слоя. Установлено, что наименьшее среднеквадратичное отклонение результатов расчета от экспериментального значения [2] получено для PBE – D3 функционала и оно составило 3.1%.

Для исследования сложных кристаллических систем широко используется ИК спектроскопия и комбинационное рассеяние (КР) света.

В экспериментальном ИК-спектре Ва₂NO₃(OH)₃ зафиксированы частоты на 619, 1384 и 3568 см⁻¹ [2], которым соответствуют теоретические значения 671.4, 1454.9 и 3769 см⁻¹, полученные с B3LYP функционалом и 637.9, 1402.2, 3663 см⁻¹ с PBE-D3 функционалом. Таким образом теоретические значения получились завышенными относительно экспериментальных. Все активные в ИК и КР спектрах частоты приведены в таблице:

Неприводимые представления $P\bar{6}2m$	ИК		КР	
	B3LYP	PBE-D3	B3LYP	PBE-D3
E''	-	-	67.1	47.0
	-	-	219.3	234.3
	-	-	605.2	582.2
E'	111.9	118.9	111.9	118.9
	134.0	143.2	134.0	143.2
	230.2	241.2	230.2	241.2
	248.6	246.4	248.6	246.4
	671.4	637.9	671.4	637.9
	709.8	688.7	709.8	688.7
	1454.9	1402.2	1454.9	1402.2
	3769.9	3663.0	3769.9	3663.0
A'1	-	-	193.6	191.0
	-	-	1094.6	1058.8
	-	-	3772.3	3666.9
A''2	225.5	218.5	-	-
	385.9	327.3		
	849.8	777.6		

В гидроксиде 3 оптических колебания симметрии E' и A'1. В ИК мода E' имеет частоту 3769.9 см⁻¹ и низкую интенсивность. В КР колебательная мода A'1 с числом 3772.3 см⁻¹, наоборот, является самой интенсивной - 100%, против 33.2% для E'. Именно эта очень большая интенсивность объясняет скудность спектра КР, где выделяется полоса ν1 при 1094.6 см⁻¹ и ν4 при 709.8 см⁻¹.

В ИК самой интенсивной модой является ν3 (1980 км/моль, 100%) и мода симметрии A''2 с волновым числом 385.9 см⁻¹, которая образована z- колебаниями атомов гидроксида с подавляющим вкладом в фоновую плотность от водорода. Мода ν2 той же симметрии имеет несравнимо меньшую интенсивность. Моды симметрии E', которые образуют три другие интенсивные в ИК полосы по мере убывания частоты, относятся к вращению гидроксидной группы, трансляции OH и NO₃ и вклад бария становится определяющим только для волнового числа 134.0 см⁻¹.

Компьютерное моделирование структуры и колебательных спектров соответствует экспериментальным значениям, таким образом, эти методы могут использоваться для дальнейшего изучения свойств этих соединений.

Список публикаций:

[1] Kumar S.C., Elavarasi C., Manikam S., and James, J.G. // *Recent Advances in Infrared Nonlinear Optical Crystal: Crystal Growth and Chirality - Technologies and Applications*. 2023.

[2] Dong X., Huang L., Liu Q., Zeng H., Lin Z., Xu D., and Zou G. // *Chemical Communications*. 2018. v. 54. № 45. P. 5792-5795.

[3] Dovesi R., Erba A., Orlando R., Zicovich-Wilson C. M., Civalleri B., Maschio L., Rerat M., Casassa S., Baima J., Salustro S., Kirtman B. // *WIREs Comput. Mol. Sci*. 2018. V. 8. P. e1360.

Фазообразование и физико-химические свойства твердых растворов многокомпонентных систем на основе BiFeO_3

Глазунова Екатерина Викторовна

Лымарь Дмитрий Вячеславович, Чехова Анастасия Сергеевна

Зорин Денис Игоревич

Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета

Вербенко Илья Александрович

kate93g@mail.ru

В настоящей работе исследуются бесвинцовые композиции на основе широко известных материалов, обладающих уникальными пиро-, пьезо-, электрооптическими коэффициентами и высокими диэлектрическими характеристиками - LiNbO_3 , $\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{TiO}_3$ [1-2], а также самого известного сегнетомагнетика BiFeO_3 , обладающего высокими температурами сегнетоэлектрического и магнитного переходов [3]. Сочетание указанных материалов в одной композиции может привести к формированию новых структур материалов и возникновению в них новых эффектов [4].

Объектами исследования стали твердые растворы (ТР) систем $(1-x)\text{BiFeO}_3-x\text{LiNbO}_3$ и $(1-x)(0.9\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{TiO}_3-0.1\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{NbO}_3)-x\text{BiFeO}_3$ полученные методом двухстадийного твердофазного синтеза и спекания по обычной керамической технологии.

Структура образцов изучена методом порошковой дифракции на дифрактометре ДРОН-3 ($\text{Co K}\alpha$ – излучение). Зависимости диэлектрических характеристик от температуры получали с помощью LCR-метра Agilent E4980A на специально сконструированном в НИИ физики автоматическом стенде с программным комплексом «Kalpro» в интервале температур (25–650) °С и частот 1кГц-1МГц.

По результатам рентгенофазового анализа ТР системы $(1-x)\text{BiFeO}_3-x\text{LiNbO}_3$ было установлено формирование структуры типа пироклора в интервале $0.4 \leq x \leq 0.6$. При других концентрациях компонентов образуются композиты на основе BiFeO_3 , LiNbO_3 , $\text{Bi}_{25}\text{FeO}_{40}$, $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ и пироклора). Применение механоактивации смещает равновесие реакции в сторону формирования пироклорной фазы.

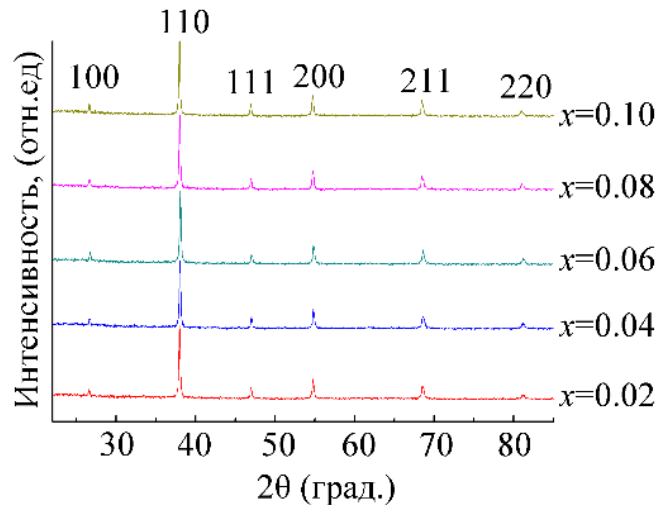


рис.1. Дифрактограммы ТР системы $(1-x)(0.9\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{TiO}_3-0.1\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{NbO}_3)-x\text{BiFeO}_3$

Исследования системы $(1-x)(0.9\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{TiO}_3-0.1\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{NbO}_3)-x\text{BiFeO}_3$ показали, что все ТР имеют кубическую структуру при комнатной температуре (рис.1). На зависимостях диэлектрической проницаемости от температуры наблюдаются широкие размытые по температуре и частоте максимумы, которые могут быть связаны с формированием в материале микро- и нано- областей различного состава из-за упорядочения катионов в А-позиции.

Более детальные обсуждения диэлектрических характеристик и пьезоэлектрических свойств ТР систем $(1-x)\text{BiFeO}_3-x\text{LiNbO}_3$ и $(1-x)(0.9\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{TiO}_3-0.1\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{NbO}_3)-x\text{BiFeO}_3$ будут представлены в докладе.

Выражаем благодарность за помощь в проведении рентгенографического эксперимента н.с. Шилкиной Л.А. и д.ф.м.н. Вербенко И.А. за помощь в обсуждении результатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности. Проект № FENW-2023-0010/Г30110/23-11-ИФ на оборудовании ЦКП НИИ физики ЮФУ)

Список публикаций:

[1] Dai Y-J, et al. // *J. Am Ceram Soc.* 2010. 93. P. 1108–1113.

[2] Sosunov A.V., Volynstev A.B., Tsiberkin K.B., Yuriev V. A. & Ponomarev R.S. // *Ferroelectrics.* 2017. V. 506. № 1. P. 24-31.

[3] Silva J., Reyes A., Esparza H., Camacho H., Fuentes L. // *J. Integr. Ferroelectr.* 2011. 126. P. 47.

[4] Bharadwaj S.R., Varma S., Wani B.N. // *In book: Functional Materials.* 2012. PP.639-674.

Антимикробные нанокompозитные покрытия на основе анодированной алюминиевой проволоки

Гусейнова Айтен Физулиевна

Петрозаводский государственный университет

Кокатев Александр Николаевич, к.т.н.

aytenguseynova@mail.ru

Серебросодержащие нанокompозитные покрытия (НКП) на основе пористых анодных оксидов алюминия (ПАОА) являются перспективным материалом для применения в качестве основы элементов солнечных батарей, люминесцентных (светоизлучающих) устройств, каталитически активных наноматериалов, а также антимикробных поверхностей. Анодирование алюминиевой проволоки перспективно для получения цилиндрических (3D) серебросодержащих НКП, что расширит область практического применения ПАОА. Например, для очистки воздуха и воды от патогенных бактерий, и вирусов, путем простой интеграции проволоки в водопроводы и воздуховоды.

Целью данной работы являлось создание технологии формирования серебросодержащих нанокompозитных покрытий на алюминиевой проволоке. Анодирование образцов алюминиевой проволоки (A7E) проводилось в 15% H_2SO_4 и 3% $C_2H_2O_4$ при $j_a=20$ mA/cm^2 в течение 40 мин. Для ряда образцов полученных в 3% $C_2H_2O_4$, дополнительно проводилось утонение барьерного слоя оксида (ступенчатое уменьшение напряжения анодирования U_a от текущего значения до 1В со скоростью 200 мВ/с) и уширение пор (5% H_3PO_4 , $T=35^\circ C$, 15 мин). Осаждение наночастиц Ag в поры ПАОА проводилось с применением методики фотохимического синтеза (пропитка анодированных образцов в 0.1M $AgNO_3$, 30 мин с последующим облучением УФ, $\lambda=325$ нм, 30 мин) и электрохимического осаждения (поляризация образцов переменным током при напряжении 20 В в течение 15 мин в растворе 1.51 г/л $AgNO_3$ + 45 г/л H_3BO_3).

Изучение морфологии поверхности образцов проводилось методом полуконтактной атомно-силовой микроскопии (АСМ) и цифровой оптической стереомикроскопии. Оценка коррозионной стойкости выполнялась путем выдержки образцов в коррозионной среде 10% NaCl + 1N $CuSO_4$ в течение 30 мин при $T = (18-20)^\circ C$ с последующим определением площади, занятой очагами коррозии. Антимикробная активность покрытий по отношению к воде из природных водоемов тестировалась с использованием бакпечаток HiTouch (серия FL015).

Изучение различных участков поверхности ПАОА методом АСМ показало, что гальваностатическое (ГСР) анодирование алюминиевой проволоки приводит к формированию ПАОА с открытыми неупорядоченными порами диаметром от 9 до 16 нм. На поверхности оксидов, сформированных в 3% $C_2H_2O_4$, присутствует тонкий дефектный слой, который частично закрывает основные поры, что характерно для непродолжительного процесса одноступенчатого ГСР анодирования алюминия в данном электролите. На основании измерения толщины ПАОА отделенных от алюминиевой подложки, установлено, что скорость роста оксида на алюминиевой проволоке при выбранных параметрах процесса составляет 16-17 мкм/ч.

Для получения серебросодержащих НКП применялась методика фотохимического синтеза наночастиц Ag в порах ПАОА. Последующее изучение поверхности модифицированных образцов методом АСМ позволило установить присутствие в межпоровом пространстве ПАОА отдельных наночастиц размером от 40 до 70 нм, предположительно Ag/Ag_2O (рис.1а). Для увеличения количества наночастиц Ag в порах оксида также применялась методика электрохимического осаждения (ЭХО). В ходе работы установлено, что применение ЭХО приводит к окрашиванию образцов в черный цвет. Менее интенсивное и однородное изменение цвета ПАОА наблюдалось для образцов алюминиевой проволоки, анодированных в 3% $C_2H_2O_4$, что может говорить об осаждении меньшего количества серебра в поры оксида. Данный факт можно объяснить большей толщиной барьерного слоя оксида, сформированного в 3% $C_2H_2O_4$. Для уменьшения толщины барьерного слоя оксида применялась методика утонения барьерного слоя и уширения пор. Методом АСМ показано, что уширение пор оксида приводит к частичному удалению дефектного слоя и увеличению среднего диаметра пор до 33 нм. По результатам измерения электрической емкости образцов установлено, что последовательное проведение процедуры утонения барьерного слоя и уширения пор способствует уменьшению толщины барьерного слоя оксида до 14 нм.

ЭХО модификация образцов наночастицами Ag показала, что утонение барьерного слоя и уширение пор приводит к более интенсивному и однородному окрашиванию образцов в черный цвет, что свидетельствует об осаждении большего количества наночастиц в порах оксида. Последующее АСМ изучение ПАОА показало, что применение ЭХО приводит к формированию наночастиц серебра размером от 15 до 30 нм, присутствующих не только в порах, но и в межпоровом пространстве, при этом поры оксида остаются открытыми (рис. 1б).

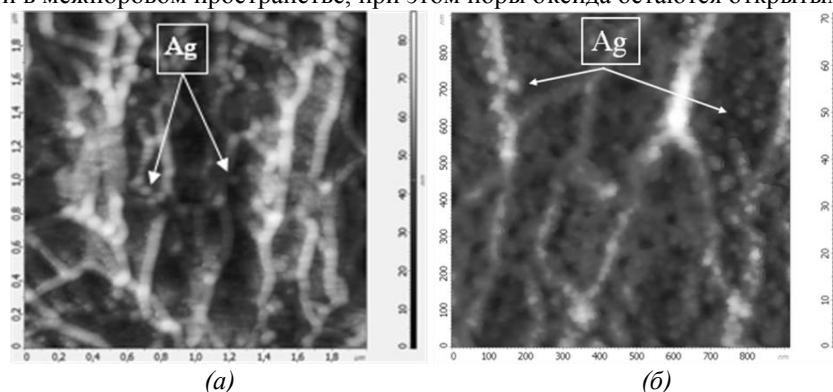


рис. 1. АСМ изображения пористого слоя ПАОА, сформированного в 3% $C_2H_2O_4$: после фотохимического осаждения 2-х слоев Ag – (а); после утонения барьерного слоя, уширения пор и ЭХО модификации Ag – (б).

Таким образом, была разработана технология получения методом ЭХО серебросодержащих нанокompозитных покрытий, которые в дальнейшем были проверены на коррозионную стойкость и антимикробную активность. В ходе испытаний было выявлено, что анодирование повышает коррозионную стойкость химически очищенных образцов, а осаждение серебра в поры ПАОА методом ЭХО не приводит к снижению защитных свойств, а наоборот способствует улучшению коррозионной стойкости разработанных нанокompозитных покрытий. На поверхности данных образцов очагов коррозии не обнаружено. Созданные серебросодержащие нанокompозитные материалы на основе ПАОА обладают высокой антимикробной активностью, определенной по уменьшению общего количества микроорганизмов в 1 м^3 исследуемой воды до 0.2 КОЕ/м^3 , по сравнению с контрольными образцами, содержащими порядка $(3-5)\text{ КОЕ/м}^3$. Такие покрытия могут использоваться в качестве защитных антимикробных поверхностей на различных алюминиевых изделиях и материалов для очистки воды от патогенных микроорганизмов.

Моделирование температурной зависимости коэффициента Холла в системах с сильным электрон-фононным взаимодействием и высокой плотностью носителей заряда

Джантемиров Ауес Хасамбиевич

Мясникова Анна Эдуардовна

Южный федеральный университет

Мясникова Анна Эдуардовна

Dzhantemirov.27@yandex.ru

Более 30 лет изучения высокотемпературных сверхпроводящих купратов и попыток построения теоретических моделей, способных объяснить наблюдаемые в экспериментах эффекты, приводят к заключению, что механизм высокотемпературной сверхпроводимости, вероятнее всего, не может быть объяснен за счет одних только электронных корреляций. С учётом этого интерес представляют модели, учитывающие роль сильного электрон-фононного взаимодействия в механизме сверхпроводимости. В недавней работе была построена фазовая диаграмма систем с сильным дальнедействующим электрон-фононным взаимодействием [1]. На полученной диаграмме существует область с двухжидкостной системой (автолокализованных и делокализованных) носителей заряда. Исходя из этого имеет смысл изучить влияние фазовых переходов в электронной подсистеме на транспортные свойства таких систем. Целью данной работы является моделирование температурной зависимости коэффициента Холла в системах с сильным электрон-фононным взаимодействием и высокой плотностью носителей заряда.

Для моделирования коэффициента Холла использована термодинамическая функция распределения, учитывающая возможность сосуществования автолокализованных и делокализованных состояний носителей заряда [2]. Концентрации носителей заряда в разных состояниях получены вариационным методом в результате минимизации свободной энергии системы с радиусом биполярона в качестве вариационного параметра [1,3]. Широко известно, что число Холла в купратах претерпевает скачкообразный рост с повышением температуры

[4]. При таком росте пропорциональность Холловской плотности носителей уровню допирования p сменяется на пропорциональность $p+1$. В данной работе изучается возможность того, что такой скачок возникает вследствие участия дырок из верхней половины нижней Хаббардовской зоны, причем мера их участия зависит от плотности делокализованных носителей из нижней половины зоны. Для исследования такого предположения из экспериментальных данных выделена доля D дырок из верхней половины зоны, участвующих в проводимости, как функция концентрации n_{deloc} делокализованных носителей. Для выделения функции $D(n_{deloc})$ использованы экспериментальные данные при высоких температурах, при которых, согласно модели, автолокализованных состояний уже нет. Коэффициент Холла в таком случае может быть получен в виде:

$$R_H = \frac{1}{en_{eff}}, n_{eff} = n_l + D(n_{deloc})n_u, \quad (1)$$

где n_l и n_u – концентрации дырок в нижней и верхней половинах нижней Хаббардовской зоны, соответственно.

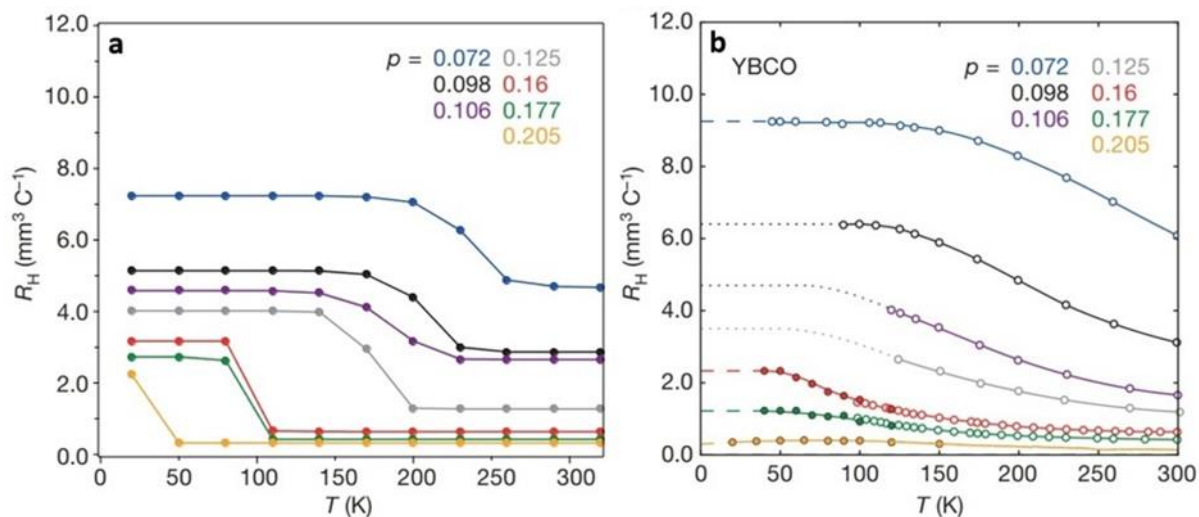


рис. 1. Сравнение результатов моделирования температурной зависимости коэффициента Холла с экспериментальными данными. а) Результаты моделирования. б) Экспериментальные данные, полученные на образцах $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ [4]

На рис. 1 представлены результаты моделирования температурной зависимости коэффициента Холла для разных уровней допирования и экспериментальные данные для образца $YBa_2Cu_3O_{7-x}$. Из сравнения низкотемпературной части графиков можно сделать вывод, что предположение о вовлечении дырок из верхней половины Хаббардовской зоны, степень которого зависит от концентрации делокализованных дырок, дает достаточно хорошее согласие с экспериментальными данными. Вместе с тем метод размазки фазового перехода требует дальнейших исследований, т. к. он приводит к смещению температур фазового перехода. Дело в том, что температура фазового перехода определяется из условия равенства свободной энергии двухжидкостной системы носителей заряда и обычной Ферми-жидкости с тем же уровнем допирования. В таком случае плотность биполяронов изменяется скачкообразно. В то же время обычный характер распада автолокализованных состояний с ростом температуры имеет более плавный характер [2]. Поэтому мы использовали разность свободных энергий двухжидкостной системы и Ферми-жидкости для описания области вблизи фазового перехода. Однако, этот метод требует доработки из-за смещения температуры фазового перехода в результате его применения.

Список публикаций:

- [1] Myasnikova A. E., Doronkina S. V., Arutyunyan R. R., Dzhantemirov A. H // Preprint at <https://arxiv.org/abs/2401.04479> 2024
- [2] Myasnikova A. E., Myasnikov E. N., Moseykin D. V., Zuev I. S. // Phys. Lett. A 2015. 379. 458.
- [3] Myasnikova A. E., Nazdracheva T. F., Lutsenko A. V. Dmitriev A. V. Dzhantemirov A. H. Zhileeva E. A. Moseykin D. V. // J. Phys.: Condens. Matter 2019. 31. 235602.
- [4] Badoux S. et al // Nature 2016. 531. 210.

Изучение механизмов взаимодействия MeOx ($\text{Me}=\text{Cu}, \text{Ni}$) с графеновой плоскостью методом XANES спектроскопии

Дмитриев Виктор Олегович

Згерская Юлия Вячеславовна, Шматко Валентина Анатольевна, Яловега Галина Эдуардовна

Южный федеральный университет

Донской государственной технической университет

Яловега Галина Эдуардовна

vdmित्रiev@sfnu.ru

Композиты на основе оксидов переходных металлов и углеродных наноматериалов могут использоваться в качестве катализаторов, сенсоров, суперконденсаторов. Свойства композитов могут зависеть от взаимодействия атомов металла и углерода. Целью работы было исследование механизмов взаимодействия оксидов переходных металлов (Cu, Ni) с графеновой сеткой в нанокompозитах $\text{MeOx}/\text{МУНТ}$, методом ближней тонкой структуры рентгеновского поглощения. Были проанализированы экспериментальные результаты, построены различные структурные модели нанокompозитов $\text{MeOx}/\text{УНТ}$ ($\text{Me} = \text{Cu}, \text{Ni}$), для которых был выполнен расчёт спектров рентгеновского поглощения XANES (X - ray Absorption Near Edge Structure).

Анализ экспериментальных спектров рентгеновского поглощения за К-краем углерода, никеля и меди композитов $\text{CuOx}/\text{УНТ}$ и $\text{NiOx}/\text{УНТ}$ показал, что локальная структура окружения меди в композите соответствует CuO , а никеля - $\text{Ni}(\text{OH})_2$.

Проведено моделирование возможных механизмов взаимодействия никеля и меди с графеновой сеткой и расчёт спектров рентгеновского поглощения за К-и $L_{2,3}$ -краями меди и никеля. Теоретический анализ спектров XANES проводился с использованием программного комплекса FDMNES в полном потенциале, методом многократного рассеяния. Были построены различные структурные модели взаимодействия атомов меди и никеля, а также кластеров CuO и NiO , с графеновой плоскостью и для них рассчитаны теоретические спектры. Рассмотрены три возможных модели взаимодействия: атомный кластер со структурой NiO и CuO располагался над центром углеродного гексагона, над его вершиной и связью углерод-углерод. На основе согласия экспериментальных и теоретических спектров определены наиболее вероятные пути связывания оксидов никеля и меди с графеновой сеткой.

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда № 23-22-00459 в Южном федеральном университете.

О возможностях возникновения новых мультиферроидных состояний в твердых растворах на основе феррита висмута

Зубрилин Александр Александрович

Глазунова Екатерина Викторовна

Южный федеральный университет

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

czybrilin15@gmail.com

Одной из наиболее интересных групп объектов физики твердого тела являются мультиферроики - среды, сочетающие упорядочения смещений электрических зарядов (сегнетоэлектрическое (СЭ) или антисегнетоэлектрическое (АСЭ)) и локальных намагниченностей в одном материале [1]. Взаимодействие электрических и магнитных полей в таких средах может носить необычный характер [2]. Так, возможно появление взаимосвязи между статическим магнитным состоянием и поляризацией, возникновение гигантских магнитоэлектрического (МЭ) и магнитодиелектрического эффектов. С точки зрения очередности возникновения, упорядоченного по двум параметрам состояния, мультиферроики принято делить на две большие группы: мультиферроики первого рода и второго рода. В мультиферроиках первого рода магнитная и СЭ система возникают независимо друг от друга при различных температурах (как правило, СЭ или АСЭ полярные состояния проявляются при более высокой температуре), и взаимодействие между ними крайне слабо выражено. Наиболее же интересными являются мультиферроики второго рода [2]. В них возникновение магнитного упорядочения предопределяет кристаллизацию СЭ поляризации при дальнейшем снижении температуры, и две подсистемы оказываются тесно связаны друг с другом, что и приводит к возникновению вышеуказанных эффектов. К сожалению, ассортимент сред, устроенных таким образом, крайне ограничен, и практически все они существуют в упорядоченном состоянии при температурах намного ниже комнатной.

Особое место в физике мультиферроиков принадлежит ферриту висмута (BiFeO_3). Этот сложный оксид со структурой типа перовскита обладает рекордными температурами СЭ ($T_c \sim 810^\circ\text{C}$) и антиферромагнитного ($T_N \sim 370^\circ\text{C}$) упорядочений и несмотря на то, что относится к мультиферроикам первого рода, при определенных условиях способен проявлять свойства обусловленные линейной связью поляризации и намагниченности [3]. Причиной указанных эффектов является взаимодействие типа Дзялошинского-Мория, которое проявляется в случаях нарушения симметрии связи Fe-O и возникновения дополнительного вклада несоразмерной магнитной структуры в поляризацию. Такие нарушения могут быть следствием размерного эффекта (тонкие пленки), химического модифицирования, в том числе, с образованием вакансий, воздействия сверхвысоких давлений, магнитных и электрических полей. В ряде случаев возникновение фазы с линейным МЭ эффектом сопровождается структурным фазовым переходом, то есть, как и в случаях классических мультиферроиков второго рода, снижение кристаллической симметрии связано с существованием предшествующей переходу магнитной неоднородности.

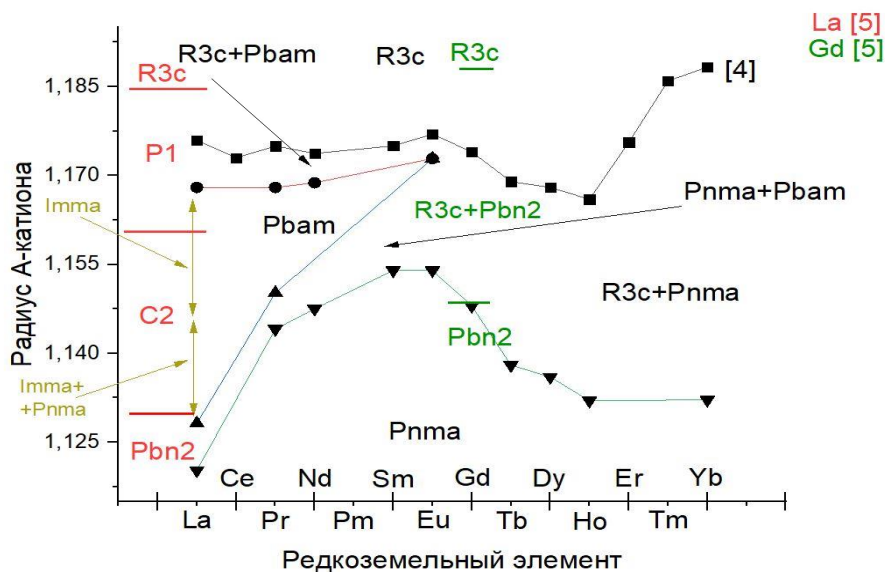


рис.1. Фазовая диаграмма феррита висмута, легированного редкоземельными элементами в координатах: средний радиус А-катиона – редкоземельный элемент

С точки зрения практического материаловедения, наиболее привлекательным является создание сред на основе BiFeO_3 с линейным МЭ эффектом на основе химического модифицирования. Феррит висмута - термодинамически неустойчивое соединение, которое крайне трудно получить в чистом виде путем классического твердофазного синтеза. Одним из путей стабилизации его структуры является введение редкоземельных элементов (РЗЭ).

На рис.1 представлена фазовая диаграмма, иллюстрирующая изменение симметрии твердых растворов на основе BiFeO_3 при введении РЗЭ, построенная по литературным данным [4,5]. Несмотря на существующий разброс в результатах различных авторов относительно концентрационной границы, пространственных групп и образующихся фаз, видно, что при добавлении РЗЭ происходит фазовый переход в низкоразмерную фазу, сопровождающийся изменением магнитной симметрии. Таким образом, известные данные позволяют надеяться, что при тщательном изучении свойств твердых растворов на основе BiFeO_3 с РЗЭ, в том числе, с использованием электрических и магнитных полей, могут быть обнаружены новые состояния с линейным МЭ эффектом, чему и будет посвящен доклад

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности. Проект № FENW-2023-0010/Г30110/23-11-ИФ на оборудовании Центра коллективного пользования «Электромагнитные, электромеханические и тепловые свойства твердых тел» НИИ физики ЮФУ.

Список публикаций:

- [1] Г. А. Смоленский, В. А. Боков, В. А. Исупов, Н. Н. Крайник, Р. А. Крайник, Р. Е. Пасынков, А. И. Соколов, Н. К. Юшин // Физика сегнетоэлектрических явлений — Л.: Наука, 1985. —396с.
- [2] Д. И. Хомский // ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 4, стр. 581–593
- [3] Веневцев Ю.И., Гагулин В.В., Любимов В.Н. // Сегнетомагнетики. М.: Наука. 1982. 223с
- [4] Donna C. Arnold // IEEE transactions on ultrasonics, ferroelectrics, and frequency control, vol. 62, No. 1, January 2015, p.62-82
- [5] Juli'an Andr'es Mun'ev'ar Cagigas, Dalber Sanchez Candela and Elisa Baggio-Saitovitch // International Conference on Magnetism (ICM 2009) IOP Publishing Journal of Physics: Conference Series 200 (2010) 012134

Вычисление сингулярных интегралов по зоне Бриллюэна

Коробко Кирилл Вячеславович

Кемеровский государственный университет

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

kirillir99@mail.ru

В настоящее время в расчётах электронной структуры с использованием теории функционала плотности (ТФП) очень популярными для аппроксимации обменно-корреляционной энергии являются гибридные функционалы. Одним из преимуществ таких функционалов является полное исключение или значительное уменьшение влияния эффекта самодействия, что в совокупности с современными формами обменных и корреляционных ТФП-функционалов, приводит к значительному увеличению точности количественных оценок ряда физических характеристик. Более сложная форма гибридных функционалов приводит к увеличению вычислительных затрат, а так же к повышению требований точности, в особенности для периодических систем, когда основным базисом являются плоские волны. В этом случае выражения для обменной энергии и потенциала принимают форму интеграла по обратному пространству, подынтегральная функция которого имеет существенную особенность, не позволяющую применять стандартные методы интегрирования, такие как метод специальных точек [1,2]. Простым вариантом решения этой проблемы является исключение сингулярности выражения для обменной энергии путём добавления и вычитания вспомогательной функции, имеющей аналогичную особенность, но простое аналитическое представление [3], что позволяет выразить обменную энергию и потенциал в виде регулярного выражения с аддитивной поправкой.

Целью работы является разработка метода вычисления отмеченной выше поправки, который наиболее естественно учитывает характер сингулярности в выражении для обменной энергии и потенциала, а также и оценка его вычислительной эффективности точности.

После преобразований аналогичных работе [4], изолированная особенность выглядит следующим образом:

$$F = \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \int_{(BZ)} f(\mathbf{k}) d\mathbf{k}, \quad (1)$$

где $f(\mathbf{k})$ вспомогательная функция, имеющая особенность типа k^{-2} . Следуя подходу работы [5] интеграл (1) можно разбить на две части $F = F_1 - F_2$, где:

$$F_1 = \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \int_{(BZ)} f(\mathbf{k}) w(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \quad (2)$$

$$F_2 = \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \int_{(BZ)} f(\mathbf{k}) [1 - w(\mathbf{k})] d\mathbf{k} \quad (3)$$

где $w(\mathbf{k})$ сферически симметричная функция $0 \leq w(\mathbf{k}) \leq 1$.

Для численного расчета (2) можно использовать сферическую сетку, узлы и веса которой в простейшем случае являются прямым произведением радиальной и двух угловых сеток одномерных квадратур Гаусса-Чебышева, которые в выбранной системе координат для радиальной части в точности компенсируют особенность типа k^{-2} , а для угловой части, плавный характер $w(\mathbf{k})$ обеспечивает быструю сходимость. При вычислении в выражении (3) можно применять классический метод специальных точек [1,2].

По вышеизложенному методу, для оценки точности и эффективности расчета (1) были проведены расчеты для: простой (SC), гранецентрированной (FCC) и объемно-центрированной (BCC) кубических решеток. Результаты показали, что сходимость результатов порядка 10^{-6} обеспечивается для сеток $10 \times 10 \times 20$, а для схемы $40 \times 40 \times 80$ уже порядка 10^{-13} - 10^{-14} .

Для оценки точности полной схемы вычисления обменной энергии с использованием выражения (1) использовалась модель, предложенная в работе [6]. Выявлено, что регулярный и сингулярный вклады в обменную энергию почти в точности компенсируют погрешности друг друга и на сетках 10^3 обеспечивают точность порядка 10^{-5} а.е. (0.0004 эВ).

Список публикаций:

- [1] Chadi D. J., Cohen M. L. (1973) *Physical Review B*. 8. pp. 5747-5753.
- [2] Monkhorst H. J., Pack J. D. (1976) *Physical Review B*. 13. pp. 5188-5192.
- [3] Gygi F., Baldareshi A. (1986) *Physical Review B*. 34. pp. 4405-4408.
- [4] Carrier P., Rohra S., Görling A. (2007) *Physical Review B*. 75. pp. 205126(1-10).
- [5] Becke, A.D. (1988) *Journal of Chemical Physics*. 88. pp. 2547-2553.
- [6] Holzwarth N. A. W., Xiao Xu (2011) *Physical Review B*. 84. pp. 113102(1-4)

Молекулярно-динамическое моделирование кристалла Pt₂Al

Кочкин Андрей Сергеевич^{1,2}

Теников Кирилл Андреевич¹, Янковская Устина Ильдусовна¹, Мороз Тимофей Андреевич²

²Алтайский государственный университет

¹Алтайский государственный технический университет

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

andre211@mail.ru

В данном исследовании проведён анализ кристаллической структуры соединения Pt₂Al с целью выявления возможности возбуждения уединённых волн в этой структуре. Анализ кристаллической структуры Pt₂Al имеет важное значение для понимания процессов возникновения таких волн в кристаллических материалах.

Следует отметить, что этот сплав остаётся мало изученным, однако его исследование представляет собой значимый интерес для новых перспективных конструкционных и функциональных материалов. Например, он может привлечь внимание исследователей в контексте дискретных бризеров. Исследованию Pt₂Al посвящён ряд работ [1-3].

С применением методов молекулярной динамики проведено исследование процессов формирования уединённых волн в реакции на воздействие различных внешних факторов. Одним из определяющих факторов в передаче энергии в дискретной среде является частота внешнего воздействия. Для более детального анализа использовалась расширенная суперячейка, включающая 192 000 атомов и ориентированная в трех измерениях на основе элементарной ячейки кристалла. Это позволило более глубоко изучить взаимодействие кристалла с окружающей средой, такое как адсорбция газов или химические реакции [4-5]. Начальным этапом работы стало формирование структуры элементарной ячейки кристалла. $a = 4.08 \text{ \AA}$, $b = 5.41 \text{ \AA}$, $c = 7.94 \text{ \AA}$, $\alpha = 90.00^\circ$, $\beta = 90.00^\circ$, $\gamma = 90.00^\circ$, объём = 175.28 \AA^3 . Решётка орторомбическая. Атомные позиции элементов в элементарной ячейке представлены в таблице 1.

Wyckoff позиция	Элемент	x	y	z
4c	Al	3/4	0.811904	0.896902
4c	Pt	3/4	0.45454	0.290559
4c	Pt	3/4	0.341208	0.930861

Таблица 1. Атомные позиции элементарной ячейки [3]

В рамках программы LAMMPS [6] проводилось изменение параметров кристаллической решетки для исследования запрещенной зоны в фоновом спектре материала. Для визуализации структуры кристалла была применена программа OVITO [7], предоставляющая возможность анализа как общей структуры кристалла, так и его отдельных плоскостей. Например, с использованием OVITO можно визуально выделять определенные плоскости кристаллической решетки, включая плоскость, на которой располагается дискретный дефект, для выявления динамики колебаний внутри кристалла. Было изучено распространение уединённых волн. Эти исследования способствуют более глубокому пониманию влияния различных частот и амплитуд внешних воздействий на свойства и поведение материала Pt₂Al. Кроме того, изучались оптимальные условия для формирования дискретных бризеров и уединённых волн в этом соединении. Полученные результаты могут послужить основой для разработки инновационных методов контроля свойств материалов, открывая новые возможности в области технологий и научных исследований.

Список публикаций:

[1] M. Sauer, A. Engel, and H. Lueken // *Journal of Alloys and Compounds*. 1992. V. 183. P. 281–287.

[2] Chattopadhyay T.K and Schubert K. // *Journal of the Less-Common Metals*. 1975. V. 41. P. 19–32.

[3] Ricci, F., Chen, W., Aydemir, U., Snyder, G. J., Rignanese, G.-M., Jain, A., & Hautier, G. // *Scientific Data*. 2017. V. 4. p.170085.

[4] Чередниченко А. И., Захаров П. В., Старостенков М. Д., Сысоева М. О., Ерёмин А. М. // *Компьютерные исследования и моделирование*. 2019. Т. 11. № 1. С. 109–117.

[5] Ndjomatchoua F. T., Tchawoua C., Kakmeni F. M. M., Le Ru B. P., Tonnang H. E. Z. // *Chaos*. 2016. V. 26, No. 5. P. 053111.

[6] LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. URL: <https://lammps.org/>.

[7] Information about Ovito. Simulation visualization. URL: <https://www.ovito.org/>

Влияние примеси оксида циркония на процессы спекания на примере твёрдых растворов титаната-цирконата бария

Максименкова Мария Андреевна

Королькова Анастасия Сергеевна, Волков Дмитрий Вячеславович

Южный федеральный университет

Волков Дмитрий Вячеславович

dvvolkov@sfedu.ru

Эффекты модифицирования поликристаллических материалов могут оказывать критическое влияние на свойства исходных соединений как за счёт изменения их структуры, так и в результате трансформации диэлектрических свойств межкристаллитных прослоек. Доли модификаторов, необходимые для проявления новых макрооткликов и изменения ранее наблюдаемых, оказываются относительно малы и часто сопоставимы с процентным содержанием примесей, содержащихся в исходном сырье или возникающих как побочный продукт в процессах синтеза и спекания. Одним из важных технологических этапов в производстве поликристаллических керамических материалов является механоактивация. Механоактивацией называют процесс, при котором вследствие механического воздействия, как правило, в среде поверхностно-активных веществ, повышается поверхностная потенциальная энергия и возникает поле деформационных напряжений. Повышенная потенциальная энергия материала проявляется в увеличении удельной поверхности реакции, формировании вакансий и дислокаций, увеличении границ зёрен. Также она может приводить к формированию метастабильных фаз с более высокой энергией, появлению более высоких степеней окисления, изменению длин, углов и энергий связей и повышению уровня энергии электронов [1]. Для механоактивации синтезированный порошок или иное исходное сырье в виде порошка, загружают в стальные барабаны с внутренним керамическим покрытием и измельчительными шарами из ZrO_2 . При длительной работе мельницы образуется естественный намол от измельчительных шаров, который может, как способствовать образованию целевых продуктов реакции, так и привести к образованию новых примесных фаз.

В данной работе в качестве объекта исследования были выбраны твёрдые растворы (ТР) $BaTi_{0.95}Zr_{0.05}O_3$, которые перед спеканием были подвергнуты механоактивации с разными интервалами времени (10-40) минут. Для образования структуры перовскита в ТР $Ba(Ti, Zr)O_3$ требуются высокие температуры спекания, вплоть до 1900 К [2, 3]. Процедура механоактивации может помочь снизить итоговую температуру спекания, повысить плотность керамики, но при этом увеличить мольную долю Zr^{4+} , тем самым изменить параметры структуры, микроструктуры и диэлектрические отклики. Таким образом целью работы стало установление влияния примеси оксида циркония на структурные и микроструктурные характеристики, а также макроотклики, проявляемые в ТР $BaTi_{0.95}Zr_{0.05}O_3$.

ТР $BaTi_{0.95}Zr_{0.05}O_3$ получали методом двухстадийного твердофазного синтеза, при подборе оптимальных температур T и времени τ . Выбор оптимальных режимов изготовления проводился на серии экспериментальных образцов с постадийным контролем фазового состава при помощи рентгеновской дифракции. Спекание проводили по обычной керамической технологии. В качестве исходного сырья использовали: $BaCO_3$ (ОСЧ), ZrO_2 (Ч), TiO_2 (Ч). Рентгенографические исследования проводились с использованием дифрактометра ДРОН-3, на длине волны излучения $Co_{K\alpha}$ (схема фокусировки по Брэггу - Brentano). Съёмка осуществлялась при комнатной температуре. Фотографии микроструктуры образцов получали при помощи растрового электронного микроскопа JSM-6390L с системой микроанализаторов фирмы Oxford Instruments. Исследование диэлектрических характеристик проведено в интервале температур (300...500) К с использованием заливного азотного криостата и диапазоне частот ($10^2...10^6$) Гц с помощью прецизионного измерителя Agilent E4980A.

В работе получены данные о структурных параметрах, относительной плотности и температурах фазового перехода, которые имеют нелинейную зависимость от времени релаксации. Обсуждаются причины наблюдаемых эффектов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности. Проект № FENW-2023-0010/ГЗ0110/23-11-ИФ). Использовано оборудование Центра коллективного пользования НИИ физики Южного федерального университета "Электромагнитные, электромеханические и тепловые свойства твердых тел".

Список публикаций:

- [1] Полубояров В.А., Андрюшкова О.В., Паули И.А., Коротаева З.А. Влияние механических воздействий на физикохимические процессы в твердых телах: моногр. // Новосибирск: Изд-во НГУ. 2011. С.604.
- [2] Maiti T., Guo R., Bhalla A.S., Evaluation of Experimental Resume of $BaZr_xTi_{1-x}O_3$ with Perspective to Ferroelectric Relaxor Family: An Overview // *Ferroelectrics*. 2011. V. 425. P. 4-26.
- [3] Petzelt J., Bovtun V., Nuzhnyy D., Kempa M., Savinov M., Paściak M., Kamba S., Canu G., Buscaglia V. Broadband Dielectric, Terahertz, and Infrared Spectroscopy of $BaTiO_3$ - $BaZrO_3$ Solid Solution: From Proper Ferroelectric over Diffuse and Relaxor Ferroelectrics and Dipolar Glass to Normal Dielectric // *Physica Status Solidi B*. 2021. V. 258, P. 2100259 (1-15).

Диэлектрические и пьезоэлектрические свойства высокотемпературных сегнетоэлектрических твердых растворов системы $(1-x)\text{BiScO}_3-x\text{PbTiO}_3$

Мартыненко Александр Александрович

Глазунова Екатерина Викторовна

Южный федеральный университет

Павелко Алексей Александрович

alekmar@sfedu.ru

Высокотемпературная (ВТ) пьезоэлектрическая керамика широко используется при контроле исправности конструкций, неразрушающем контроле газотурбинных двигателей нового поколения, электронном впрыске топлива для двигателей внутреннего сгорания и т. д. [1,2]. В настоящее время наиболее широко применяемыми ВТ-пьезоэлектриками являются керамические твердые растворы на основе системы PbZrTiO_3 (PZT), обладающие высокой температурой Кюри ($T_C \approx 360^\circ\text{C}$) и пьезоэлектрическим модулем ($d_{33} \approx 350$ пКл/Н) вблизи морфотропной фазовой границы (МФГ), разделяющей тетрагональную и ромбоэдрическую фазы. Максимальные рабочие температуры керамики серии PZT ниже 230°C , что ограничивает их применение в устройствах, подверженных влиянию более высоких температур [3,4]. В 2001 году Эйтель и др. открыл пьезоэлектрическую керамику $\text{BiScO}_3\text{-PbTiO}_3$ на основе эмпирической зависимости между геометрическим фактором устойчивости (толеранс-коэффициентом, t) и температурой Кюри [5]. Соединение BiScO_3 ($t = 0,91$) относится к группе перовскитовых соединений, при комнатной температуре обладает спонтанно-поляризованным состоянием с антисегнетоэлектрическим упорядочением, однако может быть синтезировано только при высоких давлениях (6 ГПа) [6]. Титанат свинца PbTiO_3 ($t = 1,06$) представляет собой сегнетоэлектрическую структуру перовскита с тетрагональной фазой, высокой температурой Кюри (490°C) и кристаллической структурой $R4mm$. Из-за большой анизотропии элементарной ячейки синтез данного соединения также затруднен, а спеченная керамика склонна к саморазрушению [7]. Однако твердые растворы с участием этих соединений в некотором диапазоне концентраций компонентов могут быть синтезированы по обычной керамической технологии, методом твердофазного синтеза без приложения давления, обладая при этом выдающимися электрофизическими свойствами. Было установлено, что МФГ в данной системе твердых растворов находится в окрестности $x = 0.64$, при которой наблюдается переход из ромбоэдрической в тетрагональную фазу [8]. Данная работа является частью исследования, направленного на разработку ВТ пьезоэлектрических материалов на основе бинарной системы твердых растворов $(1-x)\text{BiScO}_3-x\text{PbTiO}_3$.

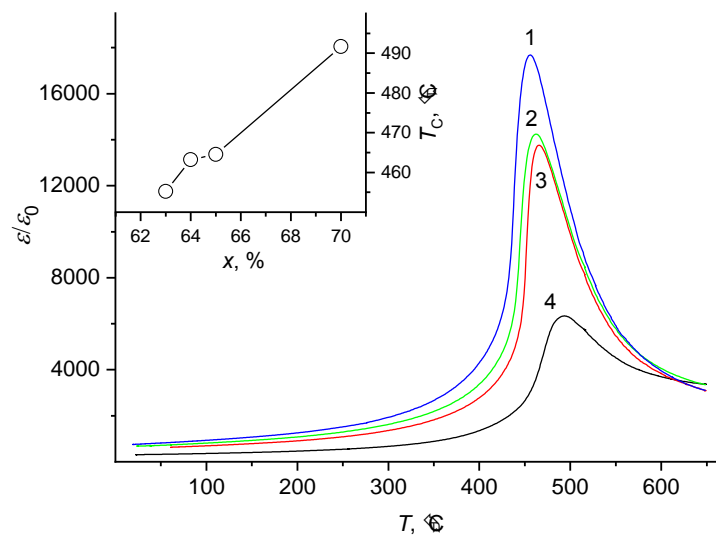


рис.1. Зависимость диэлектрической проницаемости ϵ/ϵ_0 образцов твердых растворов системы $(1-x)\text{BiScO}_3-x\text{PbTiO}_3$ от температуры с $x = 0,63$ (1), $0,64$ (2), $0,65$ (3), $0,7$ (4). На вставке показана зависимость температуры Кюри (T_C) полученных образцов от концентрации титаната свинца x .

В работе рассматриваются вопросы получения и комплексного исследования кристаллической структуры, зеренного строения, диэлектрических и пьезоэлектрических свойств керамических образцов твердых растворов системы $(1-x)\text{BiScO}_3-x\text{PbTiO}_3$ с $x = 60 \dots 70\%$.

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).

Список публикаций:

- [1] Darnjanovic D. // *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* 1998. V.3. P.469–73.
[2] James F., Tressler S.A., Newnham R.E. // *J Electroceram.* 1998. P.257–72.
[3] Andryushina I. N., Reznichenko L. A., Alyoshin V. A. et al. // *Ceramics International.* 2013. Vol. 39. No. 1. P. 753-761.
[4] Dong Y., Zhou Z., Liang R., Dong X. // *J Am Ceram Soc.* 2022. V.105. P. 1558–67.
[5] Eitel R.E., Randall C.A., Shrout T.R. et.al. // *Jpn J Appl Phys.* 2001. V.40. P.5999–6002.
[6] Belik A.A., Iikubo S., Kodama K., et al. // *J Am Chem Soc.* 2006. V.128. P. 706–7.
[7] Belik A.A., Azuma M., Saito T., et.al. // *Chem Mater.* 2005. V. 17. P. 269–73.
[8] Eitel R.E., Randall C.A., Shrout T.R., Papk S-E. // *Jpn J Appl Phys.* 2002. V. 41. P. 2099–104.

Магнитоёмкость в твёрдых растворах $(1-x)(\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5})\text{NbO}_3-x\text{BiFeO}_3$ при 77 К

Мойса Максим Олегович

Андрюшин Константин Петрович

Южный федеральный университет

Резниченко Лариса Андреевна

moysa@sfedu.ru

Современному этапу развития материаловедения в области электронной техники свойственно проявление трёх качеств: интеллектуализация, экологизация, мультифункциональность. При этом интеллектуальность материалов рассматривается как самодиагностика, противодействие внешним факторам и адаптация к ним. И в наибольшей мере этому определению отвечают сегнетопъезоэлектрики, способные преобразовывать механическую энергию в электрическую и наоборот. Однако, требования экологической безопасности промышленных производств мотивируют исследователей к поиску альтернативных путей создания нетоксичных бессвинцовых композиций. Система ниобатов натрия – калия (KNN) единственная, не содержащая свинец система со структурой типа перовскита, обладающая высокой температурой Кюри и близкими по величине к незаменимой в мировой практике системе цирконата – титаната свинца пьезоэлектрическими свойствами. Начиная с 2005 г. число публикаций, посвящённых KNN, фактически превысило количество работ по всем остальным бессвинцовым пьезоактивным средам [1]. Также необходимо отметить, что возможности создания новых, экологически чистых сегнетопъезоматериалов, исчерпаны из-за практически полного использования существующих химических основ и способов их получения. Это породило стремление к совмещению в одной химической композиции нескольких разнородных функций. В связи с чем взоры многих исследовательских групп были обращены к ферриту висмута, BiFeO_3 (BFO), – единственному однофазному мультиферроидному материалу, одновременно обладающему при комнатной температуре магнитным и сегнетоэлектрическим упорядочениями. Это сделало BFO объектом пристального внимания исследователей, исследовавших этот мультиферроик в различных технологических стратегиях, включая фазовую и доменную инженерии [2], легирование [3] и конструирование систем твёрдых растворов (ТР) [4]. Среди последних, в силу вышесказанного, наибольший интерес вызывает тройная система ТР KNN – BFO и композиции с её участием. В работе [5] нами были синтезированы ТР системы $(1-x)(\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5})\text{NbO}_3-x\text{BiFeO}_3$, найдены оптимальные условия приготовления и построена фазовая диаграмма системы. Настоящая работа посвящена установлению закономерностей формирования магнитоёмкости ТР системы $(1-x)(\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5})\text{NbO}_3-x\text{BiFeO}_3$ при 77 К и 300 К.

В качестве объектов исследования выступили ТР составов $(1-x)(\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5})\text{NbO}_3-x\text{BiFeO}_3$ $x = 0.85..0.95$. Образцы получены твердофазным синтезом в две стадии и спечены по обычной керамической технологии ($T_{\text{синт.1}} = 1123$ К, $\tau = 4$ ч., $T_{\text{синт.2}} = 1123$ К, $\tau = 4$ ч.; $T_{\text{спек.}} = 1223$ К).

Исследование зависимости ёмкости от частоты измерительного переменного электрического поля $f = (25...10^6)$ Гц при постоянном магнитном поле 0.85 Тл проводилось на неполяризованных образцах с помощью измерительного стенда на базе LCR-метра Agilent 4980A. Оценка магнитоёмкости производилась по формуле

$$MD(B) = \frac{C(B) - C(0)}{C(0)} \cdot 100\%, \quad (1)$$

где $C(B)$ и $C(0)$ - ёмкости, измеренные в переменном электрическом поле с круговой частотой $\omega = 2\pi f$ и напряжённостью E в присутствии, $C(B)$, и в отсутствии, $C(0)$, постоянного магнитного поля.

Была исследована ёмкость ТР системы $(1-x)(\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5})\text{NbO}_3-x\text{BiFeO}_3$ с $x = 0.85...0.95$ в магнитном поле 0.85 Тл при температурах 77 К и 300 К. Установлено, что в указанных ТР ёмкость под воздействием магнитного поля изменяется в пределах погрешности при исследуемых температурах, исключением является лишь ТР состава $0.10(\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5})\text{NbO}_3-0.90\text{BiFeO}_3$ при 77 К. В данном случае при частоте 1 kHz $MD = 0.124\%$.

Данное значение магнитоэлектрического коэффициента может быть обусловлено комбинацией магнитоэлектричности и поляризации Максвелла-Вагнера [6], присутствующих в данном объекте.

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).

Список публикаций:

- [1] Wu J. // *Journal of Applied Physics*. 2020. V. 127. Art. numb. 190901.
- [2] Liu Y. et al. // *Progress in Materials Science*. 2022. V.127. Art. numb. 100943
- [3] Zheng T., Wu JG. // *J Mater Chem C*. 2015. V.3. №15. p.3684–3693.
- [4] Bhattacharjee S., Pandey D. // *J Appl Phys*. 2011. V.110. №8. Art. numb. 084105
- [5] Moysa M.O. et al. // *Springer Proceedings in Materials*. 2024. V.41. p. 78–84
- [6] Catalan G. // *Appl. Phys. Lett*. 2006. V.88. Art. numb 102902

Изучение оптического спектра поглощения полидифениленфталаида допированного углеродными наноматериалами

Мукминова Регина Рустамовна

Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы

Каримов Рамис Хамитович

mukminova.regina.01@mail.ru

Применение органических материалов в электронике становится обычным явлением. Область их применения достаточно широкая. Это светодиоды, сенсоры, фотовольтаика и др. Расширяется спектр материалов, используемых для получения указанных устройств. Перспективным материалом, обладающий интересными свойствами, является полимер из класса полигетероариленов – полидифениленфталаид (ПДФ) [1]. Данный полимерный материал обладает устойчивостью к агрессивной среде, высоким температурам и позволяет получать тонкие пленки толщиной до 5 нм. Несмотря на довольно большой перечень эффектов, обнаруженных на данном материале, он относится к диэлектрикам с шириной запрещенной зоны в ~4 эВ. Высокая электропроводность в данном материале индуцируется внешними воздействиями либо допированием.

Целью настоящей работы является изучение вклада графена RG-S1 [2] на оптические свойства ПДФ. В рамках данной работы был выбран метод, основанный на изучении спектров ультрафиолетового поглощения, а также метод Тауца [3] для оценки ширины запрещенной зоны полученного композита.

Методика изготовления тонких пленок осуществлялась в несколько этапов. На первом этапе осуществлялась подготовка растворов полимера и графена. Для равномерного распределения графена в растворе ПДФ, последовательно смесь перемешивалась с помощью магнитной мешалки и в ультразвуковой ванне. На втором этапе проводилась очистка подложек (кварцевого стекла). Предварительно очистку проводили в ультразвуковой ванне в воде и этиловом спирте. Далее очистка проводилась в плазме. На третьем этапе осуществлялось нанесение полимера на поверхность кварцевой подложки. Пленки композита были изготовлены методом центрифугирования. Толщина полимерных пленок чистого ПДФ составляла ~350 нм., допированного графеном ~160 нм.

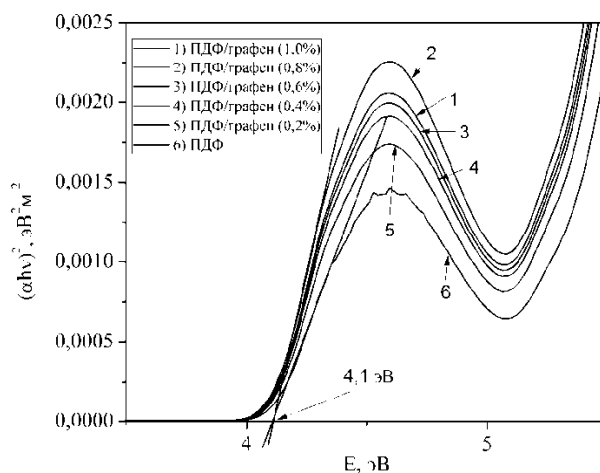


рис.1. Зависимость интенсивности поглощения образцов от энергии падающего излучения.

Спектры поглощения были измерены на спектрофотометре Shimadzu UV – 1800. Полученные спектры, перестроенные в координатах Тауца, представлены на Рисунке 1. Предварительно спектры нормировали по толщине пленки.

По краю оптического поглощения в рамках метода Тауца, была проведена оценка оптической ширины запрещенной зоны, значение которой составило $\sim 4,1$ эВ для всех экспериментальных образцов. Данный результат позволяет сделать вывод, что допирование ПДФ графеном не оказывает влияние на электронные свойства полученного композита. С ростом концентрации графена в пленке ПДФ, коэффициент поглощения увеличивается. Таким образом, наблюдаемое увеличение оптического поглощения и электропроводности в пленках ПДФ с ростом концентрации графена определяется оптическими свойствами графена и его высокой электропроводностью.

Список публикаций:

- [1] Лачинов А. Н., Воробьева Н. В. // УФН. 2006. Т. 176 № 12. С. 1249–1266.
 [2] Графеновый порошок RG-S1. URL: <https://www.rusgraphene.ru/product-page/graphene-powder>
 [3] Tauc J., Grigorovici R., Vanclu A. // Phys. Status Solidi. 1966. V. 15. P. 627.

Исследование электрофизических свойств и электронной структуры композитных материалов на основе полианилина

Недоедкова Ольга Вадимовна¹

Мазка Никита Сергеевич²

¹*Южный федеральный университет*

²*ООО «Артемиды», г. Ростов-на-Дону*

Яловега Галина Эдуардовна¹

nedoedkova@sfedu.ru

Одними из перспективных и активно синтезируемых в последнее время материалов для суперконденсаторов являются композитные системы на основе полианилина (PANI) [1] и оксида графена (GO) [2], обладающие высокой электронной проводимостью. Исследование таких многокомпонентных систем является необходимой задачей для усовершенствования и разработки новых методик синтеза и новых композитных материалов, которые обладали бы улучшенными свойствами, для дальнейшего использования в электронных устройствах.

В данной работе методом Холла изучены электрофизические характеристики композитных материалов на основе полианилина (PANI), оксида графена (GO) и марганца. Было проведено сравнение этих характеристик, например, удельной проводимости, композитных систем состава GO-PANI и GO-PANI-Mn с мономатериалами GO и PANI. Показано, что электрическая проводимость композитов значительно выше, чем мономатериалов и обусловлена подвижностью носителей заряда.

Эти результаты подтверждаются и спектрофотометрией: по данным УФ-видимых спектров поглощения были построены графики Тауца, и показано, что ширина оптической запрещенной зоны (E_g) композита GO-PANI увеличивается при добавлении металла, но уменьшается по сравнению с PANI (рис. 1). Уменьшение E_g обусловлено появлением новых уровней энергии возбуждения, вследствие переноса заряда с GO на PANI. Добавление марганца увеличивает запрещенную зону образца GO-PANI-Mn предположительно, вследствие упорядочения структуры.

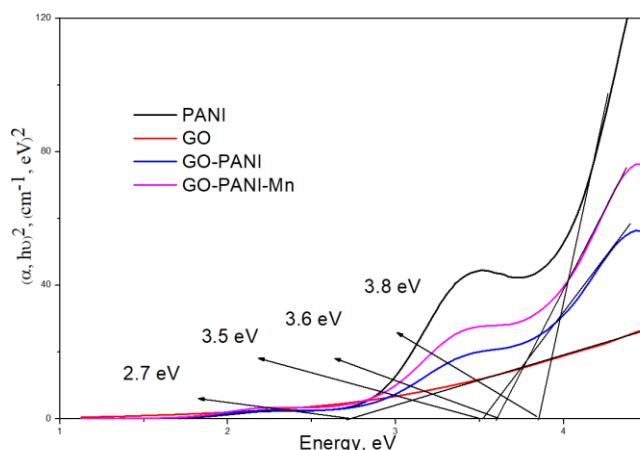


рис.1. Графики Тауца: оптическая ширина запрещенной зоны (E_g) PANI, GO, GO-PANI, GO-PANI-Mn

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда №23-22-00459 в Южном федеральном университете.

Авторы выражают благодарность Мясоедовой Т.Н. за предоставление образцов для исследования и проведение холловских измерений.

Список публикаций:

[1] Beygisangchin M, Abdul R. S, Shafie S, Sadrolhosseini A. R., Lim H. N. *Thin Films - A Review. Polymers (Basel)*. 2021. V. 13, iss. 12. P. 2003.

[2] Muschi M., Serre C. *Coordin. Chem. Rev.* 2019. V. 387. P. 262-272.

Влияние условий синтеза и термических обработок на свойства соединений $\text{Fe}_{0.25}\text{TaCh}_2$ ($\text{Ch} = \text{S}, \text{Se}$)

Носова Наталья Максимовна

Селезнева Надежда Владимировна, Баранов Николай Викторович

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

Баранов Николай Викторович, д.ф.-м.н.

toporova.natalia@urfu.ru

Настоящая работа посвящена исследованию кристаллической структуры и физических свойств соединений $\text{Fe}_{0.25}\text{TaCh}_2$ ($\text{Ch} = \text{S}, \text{Se}$), прошедших различную термообработку. Анализ данных, опубликованных разными авторами, показывает, что существует большой разброс значений магнитных характеристик этих соединений [1,2], однако причины расхождения значений температуры Кюри T_C в системе Fe_xTaS_2 при $0.25 \leq x < 0.29$ (от 70 до 160 К [3, 4]) и значений коэрцитивной силы H_C кристаллов $\text{Fe}_{0.25}\text{TaS}_2$ (от 27 кЭ до 70 кЭ [1]) пока не выяснены. Можно предположить, что магнитные свойства соединений Fe_xTaS_2 с $x \sim 0.25$ существенно зависят, не только от концентрации атомов Fe [1, 2], но и от способа синтеза и термообработки образцов. В связи с этим, в данной работе методом твердофазных реакций при температуре синтеза $T = 700$ °С при использовании разных термообработок были синтезированы поликристаллические образцы соединений $\text{Fe}_{0.25}\text{TaS}_2$ и $\text{Fe}_{0.25}\text{TaSe}_2$, которые были подвергнуты охлаждению при разных условиях: Q-образцы закаливались в ледяной воде сразу от температуры 700 °С; SC-образцы после нагрева до конечной температуры ($T = 700$ °С) медленно охлаждались со скоростью печи.

Аттестация полученных образцов осуществлялась на дифрактометре Bruker D8 Advance. Магнитные свойства исследовались с помощью СКВИД-магнитометра MPMS (Quantum Design) в температурном интервале 2 – 300 К, а также с помощью вибромагнетометра Lake Shore VSM 7407 в температурном интервале 300 – 1000 К. Электросопротивление полученных соединений измерялось стандартным четырёхзондовым методом на поликристаллических спеченных образцах в интервале температур 5 – 300 К.

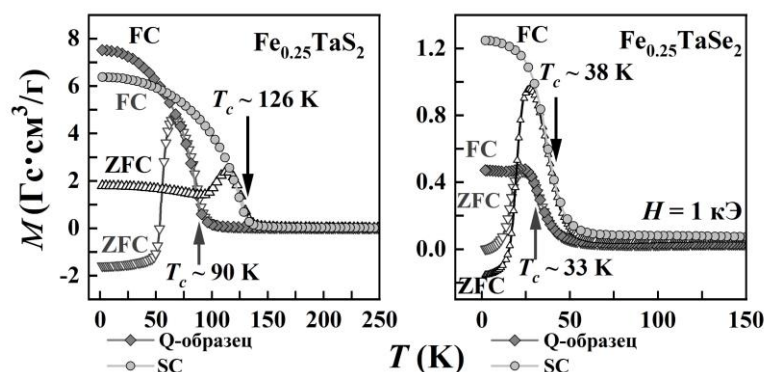


рис.1 Температурные зависимости намагниченности, измеренные при $H = 1$ кЭ на образцах SC-, Q- $\text{Fe}_{0.25}\text{TaCh}_2$. Стрелкой указаны значения T_C , которые были определены по положению минимума на температурных зависимостях производной dM/dT

Установлено, что различные способы приготовления и термообработки не оказывают сильного влияния на параметры элементарной ячейки основной фазы в образцах и фазовый состав образцов. Несмотря на это, образцы, прошедшие различную термообработку, демонстрируют отличные друг от друга значения магнитной критической температуры (рис.1) и значения коэрцитивной силы. Показано, что у закаленного образца существенно сниженное значение T_C по сравнению с медленно охлажденным образцом. Предполагается, что такое различие в значениях T_C может быть связано с частичным перемешиванием атомов тантала и железа при

быстрой закалке, что приводит к размещению атомов железа как в слое тантала в тригонально-призматическом окружении, так и между *Ch-Ta-Ch* сэндвичами в октаэдрическом окружении, где атомы Fe обладают низко-спиновым и высоко-спиновым состоянием, соответственно. Обнаружено, что условия термообработки и охлаждения образцов $\text{Fe}_{0.25}\text{TaCh}_2$ также влияют и на кинетические свойства соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-13-00158).

Список публикаций:

- [1] Choi Y. J. // *Europhysics Letters*. 2009. V. 86. P. 37012.
- [2] Hardy W. J. // *Phys. Rev. B*. 2015. V. 91. P. 054426.
- [3] Kim C. M. // *J. Korean Phys. Soc.* 2012. V. 60. P. 79–82.
- [4] Morosan E. // *Phys. Rev. B*. 2007. V. 75. P. 104401.

Исследование высокоэнтропийных редкоземельных ортоферритов методом мессбауэровской спектроскопии

Пикунь Анастасия Денисовна¹

Тер-Оганесян Никита Валерьевич¹

Jian Zhuang²

¹*Южный федеральный университет*

²*Xi'an Jiaotong University Xi'an 710049, China*

Кубрин Станислав Петрович, д.ф.-м.н.

nasta.pikul.34@gmail.com

Получение стабильных однофазных соединений путём увеличения энтропии за счёт использования большого числа катионов, как правило 4 или 5, стало важной исследовательской задачей в последние годы [1,2]. Высокоэнтропийные сплавы и оксиды со структурой перовскита демонстрируют улучшенные свойства, среди которых сегнетоэлектрические, релаксорные и магнитные свойства, а также ионная проводимость. Синтезированное соединение $(\text{La}_{0.2}\text{Nd}_{0.2}\text{Sm}_{0.2}\text{Dy}_{0.2}\text{Gd}_{0.2})\text{FeO}_3$ обладает пятью различными катионами в составе А-подрешетки и является высокоэнтропийным оксидом редкоземельных ортоферритов (REFeO_3).

После синтеза порошки образцов $(\text{La}_{0.2}\text{Nd}_{0.2}\text{Sm}_{0.2}\text{Dy}_{0.2}\text{Gd}_{0.2})\text{FeO}_3$ были перетёрты, спрессованы и спечены в интервале температур от 1250 °С до 1500 °С. С помощью спектрометра MS1104Em было проведено мессбауэровское исследование образцов $(\text{La}_{0.2}\text{Nd}_{0.2}\text{Sm}_{0.2}\text{Dy}_{0.2}\text{Gd}_{0.2})\text{FeO}_3$, источником γ -квантов служил ^{57}Co в матрице родия.

В результате модельной расшифровки мессбауэровских спектров образцов $(\text{La}_{0.2}\text{Nd}_{0.2}\text{Sm}_{0.2}\text{Dy}_{0.2}\text{Gd}_{0.2})\text{FeO}_3$ выяснилось, что они включают в себя два секстета. Для спектров всех образцов изомерные сдвиги секстетов составляют $\delta = 0.370 \pm 0.002$ мм/с в сравнении с металлическим α -Fe. Секстеты обладают значениями сверхтонких магнитных полей H в интервалах 503 ± 2 кЭ и 510 ± 2 кЭ, а также имеют квадрупольные смещения ε , отличающиеся по знаку и значениям. Секстет с меньшим значением H обладает отрицательным значением $\varepsilon_1 \approx -0.005 \pm 0.002$ мм/с, а секстет с большим значением H положительным значением $\varepsilon_2 \approx 0.006 \pm 0.002$ мм/с. Знак ε зависит от ориентации вектора градиента электрического и магнитного полей. Полученные в результате расшифровки мессбауэровских спектров значения сверхтонких параметров могут свидетельствовать о том, что, благодаря высокой энтропии в А-подрешетке, в исследуемой системе $(\text{La}_{0.2}\text{Nd}_{0.2}\text{Sm}_{0.2}\text{Dy}_{0.2}\text{Gd}_{0.2})\text{FeO}_3$ ионами Fe^{3+} формируются две магнитные подсистемы с отличающимися ориентациями магнитных моментов. Поскольку температуры синтеза коррелируют с площадями секстетов, то при понижении температур синтеза площади секстетов становятся примерно одинаковыми, а при повышении температуры синтеза возрастает площадь секстета с положительным значением ε .

Список публикаций:

- [1] Rost C. M. et al. // *Nature Communications*. 2015. V. 6. P. 8485.
- [2] A. Sarkar. et al. // *Journal of the European Ceramic Society*. 2018. V. 38. P. 2318.

Исследование магнитокристаллической анизотропии в металлических системах при помощи функций Грина с пространственным разрешением

Подшивалов Алексей Павлович

Кашин Илья Владимирович, Андреев Сергей Николаевич

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина

i.v.kashin@urfu.ru

В данной работе мы предлагаем теоретический подход, позволяющий изучать эффекты магнитокристаллической анизотропии (МКА) в металлических системах с использованием формализма функций Грина с явным учётом зависимости от вектора обратного пространства. Мы показываем, что такой подход – по отношению к известному методу, основанному на аппарате межзельных функций Грина [1] – обладает большей численной стабильностью при расчёте энергии МКА по отношению к плотности сетки Монкхорста-Пака. Проблема медленной или вовсе отсутствующей сходимости известного подхода при оценке пространственной суммы попарных атомных вкладов может быть здесь полностью устранена благодаря строгой аналитической замене попарного суммирования атомов простой композицией вкладов подрешеток, вычисленных как единое целое.

Подход проверен на эффективной модели одиночного атома, которая, тем не менее, наследует качественную картину МКА монослоя Co и многослойного материала Au/Co/Au. Для этого был произведен расчёт энергии МКА, а также оценен тензор МКА путём отображения исходной электронной модели на эффективную спиновую модель. Первая представляет собой гамильтониан, записанный в приближении сильной связи, а вторая описывает анизотропию спина на уровне парного взаимодействия различных пространственных компонентов этого спина между собой. Численная сходимость предлагаемого метода подтверждена на примере модели одномерной цепочки атомов в выраженной металлической фазе.

В качестве основного объекта для апробации был выбран монооксид кобальта CoO. Эксперименты, выявляющие у монооксидов переходных металлов анизотропные магнитные свойства при различных внешних воздействиях (магнитное поле, давление), известны относительно давно [2]. Теоретические исследования, основанные на расчетах из первых принципов, прослеживают взаимосвязь между природой и выраженностью одноузловой магнитной анизотропии с типом искажения решетки (моноклинная) [3]. МКА в данном соединении носит характер лёгкой оси, однако среди исследований имеются разночтения в оценке её направления [3].

В данной работы угловая зависимость энергии МКА атома кобальта находится в разумном согласии с результатами работы [3]. Также эта зависимость была разложена на составляющие по подрешёткам, и было впервые получено, что доминирующий вклад в энергию вносят подрешётки, локальные спиновые магнитные моменты атомов Co в которых коллинеарны локальному спиновому магнитному моменту того атома Co, для которого вёлся расчёт энергии МКА.

Таким образом, мы показали, что предложенный подход полезен для изучения эффектов магнитокристаллической анизотропии как в модельных, так и в реальных материалах с металлической электронной структурой.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-72-01003, <https://rscf.ru/project/23-72-01003/>

Список публикаций:

[1] V. V. Mazurenko, Y. O. Kvashnin, F. Jin, H. A. De Raedt, A. I. Lichtenstein, and M. I. Katsnelson, *First-principles modeling of magnetic excitations in Mn12* // *Phys. Rev. B*. 2014. № 89. 214422

[2] W.L. Roth, *Magnetic Structures of MnO, FeO, CoO, and NiO* // *Phys. Rev.* 1958. № 110. 1333

[3] A. Schrön, C. Rödl, F. Bechstedt, *Crystalline and magnetic anisotropy of the 3d-transition metal monoxides MnO, FeO, CoO, and NiO* // *Phys. Rev. B*. 2012. № 86. 115134

Спектр спиновых волн в двухслойной структуре решеток скирмионов

Самигуллина Анжела Ильгизовна

Уфимский университет науки и технологий

Шарафуллин Ильдус Фанисович

angelasamig2002@gmail.com

Решетка скирмионов — это упорядоченная структура, состоящая из скирмионов, которые являются особыми объектами в магнетиках. Они представляют собой топологические возбуждения, которые могут быть рассмотрены как квазичастицы с нецелым спином. Изучение скирмионов является важным для развития технологий в области магнетизма и магнитных материалов, что открывает новые перспективы для создания современных устройств [1]. Спектр спиновых волн обычно имеет нетривиальную структуру из-за присутствия скирмионов и неоднородности магнитной структуры.

В данной работе рассматриваем систему, состоящую из двух одинаковых слоев, разделенных между собой межслойным антиферромагнитным взаимодействием J_3 . Структура одного слоя представляет собой симметрию простой кубической решетки со спинами Гейзенберга амплитудой $\frac{1}{2}$. На узлах решетки спины взаимодействуют друг с другом с помощью ферромагнитного обменного взаимодействия с параметром J_1 для ближайших соседей и антиферромагнитного обмена с параметром J_2 для следующих ближайших соседей вдоль оси y . Внешнее магнитное поле направлено вдоль оси y . Для исследования основного состояния системы и определения типа дальнего порядка воспользуемся Гамильтонианом (1), который описывает взаимодействие спинов в системе. Для этого мы примем, что θ — угол между двумя ближайшими соседними спинами в направлении y .

Рассмотрим следующий Гамильтониан:

$$H = -2J_1 \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 2J_2 \sum_{i,i'} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i'} - 2g\mu_B h \sum_i S_i^y - J_3 \sum_{i,i'} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i'} \quad (1)$$

где первое слагаемое описывает ферромагнитное взаимодействие между ближайшими соседними спинами, второе — антиферромагнитное взаимодействие между следующими ближайшими соседними спинами вдоль оси y , третье — взаимодействие со внешним магнитным полем, h — величина магнитного поля, приложенного вдоль направления y , g и μ_B — соответственно фактор Ланде и магнетон Бора, четвертое — антиферромагнитное взаимодействие между двумя одинаковыми слоями.

Для того, чтобы определить спектр спиновых волн, вычислили две функции Грина с использованием приближения Боголюбова-Тябликова. Спектр спиновых волн от вектора представляет собой распределение энергий спиновых волн исследуемой нами физической системе. Без магнитного поля спектр спина начинается с минимума, все возможные состояния спина имеют одинаковую энергию и располагаются на одном уровне энергии. Это связано с тем, что без магнитного поля спиновой спектр представляет собой равномерно заполненные уровни энергии, начиная от минимального значения. Включение магнитного поля приводит к расщеплению энергетических уровней и формированию двух подуровней - с максимальной и минимальной энергией. Поэтому спектр становится более выраженным и можно наблюдать отчетливый пик при определенной энергии.

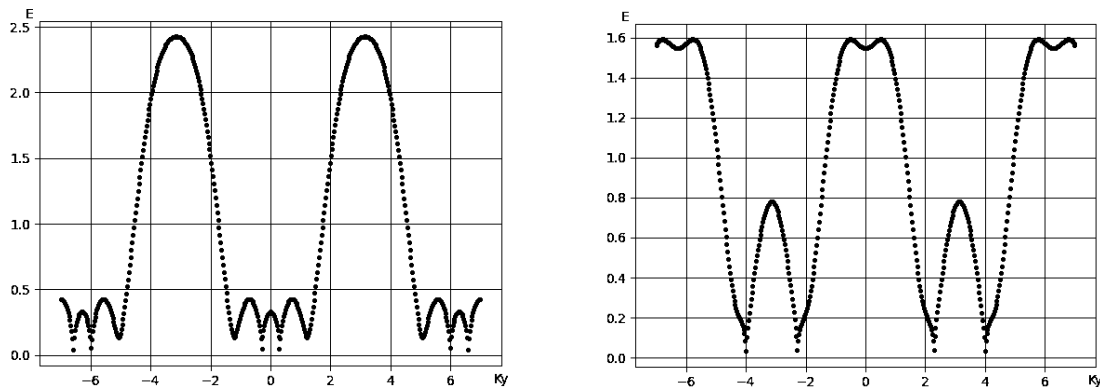


рис. 1 Зависимость энергии от волнового вектора k_y в двухслойной системе с антиферромагнитным межслойным взаимодействием в простой кубической решетке со спиральной структурой по оси y в случае $\theta = \frac{\pi}{3}$, $k_x = k_z = 0$, $J_1 = 2$, $J_2 = -1$, $J_3 = -1$, $\langle S^z \rangle = 0.5$ без внешнего магнитного поля $h = 0$ (слева), с включенным магнитным полем $h = 1$, причем считаем $g\mu_B = 1$ (справа).

Рассмотрели, как будет изменяться энергетический спектр в промежутке $J_3 \in [0, -1.5]$ без влияния магнитного поля. Пришли к выводу, что изменение межслойного взаимодействия влияет на форму спектра энергии и положение энергетических состояний, что отражает изменение взаимодействия между слоями в системе.

Список публикаций:

[1] Sahbi El Hog, Sharafullin I.F., Diep H.T., Garbouj H., Debbichi M., Said M. // *Magnetism and Magnetic Materials*. 2022. V. 563. 169920.

Кристаллическая и электронная структура плёнок $(2\sqrt{3} \times 3)\text{Bi}/\text{InAs}$

Соловова Надежда Юрьевна

Еремеев Сергей Владимирович, Бондаренко Леонид Владимирович, Тупчая Александра Юрьевна, Грузнев Димитрий Вячеславович, Саранин Александр Александрович, Усачёв Дмитрий Юрьевич, Терещенко Олег Евгеньевич

Новосибирский национальный исследовательский государственный университет

Голяшов Владимир Андреевич, к.ф.-м.н.

n.solovova@g.nsu.ru

В теоретических работах было предсказано, что бислои висмута, а также тонкие плёнки $\text{Bi}(111)$ являются моноэлементными двумерными топологическими изоляторами. Однако на электронную и кристаллическую структуру тонких плёнок значительно влияет материал подложки. В данной работе в качестве подложки была выбрана поверхность $n\text{-InAs}(111)\text{A}$. На поверхности $n\text{-InAs}(111)\text{A}$ наблюдается изгиб зон вниз, что приводит к наличию состояний двумерного электронного газа. Влияние спин-орбитального взаимодействия атомов висмута на состояния двумерного электронного газа InAs интересно для спинтроники. Из литературы [1] известно, что осаждение Bi на поверхности $\text{InAs}(111)\text{A}$ при комнатной температуре приводит к росту плёнок с электронной и кристаллической структурой, близкой к структуре поверхности $\text{Bi}(111)$. Осаждение Bi на поверхность $\text{InAs}(111)\text{A}$ при температуре выше комнатной в литературе не описано. Однако эксперименты по осаждению Bi на поверхность $\text{GaAs}(111)$ показали, что повышение температуры подложки приводит к образованию химических связей между атомами Bi и атомами подложки [2].

Цель работы – изучить влияние условий роста тонких плёнок $\text{Bi}/\text{InAs}(111)\text{A}$ на их кристаллическую и электронную структуру. Bi осаждался на подложку $\text{InAs}(111)\text{A}$ -(2×2) из эффузионной ячейки Кнудсена при комнатной и высокой ($\approx 300^\circ\text{C}$) температуре. Электронная структура изучалась с помощью фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением. Для экспериментального изучения кристаллической структуры плёнок применялась рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС), дифракция медленных электронов (ДМЭ), рентгеновская фотоэлектронная дифракция (РФД), сканирующая туннельная микроскопия (СТМ). Модель кристаллической структуры была построена с помощью *ab initio* случайного поиска структур и расчетов по теории функционала плотности в программном пакете VASP.

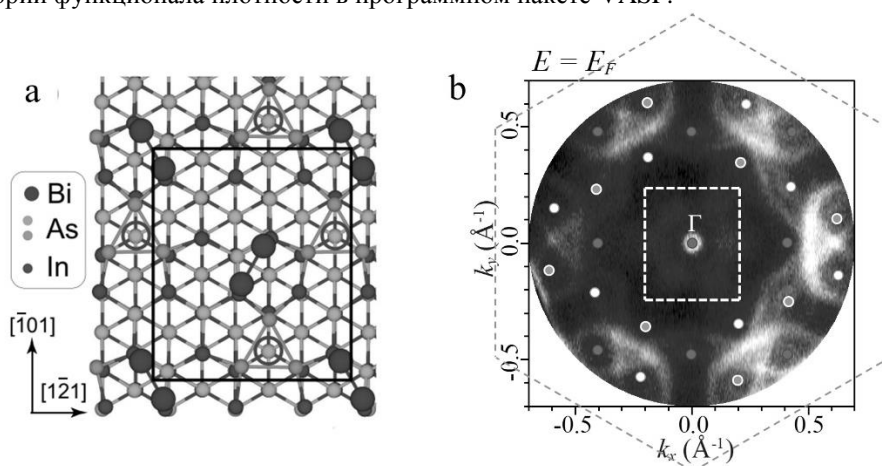


рис.1. а) Модель кристаллической структуры поверхности $(2\sqrt{3} \times 3)\text{Bi}/\text{InAs}(111)\text{A}$, полученная *ab initio* случайным поиском структур; б) Карта поверхности Ферми, полученная на плёнке $(2\sqrt{3} \times 3)\text{Bi}/\text{InAs}(111)\text{A}$ методом ФЭСУР, белым цветом показана граница зоны Бриллюэна сверхструктуры $(2\sqrt{3} \times 3)$, а серым цветом – граница зоны Бриллюэна $\text{InAs}(111)$ -(1×1).

При высокой температуре подложки ($\approx 300^\circ\text{C}$) рост плёнки ограничен толщиной $\approx 4 \text{ \AA}$. Данные СТМ и ДМЭ указывают на формирование поверхностной реконструкции $(2\sqrt{3} \times 3)$ с прямоугольной элементарной

ячейкой с латеральными размерами $\sim 13\text{\AA} \times 15\text{\AA}$. Согласно расчету, сверхструктура ($2\sqrt{3}\times 3$) обусловлена формированием на поверхности InAs димеров висмута (рис. 1a). Атомы висмута в димерах расположены над атомами индия и связаны с ними. Поскольку образование димера над вакансией In энергетически не выгодно, вакансии In, формирующие на чистой поверхности InAs(111)A реконструкцию (2×2), переупорядочиваются. Также возможно заполнение вакансий In одиночными атомами Bi. С помощью ФЭСУР было выявлено, что в электронной структуре сохраняются состояния двумерного электронного газа. При этом в запрещенной зоне InAs в Γ точках зоны Бриллюэна сверхструктуры ($2\sqrt{3}\times 3$) появляются параболические электронные и дырочные состояния висмута с сильной анизотропией эффективной массы ($m_e^* \sim 0.2m_0 - 0.6m_0$ и $m_h^* \sim 0.2m_0 - 0.4m_0$, где m_0 – масса свободного электрона). (рис. 1b) Общая электронная структура системы ($2\sqrt{3}\times 3$)Bi/InAs обладает полупроводниковым характером с шириной запрещенной зоны ~ 150 мэВ.

Список публикаций:

[1] Nicolai L. et al. Bi monocrystal formation on InAs (111) A and B substrates //arXiv preprint arXiv:1807.00306. – 2018.

[2] McGinley C. et al. The interaction of bismuth with the GaAs (111) B surface //Applied surface science. – 1999. – Т. 152. – №. 3-4. – С. 169-176.

Структура и зонный спектр кристалла Ca_2NF с решеткой антихалькопирита

Тимофеев Вячеслав Сергеевич

Кемеровский государственный университет

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

slava.timofeev.mail@gmail.com

Фторнитриды металлов - это относительно малоизученный класс неорганических соединений [1]. В работе [2] были получены кристаллы Ca_2NF , и определена кристаллическая структура методом монокристаллической рентгеновской дифрактометрии. Описанная структура (пространственная группа $I4_1amd$) может рассматриваться как промежуточная между структурами каменной соли (для бинарного соединения CaO) и цинковой обманки (сфалерит). При наличии промежуточного состояния представляет научный интерес предварительное теоретическое рассмотрение кристалла Ca_2NF в структуре антихалькопирита, которая представляет собой двойную ячейку сфалерита, с целью предсказания структуры и некоторых возможных свойств.

Расчёт проводился в локальном приближении теории функционала плотности с обменно-корреляционным функционалом Пердью-Вонга (PW) [3]. Он был выполнен с использованием сохраняющих норму псевдопотенциалов, сгенерированных методом оптимизации сохраняющих норму псевдопотенциалов Вандербиля (ONCVP), предложенного Хаманном в 2013 году [4]. Программная реализация описанных выше методов представлена в пакете прикладных программ Quantum Espresso [5-7].

Квази-ньютоновским методом оптимизации Бройдена-Флетчера-Гольдфарба-Шанно [8] были получены параметры тетрагональной ячейки и равновесные положения атомов кристалла Ca_2NF в структуре антихалькопирита (пространственная группа $I\bar{4}2d$). Параметры $a = 5.083 \text{\AA}$ и $c = 10.999 \text{\AA}$ определяют тетрагональное сжатие как $c/a = 2.164$, что больше идеального для халькопирита значения, равного 2. Атомы занимают следующие позиции Уайкоффа (Wyckoff) в дробных координатах параметров решетки: Ca – 8d ($1/4, -x, 7/8$), N – 4b ($0, 0, 1/2$) и F – 4a ($0, 0, 0$), где параметр смещения катионов $x = 0.264$.

Зонная структура для всех высокосимметричных направлений кристалла Ca_2NF с решеткой антихалькопирита представлен на рис. 1 совместно с полной и парциальными плотностями электронных состояний, построенными для определения структуры зон.

Из рис. 1 видно, что кристалл не является прямозонным, так как максимум валентной зоны наблюдается в точке T, в то время как минимум зоны проводимости находится в точке Γ . Минимальная непрямая ширина запрещенной зоны $E_g = 0.777$ эВ, но из-за известной проблемы занижения ширины запрещенной зоны были проведены дополнительные калибровочные расчеты на известных бинарных соединениях, которые показали, что псевдопотенциал PW занижает ширину запрещенной зоны в среднем на 25 %. Тогда более реалистичным значением ширины запрещенной зоны является $E_g = 0.971$ эВ.

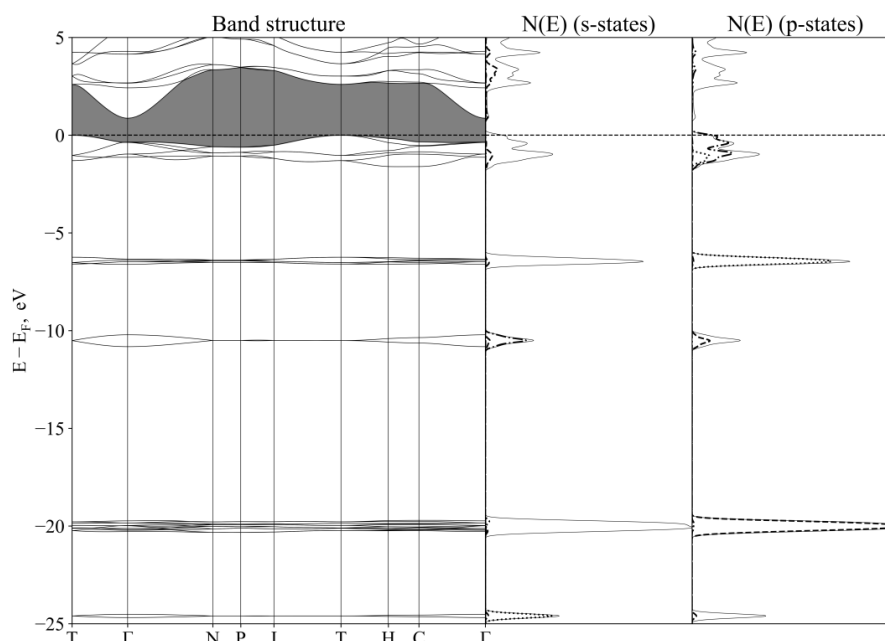


рис.1. Зонная структура, полная и парциальные плотности электронных состояний для Ca_2NF в структуре антихалькопирита. Полная плотность состояний обозначена сплошной линией. Парциальные плотности состояний: Ca – пунктир, N – штрих-пунктир, F – точки.

Структура валентной зоны является нетипичной для классической структуры халькопирита. Валентная зона содержит 4 разрешенных валентных промежутка, скопление полос с энергией порядка -20 эВ принадлежит к 3p состоянию электронов кальция, и его можно отнести к остову. Две разрешенные полосы с энергией около -25 эВ принадлежат 2s состояниям электронов фтора, с энергией около -11 эВ преимущественно 2s состояниям атомов азота с небольшой примесью 4p состояний электронов кальция. Шесть полос с энергией порядка -6 эВ в большинстве своём содержат 2p состояния электронов фтора, а вершина валентной зоны формируется 2p состояниями азота. Состояния 4s электронов кальция определяют форму нижней части зоны проводимости.

Таким образом, согласно нашим расчётам, кристалл Ca_2NF является непрямозонным полупроводником с шириной щели 0.971 эВ.

Дальнейшим путем развития данной работы можно считать исследование динамики решетки с обсуждением стабильности исследуемого соединения.

Список публикаций:

- [1] Gregory D. H. // *Coord. Chem. Rev.* 2001. V. 215. P. 301.
- [2] Nicklow R. A., Wagner T. R., Raymond C. C. // *J. of Solid State Chem.* 2001. V. 160. P. 134.
- [3] Perdew P., Wang Y. // *Phys. Rev. B.* 1992. V. 45. P. 13244.
- [4] Hamman D. R. // *Phys. Rev. B.* 2013. V. 88. P. 085117.
- [5] Giannozzi P., Baroni S., Bonini N. et al. // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2009. V. 21. P. 395502.
- [6] Giannozzi P., Andreussi O., Brumme T. et al. // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2017. V. 29. P. 465901.
- [7] Giannozzi P., Baseggio O., Bonfà P. et al. // *J. Chem. Phys.* 2020. V. 152. P. 154105.
- [8] Nocedal J., Wright S. J. *Numerical Optimization* // New York : Springer. 2009. Ch. 6.1.

Динамические эффекты радужного рассеяния атомов на поверхности кристалла

Хилько Николай Георгиевич

Южный федеральный университет

Мальшевский Вячеслав Сергеевич, д.ф.-м.н.

khilko@sfedu.ru

В ряде недавних экспериментальных исследованиях (см., например, [1]) выявлена зависимость углов радужного рассеяния ускоренных атомов поверхностью кристаллов от их начальной энергии. В частности, для ускоренных атомов азота в случае рассеяния поверхностью кристалла алюминия увеличение кинетической энергии частиц сопровождается уменьшением радужного угла при фиксированном значении поперечной компоненты энергии. В случае же рассеяния атомов поверхностью диэлектрика (LiF) при таких же условиях величина радужного угла не зависит от кинетической энергии частиц. В настоящей работе выдвигается

гипотеза, что наблюдаемые динамические явления в рассеянии связаны с диссипативными процессами, которые можно описать, используя зависящий от энергии потенциал взаимодействия в аппроксимации Морзе [2]:

$$V(\vec{r}) = \varepsilon(e^{-2\alpha(r-\sigma)} - 2e^{-\alpha(r-\sigma)}) \quad (1)$$

где ε , α и σ – подгоночные коэффициенты. Значения зависящих от энергии коэффициентов ε и σ приведены в [2]. Процесс рассеяния пучка моделировали путем численного интегрирования классических нерелятивистских уравнений движения каждой отдельной частицы в поле поверхности кристалла алюминия с учетом двухчастичных потенциалов взаимодействия (1). Для набора достаточной статистики накапливали данные для 20000 траекторий.

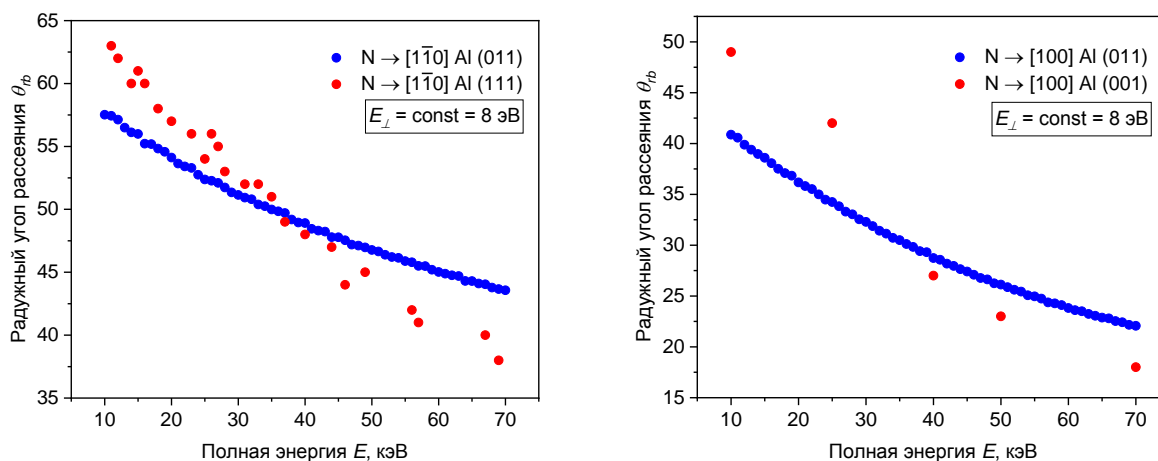


рис. 1. Теоретические (синие точки) и экспериментальные [1] (красные точки) зависимости радужного угла θ_{rb} от полной энергии E

Результаты численного моделирования приведены на Рис.1., и показывают качественное совпадение зависимости θ_{rb} от E с экспериментальными данными.

Список публикаций:

- [1] A. Schüller, H. Winter. *Dynamic dependence of the interaction potentials for grazing scattering of fast atoms from metal and insulator surfaces* / A. Schüller, H. Winter // *Nuclear Instruments and Methods in Physical Research B*. 2009. No.267, P. 2621-2624.
 [2] Е. В. Дергачева, В. С. Малышевский, Г. В. Фомин. *Динамический потенциал взаимодействия нейтральных атомов с поверхностью кристалла. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*, 2019, № 4, с. 53–55.

Особенности атомной и электронной структуры композита Co/PAN

Шишлов Иван Владимирович

Южный федеральный университет

Шматко Валентина Анатольевна, к.ф.-м.н.

timi.win1408@gmail.com

Одним из перспективных направлений современной наноэлектроники является получение органических композитов, обладающих уникальными характеристиками. К ним относятся композиты на основе полиакрилонитрила (PAN), обладающие впечатляющими термоустойчивыми, электропроводящими и оптическими свойствами, получаемыми при соответствующих модификациях. Улучшение показателей может достигаться изменением атомной и электронной структуры, внедрением в его структуру добавок из переходных 3d металлов.

В работе исследованы атомная и электронная структура композита полиакрилонитрила с добавлением кобальта на основе анализа экспериментальных рентгеновских фотоэлектронных спектров и спектров рентгеновского поглощения XANES композита Co/PAN, полученного методом пиролиза под воздействием некогерентного ИК-излучения. Рентгеновские спектры поглощения за К-краем кобальта получены на станции КМС-2 синхротронного источника BESSY – 2 (Берлин, Германия). Рентгеновские фотоэлектронные спектры получены при различных значениях энергии фотонов (630 эВ, 500 эВ и 400 эВ) на станции Materials Science синхротронного центра Elettra (Триест, Италия) при давлении остаточных газов в экспериментальной камере $\sim 10^{-10}$ mbar [1].

Для исследования особенностей электронной структуры и химических связей полученного композита Co/PAN был проведен компонентный анализ линий азота, углерода, кислорода и кобальта. На основе компонентного анализа рентгеновских фотоэлектронных спектров установлено наличие в композите C=C, C-N и C=N связей (рис 1a). Системы полисопряженных связей PAN в композите, вероятно, образуются по двум реакционным каналам – пиролиз с последующим дегидрированием и термоокисление. Азот находится в пиррольной и пиридиновой формах, с наличием неспаренных электронов, и может координироваться с кобальтом. Кобальт находится в композите преимущественно в двухвалентном состоянии.

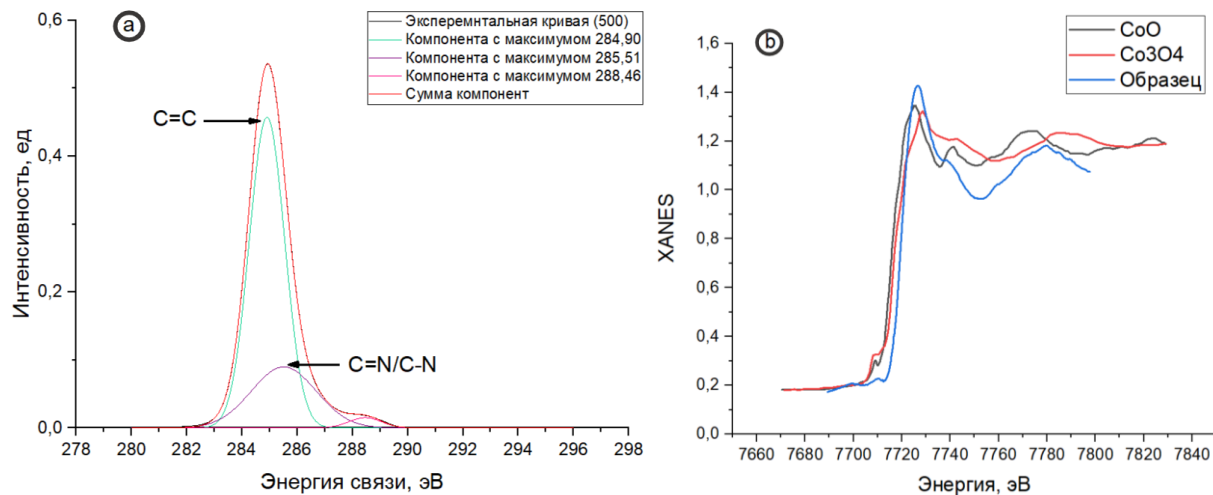


рис. 1. РФЭ-спектр углерода (C1s) композита Co/PAN(a) и РП-спектр К-края Co(b)

Данные, полученные методом спектроскопии рентгеновского поглощения, подтверждают данные РФЭС. На рис. 1b представлено сопоставление XANES спектров для анализа методом «отпечатка пальцев». Из рис. 1 видно, что спектр композита по форме схож со спектром оксида кобальта двухвалентного CoO, хотя наблюдаются и различия. Таким образом, кобальт находится в композите преимущественно в форме 2+, различия в спектрах композита и стандартных соединений, вероятно связаны с тем, что часть ионов кобальта координируется атомами цепочки полиакрилонитрила. Спектры стандартных образцов – CoO, Co₃O₄ взяты из работы [2].

Список публикаций:

- [1] Yalovega G. et al // *Radiation Physics and Chemistry*. 2020. V. 175, 108256
 [2] Kornienko N. et al. // *Journal of the American Chemical Society*. 2015. V. 137, 7448-7455

