

Аспирант 1 года обучения

Мухачев Роман Дмитриевич

ЛАБОРАТОРИЯ ОПТИКИ МЕТАЛЛОВ



Аспирант 1 года обучения Мухачев Роман Дмитриевич лаборатория оптики металлов

Научный руководитель: к.ф.-м.н., в.н.с. Лукоянов Алексей Владимирович.

Специальность: 01.03.08 «Физика конденсированного состояния».

Тема работы: Электронная структура и магнитные свойства тройных интерметаллидов.

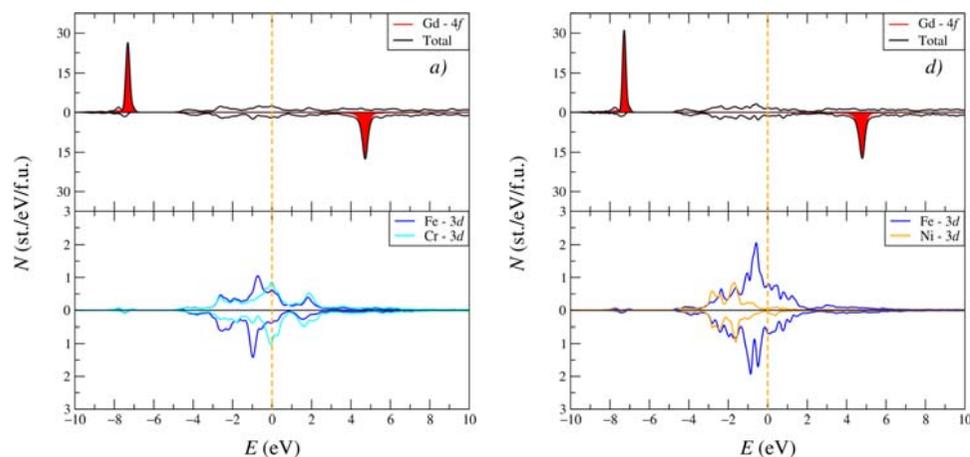
Задача текущего года: Исследование влияние примесей замещения (Cr, V, Ni) на электронную структуру и магнитные свойства соединения GdFeSi. Изучение электронной структуры соединений $GdFeSi_{1-x}Al_x$ и GdRuSi в различных кристаллических структурах. Исследование электридных свойств и электронной структуры GdScSi и GdScGe.

Результаты, полученные в текущем году: В результате исследования влияния примесей замещения V и Cr в GdFeSi было обнаружено, что с данными примесями сохраняются ферромагнитный тип упорядочения и величина полного магнитного момента в пределах экспериментальных значений концентраций примесей. В случае примеси Ni (в $GdFe_{1-x}Ni_xSi$) теоретические расчеты показали ФМ-АФМ переход для $x=0.25-0.30$, подтверждающийся экспериментальными данными магнитных измерений. Для серии интерметаллидов $GdFeSi_{1-x}Al_x$ проведенные теоретические исследования позволили сделать заключение, что для различных кристаллических фаз (кубической, гексагональной и тетрагональной) магнитные свойства и электронная структура значительно отличаются в результате изменения магнитных моментов и спиновой поляризации ионов Fe. Для GdRuSi найдено ферромагнитное упорядочение моментов Gd в тетрагональной структуре. Для GdScSi и GdScGe исследованы электронная структура и функция локализации электронов, показано, что данные соединения являются электридами.

Аспирант 1 года обучения Мухачев Роман Дмитриевич

Показатель	Баллы	Кол-во	Сумма
публикации в изданиях ВАК (вышедшие из печати)	20	4	80
публикации в изданиях ВАК (принятые в печать)	5	0	0
свидетельство о программах для ЭВМ, зарегистрированных в установленном порядке	20	0	0
патент	20	0	0
соавторство в монографии	5	0	0
оформленное ноу-хау	5	0	0
публикации в других изданиях (не тезисы)	2	0	0
тезисы доклада на международной конференции	5	8	40
тезисы доклада на российской конференции	3	2	6
участие в конференции с устным докладом	2	2	4
участие в конференции со стендовым докладом	1	5	5
сданный на «отлично» кандидатский экзамен	20	0	0
сданный на «хорошо» кандидатский экзамен	15	1	15
сданный на «удовлетворительно» кандидатский экзамен	10	0	0
участие в грантах в качестве: исполнителя	5	2	10
участие в грантах в качестве: руководителя	10	0	0
Общая сумма			160

Исследование свойств $\text{GdFe}_{1-x}\text{T}_x\text{Si}$, $\text{T} = \text{Cr}, \text{V}, \text{Ni}$



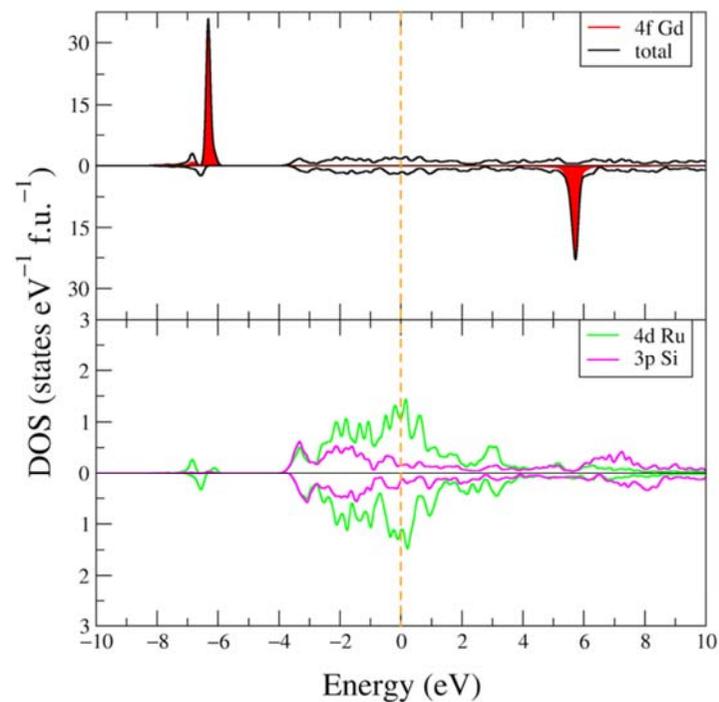
Полная и парциальные плотности электронных состояний $\text{GdFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Si}$ (a) и $\text{GdFe}_{0.75}\text{Ni}_{0.25}\text{Si}$ (d).

Type	x					
	0.10 (exp.)	0.15	0.20 (exp.)	0.25	0.30 (exp.)	0.35
AFM(+ - - -)	61.68	61.25	60.80	59.85	58.98	58.22
AFM(+ + - -)	56.99	56.26	55.43	54.36	53.33	52.38
AFM(+ - - +)	0.33	0.34	0.34	0.13	0.00	0.00
FM	0.00	0.00	0.00	0.00	0.09	0.29

Полная разность энергий $\Delta E = |E_{\text{FM}} - E_{\text{AFM}}|$ в мэВ/ф.ед. относительно наименьшего типа магнитного упорядочения моментов Gd для рассчитанной суперячейки $\text{GdFe}_{0.75}\text{Ni}_{0.25}\text{Si}$ с экспериментальными параметрами кристаллической структуры или рассчитанными как среднее значение в промежуточных концентрациях.

Результаты опубликованы в журнале Physical Chemistry Chemical Physics (Q1), представлены на российской конференции с международным участием.

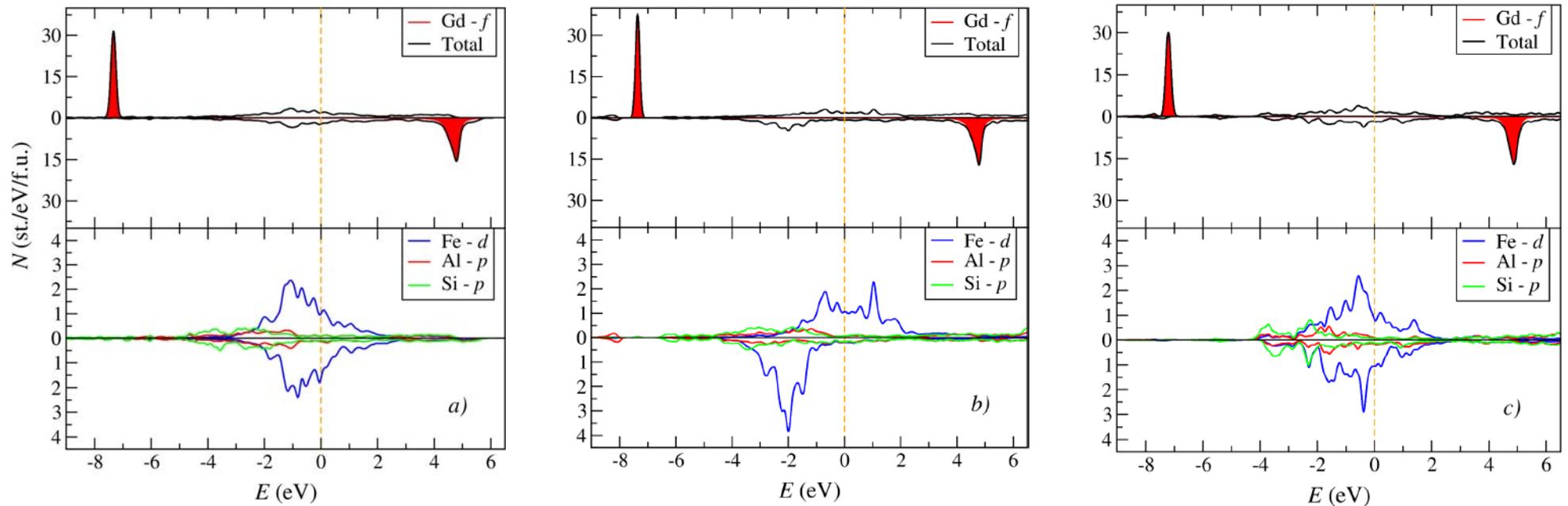
Исследование магнитных свойств и электронной структуры GdRuSi



Полная и парциальные плотности электронных состояний
GdRuSi

Результаты частично опубликованы в журнале *Metals* (Q2), представлены на 3 международных и 1 российской конференции.

Изучение различных фаз $\text{GdFeSi}_{1-x}\text{Al}_x$



Полная и парциальные плотности электронных состояний: а) гексагональной фазы типа MgZn_2 ($P63/mmc$), б) кубической фазы типа MgCu_2 ($Fd3m$) и в) тетрагональной фазы типа CeFeSi ($P4/nmm$) соединения $\text{GdFeSi}_{0.5}\text{Al}_{0.5}$.

Результаты опубликованы в журнале *Intermetallics* (Q1), представлены на 3 международных конференциях.

Результаты

- В результате исследования влияния примесей замещения V и Cr в GdFeSi было обнаружено, что с данными примесями сохраняются ферромагнитный тип упорядочения и величина полного магнитного момента в пределах экспериментальных значений концентраций примесей. В случае примеси Ni (в $\text{GdFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Si}$) теоретические расчеты показали ФМ-АФМ переход для $x=0.25-0.30$, подтверждающийся экспериментальными данными магнитных измерений.
- Для серии интерметаллидов $\text{GdFeSi}_{1-x}\text{Al}_x$ проведенные теоретические исследования позволили сделать заключение, что для различных кристаллических фаз (кубической, гексагональной и тетрагональной) магнитные свойства и электронная структура значительно отличаются в результате изменения магнитных моментов и спиновой поляризации ионов Fe.
- Для GdRuSi найдено ферромагнитное упорядочение моментов Gd в тетрагональной структуре.
- Для GdScSi и GdScGe исследованы электронная структура и функция локализации электронов, показано, что данные соединения являются электридами.