



ЕЛЕКТРОННА СТРУКТУРА ТА ВЛАСТИВОСТІ МЕТАЛІВ І СПОЛУК НА ЇХ ОСНОВІ

Відділ надпровідності (№09)	чл.-кор. НАН України, д.ф.-м.н., с.н.с. Кордюк О. А.
Відділ спектроскопії твердого тіла (№20)	чл.-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Уваров В. М.
Відділ обчислювальної фізики (№24)	чл.-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Антонов В. М.
Відділ електронної структури та електронних властивостей (№30)	д.ф.-м.н., проф. Нищенко М. М.

*Заступник директора з наукової роботи
д.ф.-м.н., проф. Татаренко Валентин Андрійович*

МЕХАНІЗМИ ЕЛЕКТРОННОГО ВПОРЯДКУВАННЯ ТА ШЛЯХИ ПІДВИЩЕННЯ КРИТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ

У ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНИХ НАДПРОВІДНИКАХ (відомча тема 2016–2020 рр.)

У надпровідниках на основі заліза виявлено аномальний розмірний перехід у кутовій залежності магнітоопору (рис. 1), що знайшло пояснення у неочікувано широкій області існування поверхневої надпровідності. Встановлено, що через ключову роль електрон-електронної взаємодії у механізмі ренормалізації квазічастинкового спектру її обмежено по енергії шириною зони провідності (рис. 2). Аномальний зсув квазічастинкових зон з температурою (рис. 3) також можна пояснити цією взаємодією, яка на міжатомному рівні приводить до блокування електронних перескоків між найближчими сусідами (О.А. Кордюк, О.А. Каленюк).

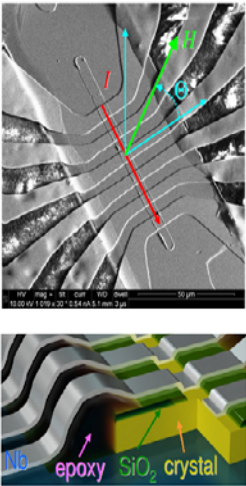


Рис. 1. Kalenyuk et al., *PRB*, **96**: 134512 (2017)

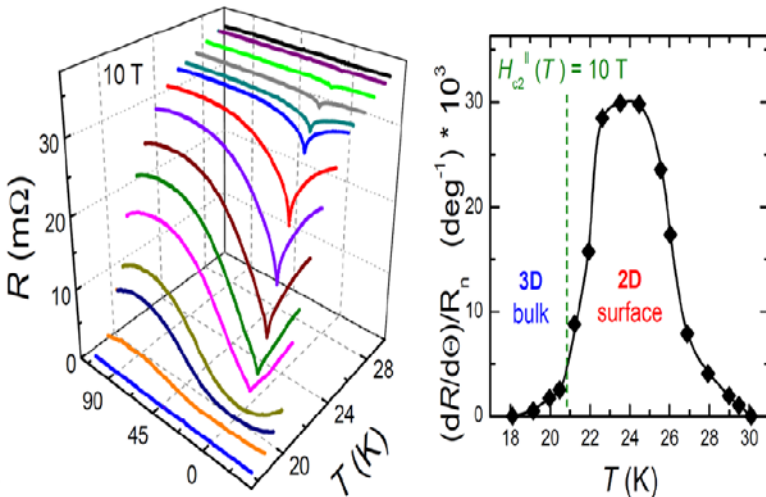


Рис. 2. Evtushinsky et al., *PRB*, **96**: 060501 (2017)

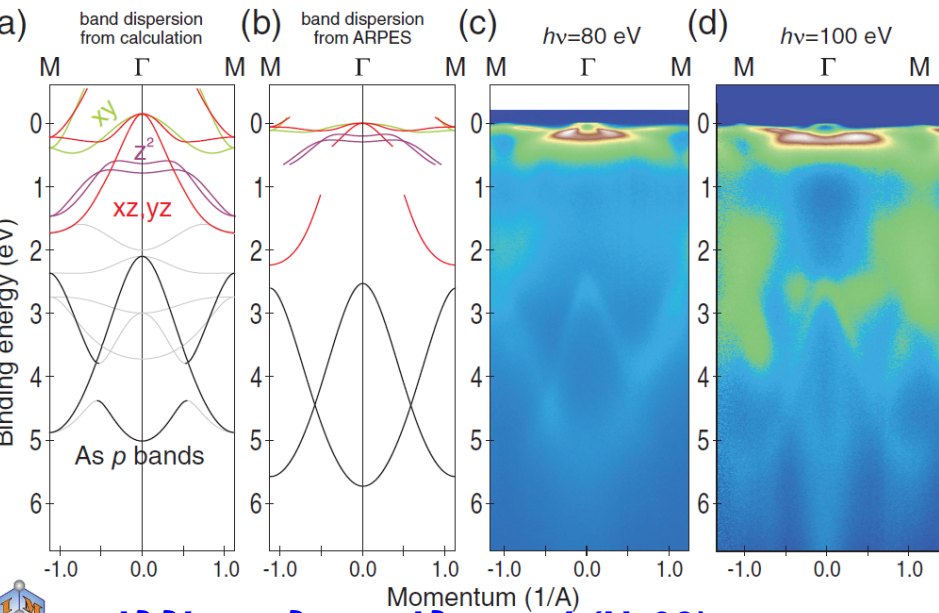
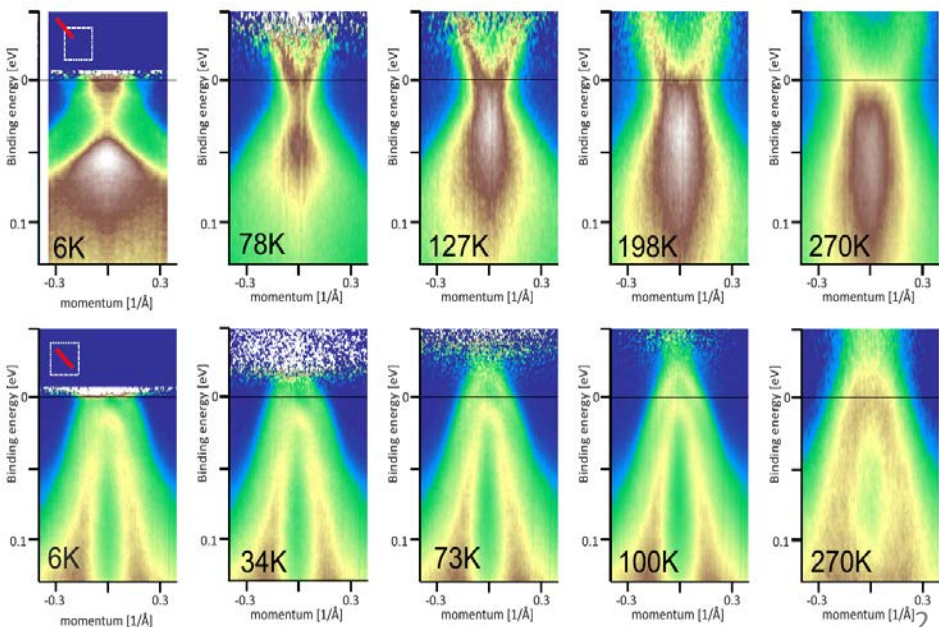


Рис. 3. Kushnirenko et al., *PRB*, **96**: 100504 (2017)



ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИТА ПТФЕ/(0,05–5 мас.% ВНТ) У ДІАПАЗОНІ $\lambda=320\text{--}1000\text{ нм}$

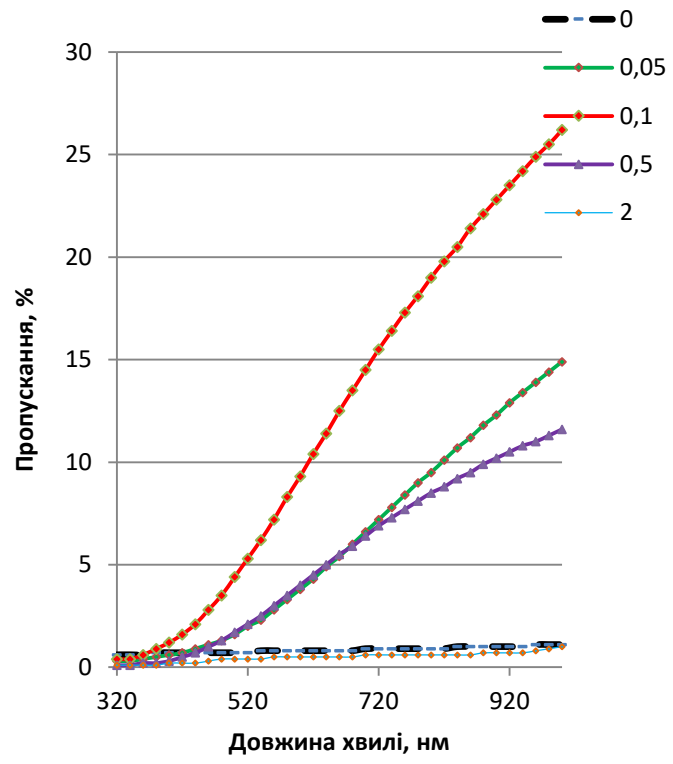
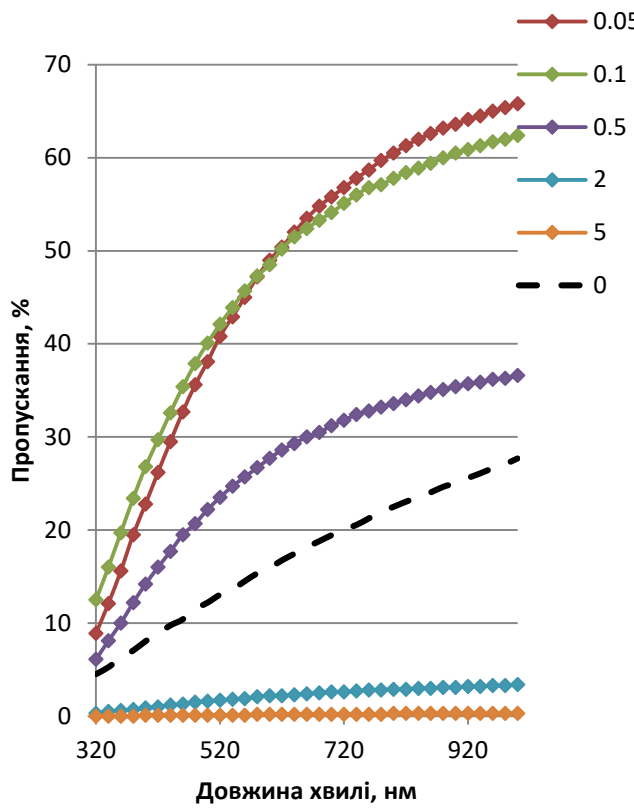


Рис. 1. Коефіцієнт поглинання випромінювання зразків з товщинами: 30 (ліворуч) та 60 мкм (праворуч)

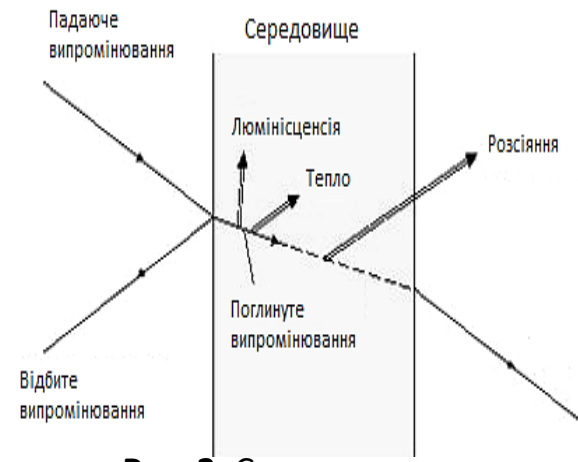
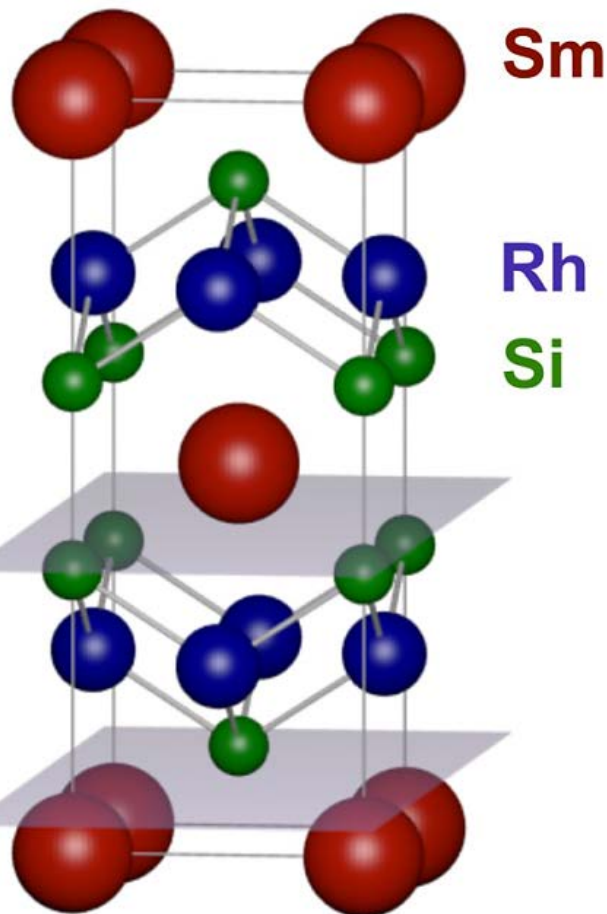


Рис. 2. Схема поглинання випромінювання зразком

Встановлено можливість підвищення ККД традиційних напівпровідникових елементів, щоб ефективніше перетворювати сонячне випромінювання, за рахунок композитних покриттів з вуглецевими нанотрубками, оскільки в ультрафіолетовому діапазоні прозорість композиту стрімко падає в результаті ефективного поглинання високоенергетичних (γ 3–5 eV) квантів світла нанотрубками (М.М. Нищенко, І.Є. Галстян, В.Ю. Кодя, М.М. Якимчук)

При додаванні у прозорий діелектрик домішкових ($< 0,5$ мас.%) вуглецевих нанотрбок коефіцієнт поглинання падає, а прозорість у видимому діапазоні зростає за рахунок поглинання нанотрубками високоенергетичних (γ 3–5 eV) квантів світла із наступною їх конверсією в низькоенергетичні кванти.

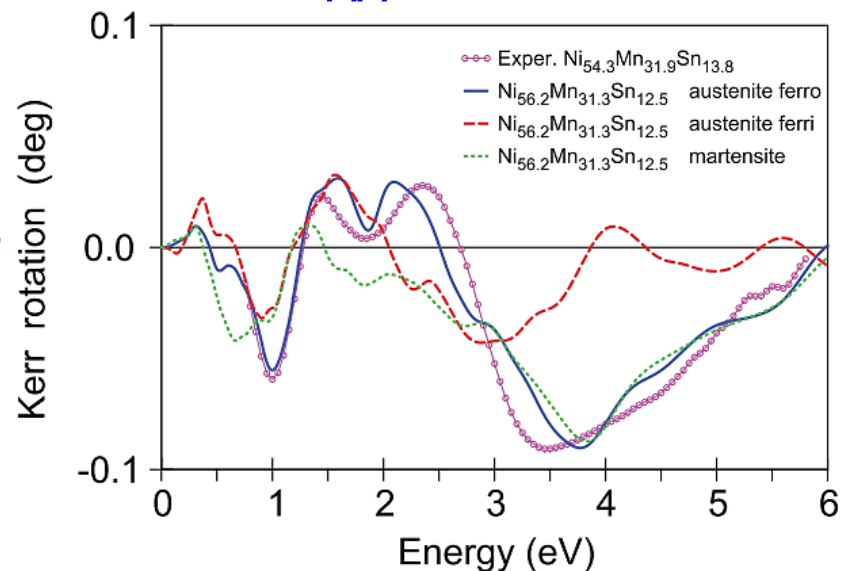
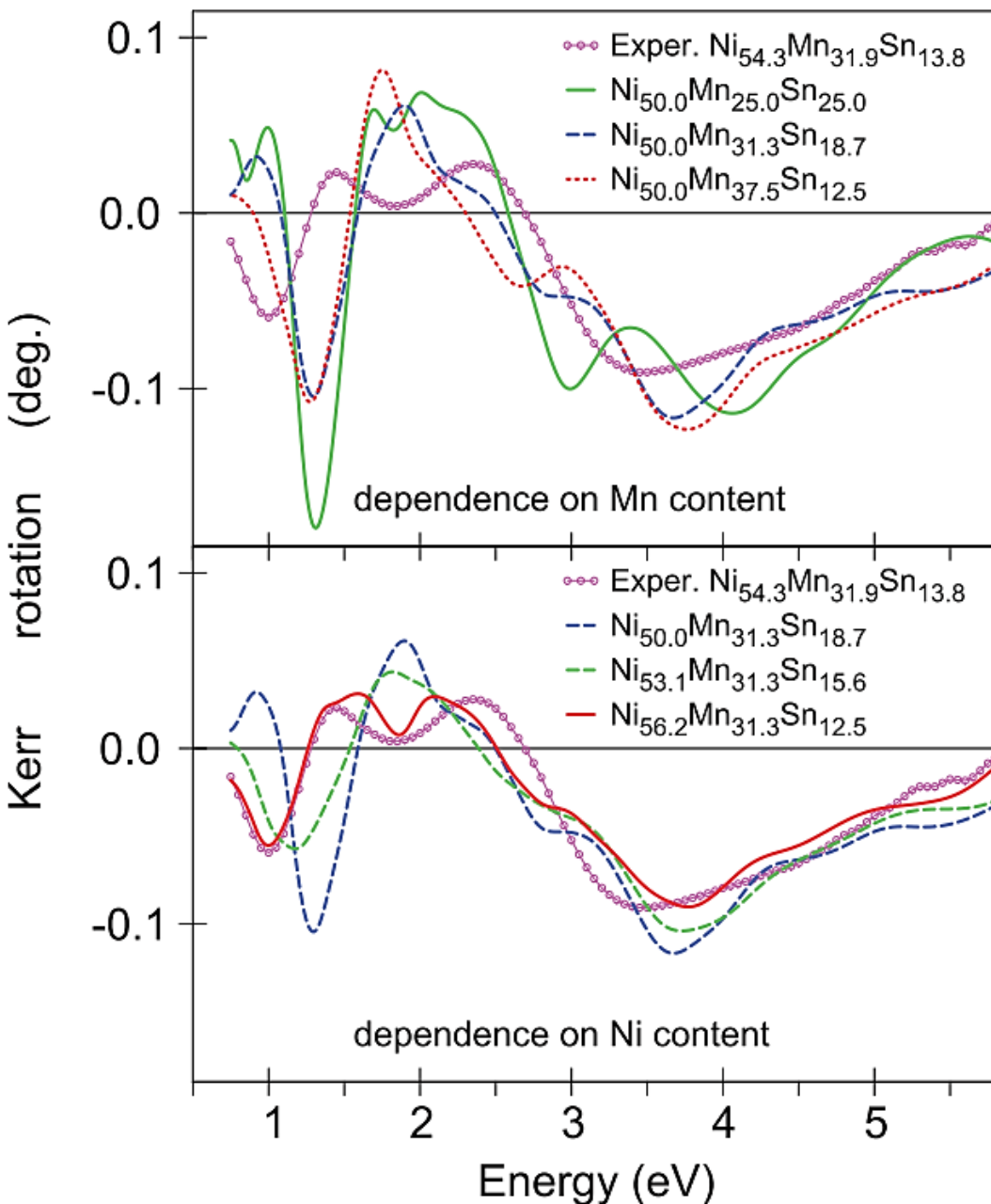


SIAM parameters, the contributions of different configurations to the ground state and calculated Sm valence in the bulk and at the surface of the SmRh_2Si_2 compound.

SIAM parameters (eV)	Bulk	Surface
ϵ_f	-6.0	-6.3
Δ	0.7	0.5
U_{ff}	7.0	7.0
$c^2(4f^4)$	0.0002	0.0001
$c^2(4f^5)$	0.9363	0.9490
$c^2(4f^6)$	0.0635	0.0509
Sm valence	2.937	2.949

На основі квантово-механічних зонних розрахунків і моделі одиночної домішки за Андерсоном (single-impurity Anderson model—SIAM) показано, що нетипова змішана валентність як поверхневих, так і об'ємних атомів Sm у кристалічній сполуці SmRh_2Si_2 пояснюється, як і для ізоструктурних сполук на основі атомів Ce, наявністю сильної 4f-гібридації (В.М. Антонов, Ю.М. Кучеренко)

Найвагоміший науковий результат 2017 р. Відділу №24

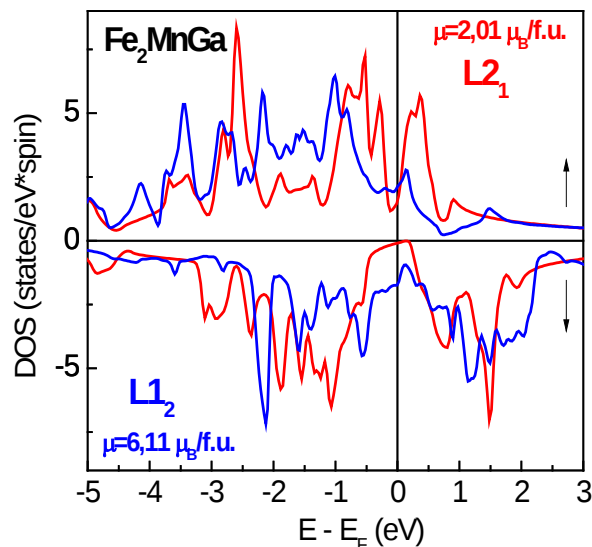


На основі квантово-механічних зонних розрахунків дано пояснення оптичних і магнетооптичних (МО) властивостей феромагнетних стопів з пам'яттю форми Ni–Mn–Sn. Встановлено, що ці властивості є дуже чутливими до відхилення від стехіометрії. Ідентифіковано міжзонні переходи, які визначають піки МО-спектрів, та показано, що вони відбуваються у відносно вузьких енергетичних інтервалах поблизу декількох напрямків високої симетрії Бріллюєнової зони. Значна модифікація МО-спектрів відбувається при мартенситному переході у стопах Ni–Mn–Sn, і її можна вважати його характерною ознакою.

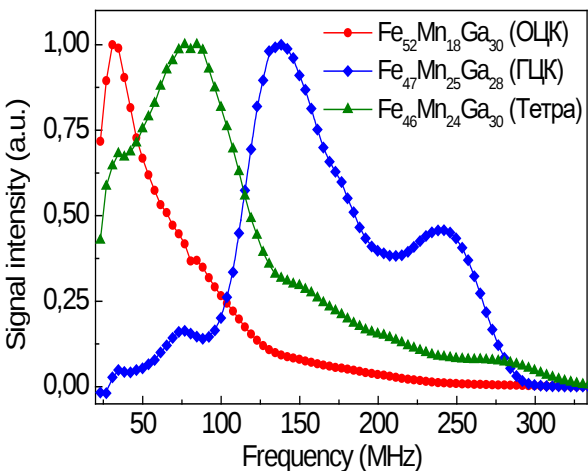


Вплив кристалічної структури на електронну будову та фізичні властивості сплавів Гойслера

Fe₂MnGa



Зміни в розподілі
густини станів електронів

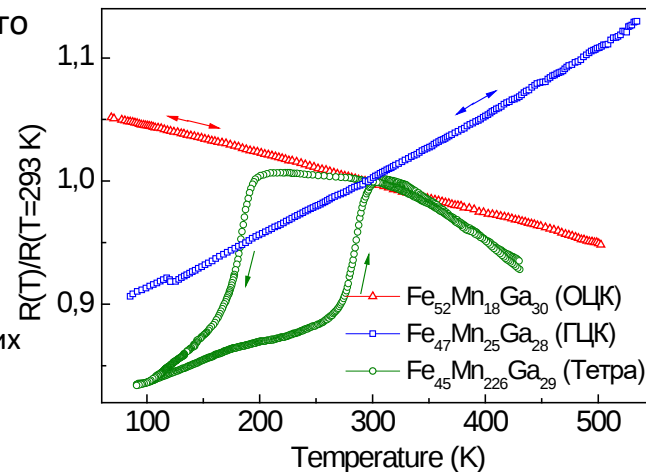
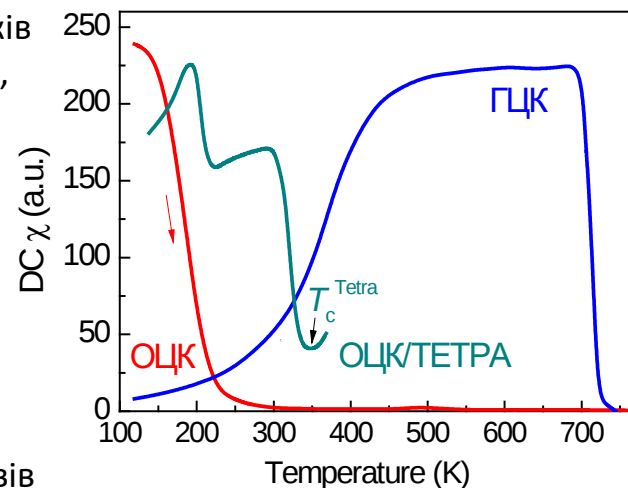


Спектри ЯМР сплавів Fe₂MnGa
різної симетрії кристалічної
ґратниці

Першопринципними розрахунками міжзонної оптичної провідності сплаву Fe₂MnGa із структурами типу L₂₁ або L₁₂ та їх співставленням з експериментальними спектрами для масивних і плівкових зразків Fe₄₉Mn₂₅Ga₂₆ та Fe₅₂Mn₁₈Ga₃₀ встановлено, що зміна типу магнітного порядку в масивних зразках (антиферомагнетик–феромагнетик або феромагнетик–парамагнетик відповідно) практично не впливає на оптичні властивості сплавів. Цей ефект пояснюється різними часами формування електронної структури та магнітних флюктуацій у сплавах.

Основні риси електронної структури сплавів формуються в межах близького атомового порядку (Ю.В. Кудрявцев, М.В. Уваров). Сплави Fe₂MnGa демонструють структурну нестабільність. Незначне відхилення від стехіометрії 2:1:1 спричиняє формування ОЦК-, ГЦК- або тетрагональної структури. Зміна симетрії кристалічної ґратниці викликає істотні зміни в електронній структурі та зміни спектрів ЯМР (ліворуч), магнітних і транспортних властивостей (праворуч).

Сплави Fe₂MnGa демонструють феромагнітний ефект пам'яті форми, мають значний ступінь спінової поляризації електронів провідності і є перспективними функціональними матеріалами для практичного використання.



Вплив симетрії кристалічної ґратниці на температурні залежності магнітної сприйнятливості й електроопору



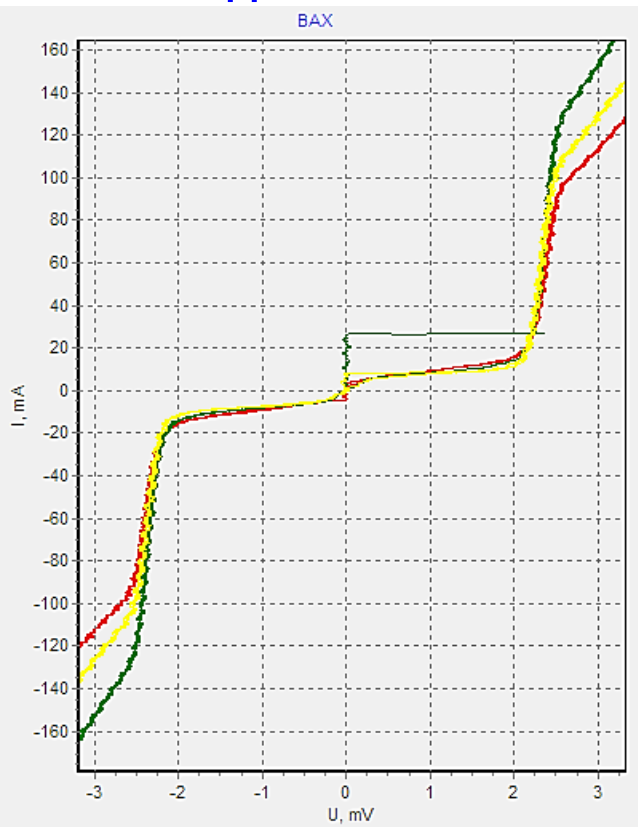


НАНОМАСШТАБНІ ТА НАНОСТРУКТУРОВАНІ СИСТЕМИ

Відділ теорії металічного стану (№02)	д.ф.-м.н., проф. Іванов М. О.
Відділ фізики багатопараметричної структурної діагностики (№03)	д.ф.-м.н. Лізунов В. В.
Відділ надпровідникової електроніки (№12)	д.ф.-м.н., проф. Руденко Е. М.

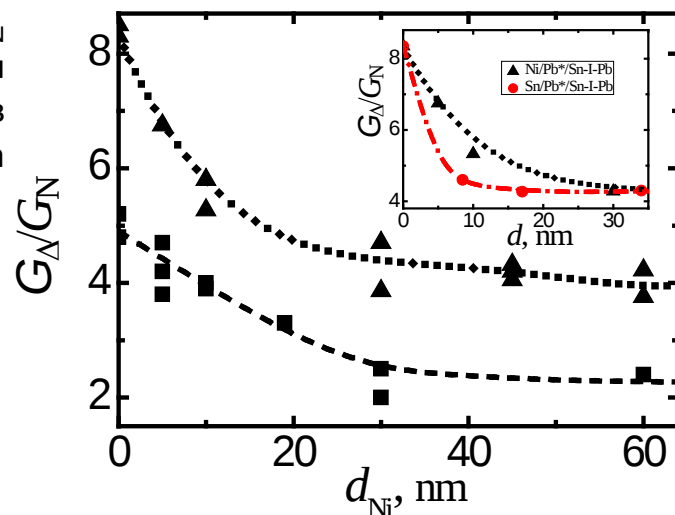
Заступник директора з наукової роботи
д.ф.-м.н., проф. Татаренко Валентин Андрійович

ЯВИЩЕ ВЗАЄМНОЇ КОНВЕРСІЇ СИНГЛЕТНОГО І ТРИПЛЕТНОГО НАДПРОВІДНОГО УПОРЯДКУВАННЯ НА ІНТЕРФЕЙСІ ФЕРОМАГНЕТИК/СИНГЛЕТНИЙ НАДПРОВІДНИК



ВАЗ контактів Ni/Pb''Sn-I-Pb
з різною товщиною плівки Ni

Зміна крутоти ВАЗ G_{Δ}/G_N
пов'язана зі зміною густини
квазічастинкових станів
синглетного надпровідника

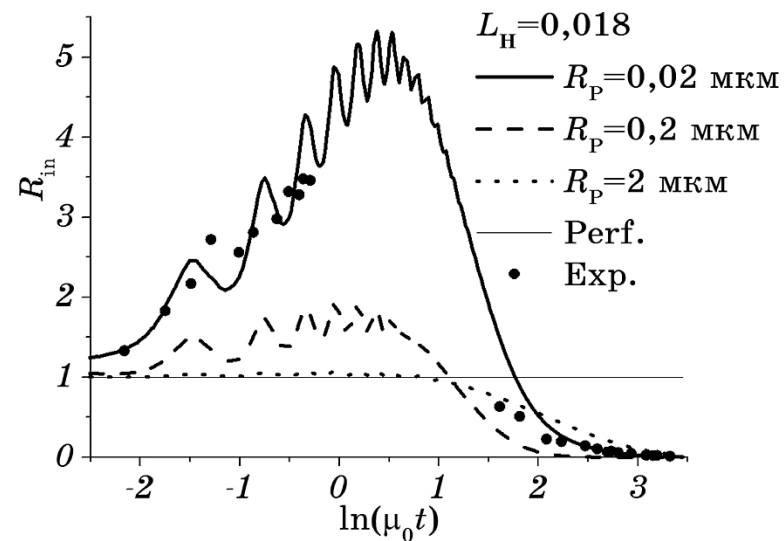
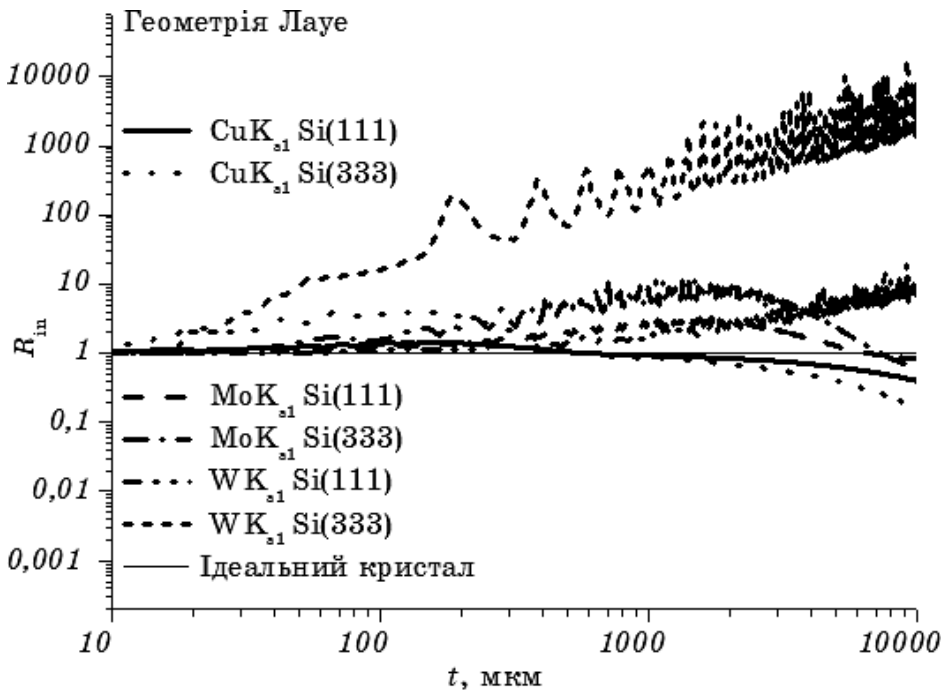


Встановлено аномальний вплив на густину квазічастинкових станів синглетного надпровідника віддалених шарів феромагнітних плівок (**зворотній ефект близькості**).

Використання виявленого явища відкриває перспективні шляхи створення кубітів, — основних елементів квантового комп'ютера, — на базі гетероструктур надпровідник/феромагнетик.



ЕФЕКТ КОНКУРЕНТНОГО ВПЛИВУ РІЗНИХ УМОВ ДИФРАКЦІЇ НА ПІДСИЛЕННЯ ПРОЯВУ ДЕФЕКТІВ У КАРТИНІ БАГАТОКРАТНОГО РОЗСІЯННЯ ТА НА ЙОГО ВИБІРКОВІСТЬ ДО ТИПУ ДЕФЕКТІВ (ВІДОМЧА)



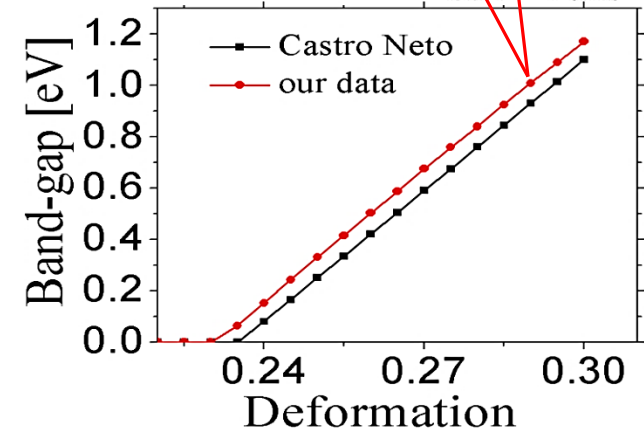
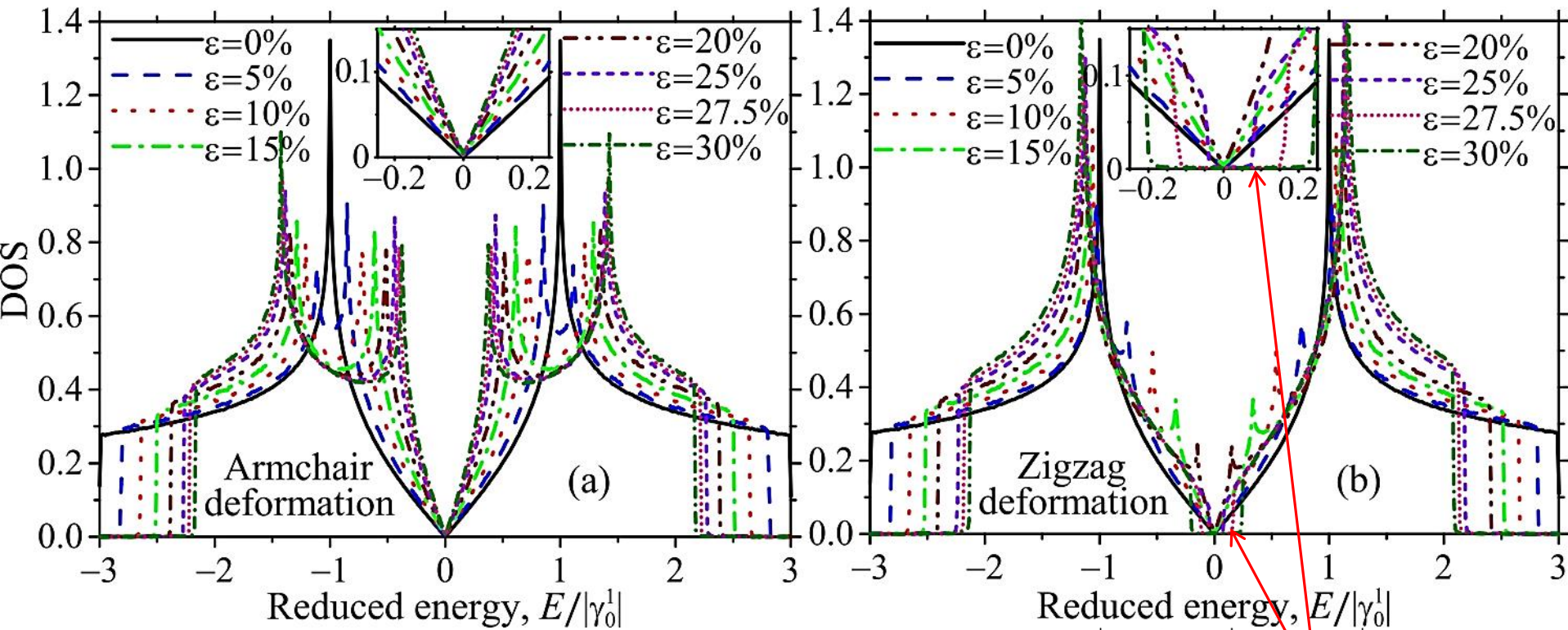
Вплив на залежність від ефективної товщини нормованої повної інтегральної інтенсивності динамічної дифракції й на її структурну чутливість типу дефектів та інших умов дифракції: довжини хвилі і рефлексів

Встановлено й описано теоретично ефект конкурентного впливу різних умов дифракції на підсилення за рахунок відкритої фазової структурної чутливості прояву дефектів різного типу у картині багаторазового розсіяння Рентгенових променів і на вибірковість цього підсилення до типу дефектів. Одержана в результаті додаткова можливість керування вибірковістю підсилення уможливила істотно підвищити інформативність запропонованих раніше принципово нових, з на порядки підвищеними чутливістю й експресністю, неруйнівних методів динамічної дифрактометрії багатопараметричних систем.

(В.В. Лізунов, В.Б. Молодкін)



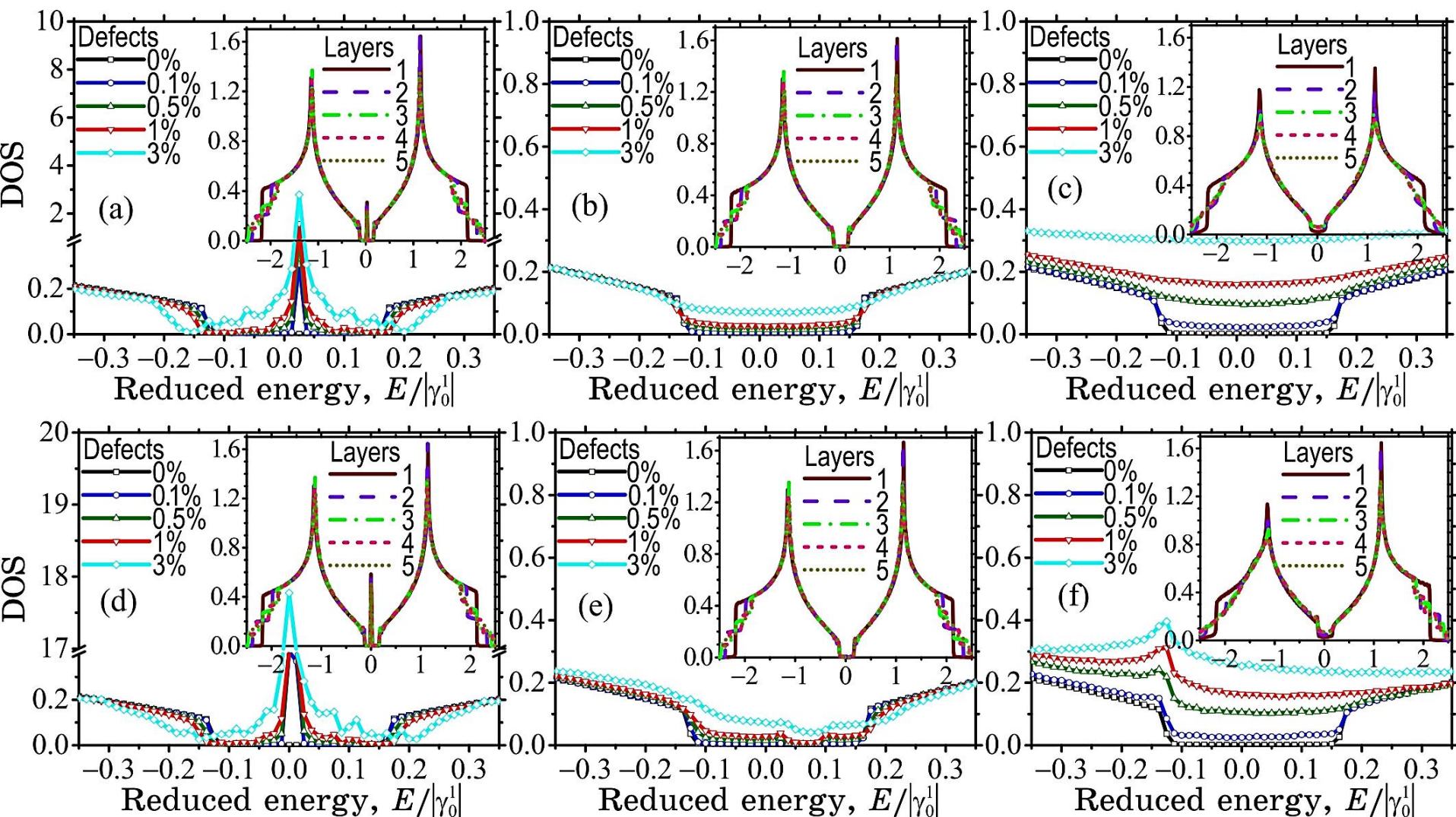
Густина станів (DOS) електронів для бездефектного шару графену за різних значень ($0 \leq \varepsilon \leq 32,5\%$) відносної деформації одновісним розтяганням



Порівняння чисельних результатів
(I.Yu. Sagaliov et al., *Eur. Phys. J. B*, **90**: 112, 2017)
з аналітичними*

*V.M. Pereira, A.H. Castro Neto,
Phys. Rev. B, **80**, 045401 (2009)

ГУСТИНА СТАНІВ (DOS) ЕЛЕКТРОНІВ ДЛЯ РОЗТЯГНУТИХ ($\varepsilon = 27,5\%$) ВЗДОВЖ «ЗИГЗАГОВОГО» НАПРЯМКУ ГРАФЕНОВИХ ШАРІВ З РІЗНИМИ (0–3%) ВМІСТАМИ РІЗНОГО ТИПУ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ



ГУСТИНА СТАНІВ ЕЛЕКТРОНІВ ДЛЯ РОЗТЯГНУТОГО ВЗДОВЖ «КРІСЕЛЬНОГО» АБО «ЗИГ'ЗАГОВОГО» НАПРЯМКІВ ГРАФЕНОВОГО ШАРУ ($0 \leq \varepsilon \leq 30\%$) З 3,125% ВПОРЯДКОВАНОЇ ДОМІШКИ

