

СОДЕРЖАНИЕ

Номер 3, 2018

Магнитные свойства слоев CaMnO_3 на поверхности (100) BaTiO_3 <i>С. М. Дунаевский, Е. К. Михайленко</i>	3
Спонтанное и вынужденное перемагничивание тонких пленок GaMnSb <i>А. А. Филатов, С. А. Костюченко, А. И. Дмитриев</i>	7
Исследование пластически деформированных TRIP-композитов методами нейтронной дифракции и малоуглового рассеяния нейтронов <i>Г. Д. Бокучава, Ю. Е. Горшкова, И. В. Папушкин, С. В. Гук, Р. Кавалла</i>	11
Влияние состояния поверхности и геометрии выходных участков стенок разрядной камеры на характеристики стационарного плазменного двигателя Морозова при его длительной работе <i>В. П. Ким, Р. Ю. Гнздор, Ю. М. Ермошкин, Д. В. Меркурьев, С. Ю. Приданников</i>	18
О проекте рефлектометра Реверанс на реакторе ПИК <i>В. Н. Забенкин, Л. А. Аксельрод, Г. П. Гордеев, Г. П. Диденко, И. М. Лазебник</i>	31
Диагностика влияния экзогенного фактора на формирование биоминеральной структуры твердых тканей зубов методами рентгеновской дифракции и спектроскопии комбинационного рассеяния света <i>Т. Ю. Киселева, М. В. Короленкова, Н. В. Старикова, А. А. Кобзев, А. С. Илюшин</i>	34
Фазообразование, структура и электропроводность керамики модифицированного галлата лантана <i>Г. М. Калева, И. П. Сухарева, А. В. Мосунов, Н. В. Садовская, Е. Д. Политова</i>	42
Влияние имплантации ионов Zn^+ на процесс зарядки сапфира электронным пучком <i>А. А. Татаринцев, В. В. Привезенцев, Э. И. Рау, А. В. Горячев</i>	47
Структурные и диэлектрические свойства кристаллов и пленок органического сегнетоэлектрика 2-метилбензимидазола <i>Е. В. Балашова, Б. Б. Кричевцов, Ф. Б. Свиначев, Н. В. Зайцева, Г. А. Панкова</i>	52
Особенности роста и свойств диэлектрических слоев и МДП-структур, полученных с применением анодного окисления InAs в электролите, содержащем ионы фтора <i>А. В. Артамонов, В. П. Астахов, И. Б. Варлашов, П. В. Митасов</i>	59
Микроструктура и износостойкость детонационных покрытий из СВС-порошков карбид титана – нихром различного фракционного состава <i>В. Ю. Ульяницкий, И. С. Батраев, О. П. Солоненко, А. Е. Чесноков</i>	67
Структурная трансформация поверхности алюминиевого сплава после гидроабразивного воздействия <i>Н. А. Терещенко, Т. И. Табатчикова, И. Л. Яковлева, Н. З. Гуднев</i>	74
Композитный материал на основе политетрафторэтилена и квазикристаллического наполнителя Al-Cu-Fe с ультранизким износом. Морфология, трибологические и механические свойства <i>М. Б. Цетлин, А. А. Теплов, С. И. Белоусов, С. Н. Чвалун, Е. А. Головкова, С. В. Крашенинников, Е. К. Голубев, Е. Б. Пичкур, П. В. Дмитрияков, А. И. Бузин</i>	83
Влияние кристаллографической ориентации подложки на зарождение, форму и развитие пор в кремнии при его электрохимическом травлении в растворах фтористоводородной кислоты <i>Е. Н. Абрамова, Ю. В. Сыров, А. М. Хорт, А. Г. Яковенко, Д. И. Прохоров</i>	93
Поведение расплава в вертикальном методе Бриджмена с низким аксиальным градиентом температуры <i>Г. Н. Кожмякин, В. К. Артемьев, В. И. Стрелов, В. С. Сидоров, Е. Н. Коробейникова</i>	98
Нагрев тонкой кристаллической мишени при прохождении коротких пучков электронов высокой энергии <i>А. А. Бабаев, А. С. Гоголев</i>	106

CONTENTS

No. 3, 2018

A simultaneous English language translation of this journal is available from Pleiades Publishing, Inc. Distributed worldwide by Springer. *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques* ISSN 1027-4510.

Magnetic Properties of Thin CaMnO ₃ Layers on BaTiO ₃ (100) Surface <i>S. M. Dunaevsky, E. K. Mikhailenko</i>	3
Spontaneous and Induced Magnetization Reversal in GaMnSb Thin Films <i>A. A. Filatov, S. A. Kostyuchenko, A. I. Dmitriev</i>	7
Investigation of Plastically Deformed TRIP Composites by Neutron Diffraction and Small Angle Neutron Scattering Methods <i>G. D. Bokuchava, Yu. E. Gorshkova, I. V. Papushkin, S. Guk, R. Kawalla</i>	11
Influence of the Surface State and Geometry of Wall Output Sections in Discharge Chamber on Morozov Stationary Plasma Thruster Characteristics during its Long-Term Operation <i>V. P. Kim, R. Yu. Gnizdor, Yu. M. Yermoshkin, D. V. Merkurev, S. Yu. Pridannikov</i>	18
About the Project of Modernization and Improvement of the Reflectometer Reverans at the PIK Reactor <i>V. N. Zabenkin, L. A. Axelrod, G. P. Gordeev, G. P. Didenko, I. M. Lazebnik</i>	31
Diagnostics of the Exogenous Factor Influence on the Formation of the Biomineral Structure of Teeth Solid Tissue by X-Ray Diffraction and Raman Spectroscopy <i>T. Yu. Kiseleva, M. V. Korolenkova, N. V. Starikova, A. A. Kobzev, A. S. Ilyushin</i>	34
Phase Formation, Structure and Conductivity of Modified Lanthanum Gallate Ceramics <i>G. M. Kaleva, I. P. Sukhareva, A. V. Mosunov, N. V. Sadovskaya, E. D. Politova</i>	42
Effect on Process of Sapphire Charging under Electron Beam Irradiation Implantation of Zn ⁺ Ions <i>A. A. Tatarintsev, V. V. Privezentsev, E. I. Rau, A. V. Goryachev</i>	47
Structural and Dielectric Properties of Organic Ferroelectric 2-Methylbenzimidazole <i>E. V. Balashova, B. B. Krichevtsov, F. B. Svinarev, N. V. Zaitseva, G. A. Pankova</i>	52
Features of Growth and Properties of Dielectric Layers and MIS Structures Obtained using InAs Anodic Oxidation in an Electrolyte Containing Fluoride Ions <i>A. V. Artamonov, V. P. Astakhov, I. B. Varlashov, P. V. Mitasov</i>	59
Microstructure and Wear-Resistance of Detonation Coatings Obtained from Titanium Carbide–Nichrome SHS Powders Having Different Particle Sizes <i>V. Yu. Ulianitsky, I. S. Batraev, O. P. Solonenko, A. E. Chesnokov</i>	67
Structural Transformation of Al Alloy Surface after Hydroabrasive Impact <i>N. A. Tereshchenko, T. I. Tabatchikova, I. L. Yakovleva, N. Z. Gudnev</i>	74
Composite Material Based on Polytetrafluoroethylene and Al–Cu–Fe Quasicrystal Filler with Ultralow Wear: Morphology, Tribologic, and Mechanical Properties <i>M. B. Tsetlin, A. A. Teplov, S. I. Belousov, S. N. Chvalun, E. A. Golovkova, S. V. Krashennnikov, E. K. Golubev, E. B. Pichkur, P. V. Dmitryakov, A. I. Buzin</i>	83
Influence of Wafer Crystallographic Orientation on the Nucleation, Configuration and Formation of Pores in Si During Electrochemical Etching in HF Solutions <i>E. N. Abramova, A. M. Khort, A. G. Ykovenko, Y. V. Syrov, D. I. Prohorov</i>	93
Melt Behaviour in the Bridgman Vertical Method with Low Axial Temperature Gradient <i>G. N. Kozhemyakin, V. K. Artyemyev, V. I. Strellov, V. S. Sidorov, E. N. Korobeynikova</i>	98
Heating of the Thin Crystal Target at the Passage of High-Energy Short Electronic Bunches <i>A. A. Babaev, A. S. Gogolev</i>	106

УДК 538.915

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СЛОЕВ CaMnO_3 НА ПОВЕРХНОСТИ (100) BaTiO_3

© 2018 г. С. М. Дунаевский^{1, 2, *}, Е. К. Михайленко¹¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
195251 Санкт-Петербург, Россия²Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”
Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова,
188300 Санкт-Петербург, Россия*E-mail: smd2000@mail.ru

Поступила в редакцию 20.07.2017 г.

Методом теории функционала плотности выполнены “ab-initio” расчеты электронной структуры гетероперехода (001) между кубическими перовскитами CaMnO_3 и BaTiO_3 для различных вариантов магнитного упорядочения манганита кальция. В статье рассмотрены случаи ферромагнитного и антиферромагнитного упорядочения А-типа. Сравнение полных энергий структур показало, что наиболее выгодным является антиферромагнитное упорядочение в CaMnO_3 . В ферромагнитном состоянии все исследуемые структуры являются полуметаллическими ферромагнетиками (“half-metallicferromagnets”).

Ключевые слова: ab-initio, манганиты, ферромагнетики, гетеропереходы, магнитное упорядочение, полуметаллы.

DOI: 10.7868/S0207352818030010

ВВЕДЕНИЕ

Известно, что оксиды переходных элементов с кристаллической структурой перовскита (манганиты, кобальтиты и др.) могут иметь различные типы магнитного упорядочения, которые для объемных структур хорошо изучены экспериментально и теоретически [1–2]. Магнитные свойства различных поверхностей, ультратонких пленок, гетероструктур и сверхрешеток манганитов существенно отличаются от магнитных характеристик объема. В частности, на свободных поверхностях магнетиков и гетерограницах между магнитными и немагнитными оксидами экспериментально обнаружено существование “мертвых” областей (“deadlayers”), т.е. областей с равной нулю намагниченностью на магнитных атомах, критическая толщина которых составляет $\sim 1\text{--}5$ нм. [3–6]. Наличие таких ультратонких немагнитных областей можно объяснить тем, что локальная намагниченность тождественно равна нулю, или возникновением антиферромагнитного упорядочения локальных атомных магнитных моментов марганца на различных подложках (SrTiO_3 , BaTiO_3 , Si и др.).

В настоящей работе представлены результаты “ab-initio” расчетов магнитных свойств гетероперехода между CaMnO_3 (СМО) и близким ему по структуре BaTiO_3 (ВТО). На первом этапе

были рассмотрены только случаи ферромагнитного (ФМ) упорядочения и антиферромагнитного (АФМ) упорядочения А-типа.

МЕТОД РАСЧЕТА

В работе представлены результаты расчетов магнитных свойств ультратонких пленок манганита кальция и гетероперехода $\text{CaMnO}_3/\text{BaTiO}_3$, полученные в рамках метода псевдопотенциала, реализованного в пакете Quantum ESPRESSO [7]. В этом методе самосогласованным образом определяются спектр $E(k)$, полная и локальные плотности состояний и полная энергия системы для различных коллинеарных магнитных конфигураций. В приближениях LSDA и LSDA+U для функционала обменно-корреляционной энергии использовалось обобщенное градиентное разложение (GGA). Для представления волновых функций валентных электронов учитывались плоские волны с энергией до 200 Ry. В качестве псевдопотенциалов использовались ультратонкие псевдопотенциалы Вандербида. Для вычисления полных энергий и магнитных моментов использовалось разбиение зоны Бриллюэна на $7 \times 7 \times 2$ точек по методу Monkhorst-Pack. Начальная конфигурация валентных электронов имела вид: $2s^2p^4$ (O), $3s^2p^63d^54s^2$ (Mn), $3s^2p^64s^2$ (Ca). Вычисления

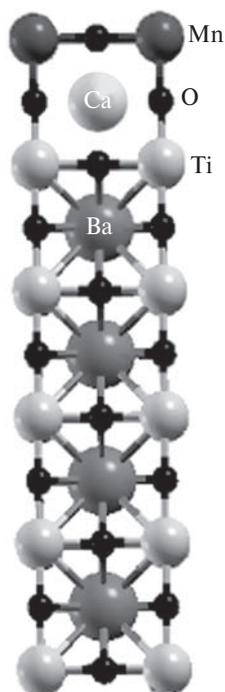


Рис. 1. Суперячейка СМО/ВТО(5). Верхний слой соответствует СМО, остальные – ВТО. Атомы в центре кубов – Ca (для СМО) и Ba (для ВТО). В вершинах – Mn (ВТО) и Ti (СМО), между вершинами – O.

выполнялись для суперячеек, моделирующих объем, свободных поверхностей CaMnO_3 , а также гетероструктур $\text{Ca}_n\text{Mn}_{n+1}\text{O}_{3n+2}/\text{Ba}_m\text{Ti}_{m+1}\text{O}_{3m+1}$ ($n = 1-4$, $m = 1-6$) с поверхностью раздела (100), отделенных друг от друга вдоль оси Z вакуумным промежутком ~ 25 Å. В дальнейшем все структуры обозначим

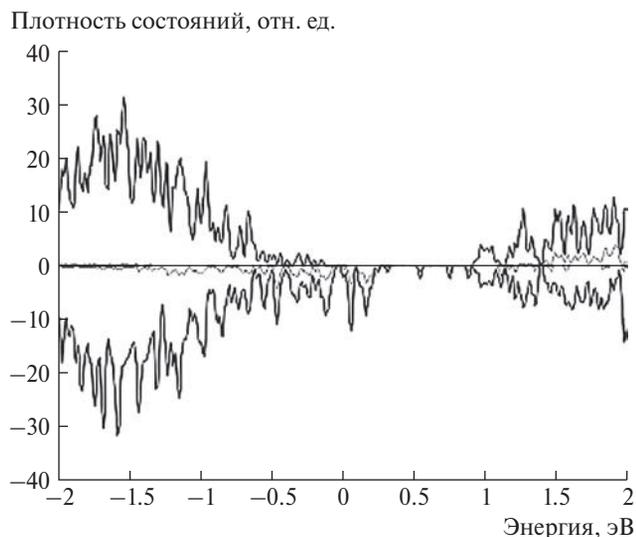


Рис. 2. Полная плотность состояний (DOS) и локальная плотность состояний (LDOS), атомов Mn для СМО/ВТО(5). Положение уровня Ферми гетероструктуры принято за начало отсчета.

СМО(N)/ВТО(M) и ограничимся значениями $M = 5$, $N = 1, 2, 3$. Суперячейка для СМО/ВТО(5) представлена на рис. 1. Для упрощения вычислений гетеропереход моделировался кубической решеткой перовскита с постоянной решетки BaTiO_3 (3.905 Å), которая несколько больше постоянной решетки CaMnO_3 . Реконструкция интерфейса, как и возникновение дислокаций несоответствия в работе, не рассматривалась.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для одного слоя СМО на пяти слоях ВТО полная энергия, приходящаяся на ячейку, равнялась 1883.566 Ry. Вычисленное значение локального магнитного момента на атомах марганца составило $3.47 \mu_B$, тогда как полная намагниченность в ячейке $M_{\text{tot}} = 4.00 \mu_B$. Отметим, что значение магнитного момента атомов Mn в слое СМО на подложке было выше, чем в случае объема ($2.42 \mu_B$) и свободно-го монослоя ($2.69 \mu_B$ [9]), что может быть объяснено использованием постоянной решетки ВТО. На рис. 2 приведены: плотность состояний (DOS) гетероструктуры СМО/ВТО(5), а также локальная плотность состояний (LDOS) Mn. Видно, что ферромагнитная структура демонстрирует полную поляризацию состояний вблизи энергии Ферми.

Для гетероструктуры СМО(2)/ВТО(5) были рассчитаны структуры, соответствующие ферро- и антиферромагнитным упорядочениям в СМО. Наименьшей энергией, приходящейся на ячейку, обладает антиферромагнитная структура с минимальным полным магнитным моментом ($E = -2152.635$ Ry для АФМ-структуры, $E = -2152.631$ Ry для ФМ, разница составляет 0.04 эВ). Данные распределения

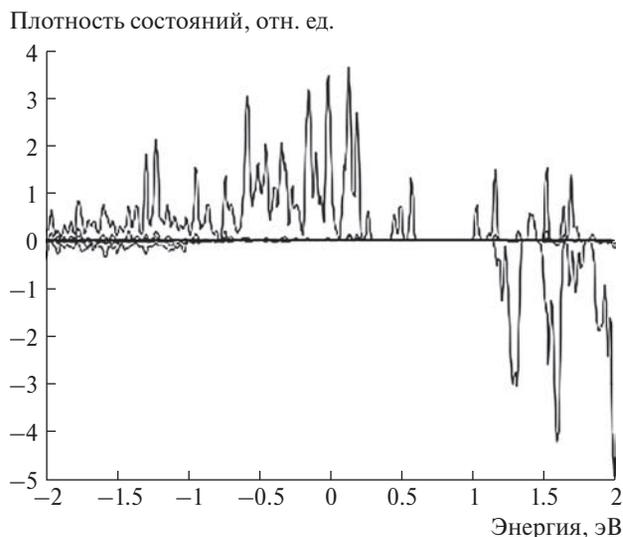


Рис. 3. LDOS атомов Mn для ФМ упорядочения в СМО(2)/ВТО(5).