

10. Shang H., Cao G. Template-based synthesis of nanorod or nanowire arrays // In book: Springer handbook of nanotechnology, 2010, P. 169-186.

ӘӨЖ 29.19.22

ОРТОРОМБИЯЛЫҚ SrRuO₃ КРИСТАЛДЫ ҚҰРЫЛЫМЫ ТУРАЛЫ DFT ФУНКЦИОНАЛДЫҒЫН БАҚЫЛАУ

Сатанова Б.М.¹, Жомартова А.А.²

Clever_s.balzhan@mail.ru

¹Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялархалықаралық кафедрасы докторанты, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

²Өл-Фараби атындағы ҚҰУ 3-курс студенті, Алматы, Қазақстан

Ғылыми жетекшісі – Абуова Ф.У.

SrRuO₃-бұл пайдалы электрлік және магниттік қасиеттері ба, жылу және химиялық тұрақтылығы, атомдық тегістігі үшін жоғары бағаланатын перовскит типті металл ферромагнит тік рутенаты тор беті және функционалдық оксидтердің кең спектрін жақсы сәйке скеледі [1]. Соңғы жылдары SrRuO₃ күрделі оксид гетероструктуралары үшін ең танымал эпитаксиалды электродқа айналды және ол ферроэлектрикте, магнитокалорикте және магнитоэлектрика да қолданылады [2-5]. Сонымен қатар, бұл супер өткізгіштер мен спинтроника қауымдастықтарының назарын аударды[6-8]. Осы үлкен қызығушылықты көрсету,соңғы екі онжылдықта физика, материалтану да SrRuO₃қосымшаларына қатысты 1000-нан астам жұмыс жарияланды [1]. Бірақ, зерттелгеннің бәріне қарамастан, кейбір мәселелер әлі де бар толығымен шешілмеген. Қоршаған орта жағдайында көлемді SrRuO₃ орторомб (P bnm) құрылымында кристалдана ды ал қызған кезде фазалы қауысулар тетрагональға өтеді (820 К-де I4/mkm), содан кейін 950 К текше (Pm3m) жүйелері [9]. Алдыңғы бірнеше теориялық зерттеулерді табуға болады [10-16], онда негізгі күйдің орторомбиялық ұрылымы жергілікті тығыздықты жуықтау (LDA), жалпыланған градиент жуықтауы (GGA), гибридтік функционалдылық және тіпті Lda + U немесе GGA+ U жұмыс шеңберінің бөлігі ретінде тығыздық функциясы теориясын (DFT) есептеу арқылы көбейтіледі. Енді бұл білімнің айқын алшақтығы сияқты, өйткені геометрияны оңтайландырудың маңыздылығы жақында тәжірибелік серпілі сарқылы жаңа деңгейгекөтерілді сыртқы қысымды қолдану арқылы бөлме температурасын да srRuO₃ тетрагональды және оноклиндік фазаларды тұрақтандыру [17], оттегі бос орындарын енгізу [18, 19] және сығымдауды қолдану және созылу кернеулері. Бұл зерттеуде біз Кристалл құрылымын жүйелі түрде зерттедік SrRuO₃ P bnm және нәтижелерді төмен температуралы эксперименттер деректерімен салыстырдық. Теориялы құрғыдан біз Якоб баспалдақтарының үш сатысын енгіздік DFT [33] – бірінші, екінші және төртінші-LDA, GGAs және гибридті қолдану арқылы қатты күйдегі есептеу үшін кеңінен қолданылатын функционалдар. Баспалдақтың үшінші сатысы мета газдарына арналған, олар өз кезегінде кинетикалық энергияның тығыздығын қосымша ретінде қарастырады айнымалы ескерілмеді, өйткені revTPSS сияқты қатты заттарға арналған Мета-газдар[34], көптеген танымал DFT кодтарында әлі де жоқ. Біз бөлді күш санатқа арналған құрылымдық параметрлер, атап айтқанда: (А) тор константалары және көлемі, (б) бұрыштар RuO₆бішіндегі ішкі бұрыштар мен байланысқа шықтықтары. Бір жағынан, тор константаларымен көлемі өте маңызды екендігі белгілі материалға тән көптеген қасиеттер үшін- фонондардың жиілігі, серпімді тұрақтылар, ферромагнетизм және құрылымдық фазалық ауысулар мүмкіндігі [35, 36] – сондықтан ерекше назар аударуға лайық. Екінші жағынан, бұл октаэдрлік SrRuO₃ жұқа қабықшаларындағы айналу және иілу оларды анықтаудың маңызды факторы болып табылады функционалдық мүмкіндіктер және ықтимал қолдану [19, 23, 25, 28]. Эпицентрлік тұрақтандырылған тетрагональды құрылымдарды октаэдрлік айналусыз, бірақ октаэдрлі қайналусыз

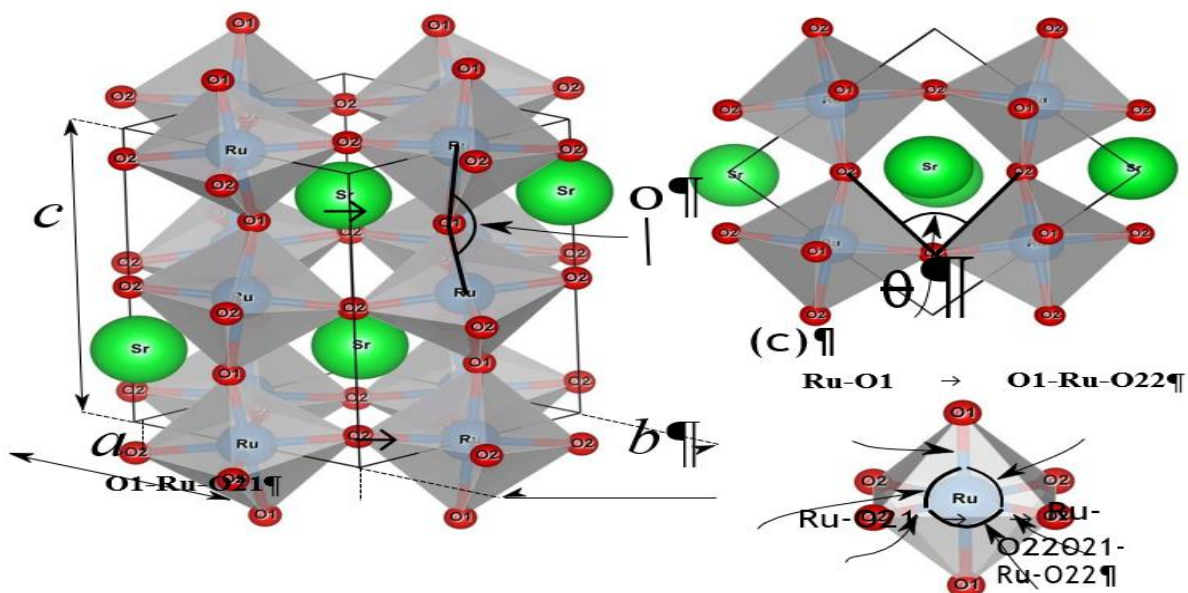
эксперименттік тану оның орнына енгізілген деформациялар [26, 27] ішкі параметрлерге назар аударуға итермелейді октаэдр. Бұл жұқа пленкалардың лектрлік және магниттік қасиеттері анықталғандықтан деформациядан туындаған октаэдрлік деформациялармен тығыз байланысты көрсете отырып, біз RuO_6 негізгі күйінің геометриясын ойнату кезінде Есептеу бөлшектері

Төмен температуралы орторомб SrRuO_3 ферромагниттік күйі модельденді CRYSTAL14 [60] кодын қолдана отырып, Гаусс орбитальдарының Атом орталығы мен сызықтық комбинациясын қолдана отырып. Кіші ядросы бар Хей-Вадтпсевдо потенциалдары [61] сипаттау үшін пайдаланылды

Ішкі қабықтың электрондары ($1s22s22p63s23p63d10$) SR және RU атомдарынан. Базистік жиынтықтың валенттік бөлігі $\text{Sr}(4s24p65s2)$ зерттеу деналынды SrTiO_3 [62], ал валенттілік функциялары үшін Ru ($4s24p64d75s1$) біздің бұрынғы SrRuO_3 стехиометриялық емес жұмысымыздан алынды [63]. О атомына келетін болсақ, CaCO_3 зерттеуінен d функциясының Қос жиынтығы бар толық электронды негіз жиынтығы қолданылды [64]. Жоғарыда аталған барлық негізгі жиынтықтар интернетте де қол жетімді кітапханада базалық жиынтығын CRYSTAL [6]. Техникалық параметрлердің көпшілігі үшін геометрияны толық оңтайландыру кезінде әдепкі мәндер таңдалды, толыққпаратты CRYSTAL14 пайдаланушы нұсқаулығынан табуға болады [6].

Алайда, толық энергияның конвергенция шегін анықтайтын параметрлер және биэлектрондық интегралдар үшін кесу критерийлер ісәйкесінше (8) және (16) дейін күшейтілді.

Сонымен қатар, энергетикалық градиенттер мен ядролық ығысулардың рұқсат етілген орташа квадраттық мәндері сәйкесінше жоғары мәндерге белгіленді: Атом бірліктерінде 0,00006 және 0,00012. Өзара кеңістік сығу коэффициенті бар тұрақты ішкі торға сәйкес таңдалды, нәтижесінде Бриллюэннің бірінші қайтымсыз аймағында 125 тәуелсіз к нүктелері пайда болды. Осым ақалада PW бастапқы функционалдығының орнына атап өткіміз келеді mb1wc деп аталатын модификацияланған b1wc есептеулері үшін PBE шеңберінен корреляциялық бөлік алынды. Осы уақытта LDA алмасуы VWN корреляциясымен біріктірілді [69], ал PBE, SOGGA және WC алмасу функциялары корреляция мен қолданылды PBE бөлігі. PBESOL алмасу функциясы корреляциялық бөлікпен қолданылды PBEsol және PBE. Соңғы комбинация үшін PBEsol PBE жеке белгісі енгізілді.



Сурет-1 - Кристалдықұрылымның (Pbnm) SrRuO₃, (B) оның жоғарғы көрінісі және (B) октаэдрлік параметрлері. O1 және O2 белгілері сәйкесінше RuO₆ октаэдрлерінің апикальды және жалпақ позицияларындағы оттегі атомдарын білдіреді. Суреттер VESTA визуализациябағдарламасы арқылы жасалды.

Кесте-1 - Есептелген құрылымдық параметрлер және орторомбиялық магниттік момент (Pbnm) SrRuO₃ сәйкесінше 1,5 К және 10 К тәжірибелік деректер мен салыстырғанда [79]. A, b және c тор тұрақтылары RU-O1, Ru-O21 және Ru-O22 байланыс қашықтықтары мен бірге а-да көрсетілген,

	DA	PBPBE Esol	PBEs o ^{PBE}	OG GA	WC	mB1 WC	PB E0	HS E06	HSE sol	Expt.
A	5.53 0 (0.6 4)	5.645 4	5.577 (0.20)	5.568 (0.04)	5.565 (0.01)	5.58 (0.2 6)	5.555 (0.20 7)	5.55 (0.1 3)	5.56 (0.0 2)	5.534 (0.58)
B	5.49 0 (0.7 6)	5.625 3	5.549 (0.31 5)	5.538 (0.10)	5.534 (0.04)	5.55 (0.3 8)	5.512 (0.36 6)	5.58 (0.8 2)	5.57 (0.7)	5.503 (0.52)
C	7.78 7 (0.7 4)	7.977 0	7.871 (0.33 9)	7.858 (0.16)	7.854 (0.11)	7.87 (0.4 1)	7.831 (0.18 9)	7.91 (0.8 0)	7.91 (0.9)	7.839 (0.07)
V	236. 41 (2.1 3)	252.9 4	243.5 8	242.30 (0.31)	241.9 (0.14)	244. 08 (1.0 4)	239.78 (0.73 8)	245.245. 3940 (1.5 9)	238.7 5	241.56 (1.16)
φ	159. 31 (1.6 6)	159.2 6	159.7 6	159.98 (1.24)	159.9 (1.25)	159. 58 (1.4 9)	161.24 (0.46 8)	159.159. 1071 (1.5 1)	161.0 9	161.99 (0.56)

θ	75.0 8	74.274.28 0	74.43	74.40	74.2	76.20	74.7	75.1	76.18	77.31
	(2.8 8)	(4.0 3)	(3.92)	(3.73)	(3.76)	(4.0 1)	(1.43)	(3.3 4)	(2.7 8)	(1.46)
Ru-O1	1.97 9	2.021.999 6	1.995	1.994	2.00	1.984	2.01	2.01	1.987	1.986
	(0.3 4)	(2.0 0)	(0.65)	(0.45)	(0.40)	(0.7 6)	(0.08)	(1.3 2)	(1.2 3)	(0.06)
Ru-O21	1.98 3	2.032.004 0	1.999	1.998	2.00	1.986	1.97	1.97	1.961	1.986
	(0.1 3)	(2.2 4)	(0.89)	(0.66)	(0.61)	(0.9 8)	(0.02)	(0.3 6)	(0.3 3)	(1.24)
Ru-O22	1.98 1	2.022.001 8	1.997	1.996	2.00	1.984	2.02	2.02	1.997	1.987
	(0.3 0)	(2.0 3)	(0.70)	(0.49)	(0.44)	(0.7 9)	(0.16)	(1.8 1)	(1.6 5)	(0.48)
O1-Ru- O21	90.2 0	90.090.16 4	90.20	90.21	90.1	90.15	90.9	90.8	90.69	90.33
	(0.1 5)	(0.3 2)	(0.20)	(0.15)	(0.14)	(0.2 2)	(0.20)	(0.7 2)	(0.6 1)	(0.39)
O1-Ru- O22	90.4 6	90.290.33 5	90.38	90.39	90.3	90.39	89.8	90.0	90.51	90.27
	(0.2 1)	(0.0 2)	(0.06)	(0.12)	(0.13)	(0.0 7)	(0.14)	(0.4 9)	(0.2 7)	(0.26)
O21-Ru- O22	91.3 8	91.191.19 7	91.21	91.21	91.2	91.24	90.7	90.8	91.21	91.07
	(0.3 5)	(0.1 2)	(0.14)	(0.16)	(0.16)	(0.1 6)	(0.19)	(0.3 5)	(0.2 1)	(0.15)
μ	1.70	1.96	1.92	1.93	1.93	1.94	2.00	2.00	2.00	1.63
MARE	1.07	2.34	0.42	0.15	0.08	0.52	0.37	0.88	0.81	0.58
μ										
MARE ₂	2.27	2.86	2.65	2.49	2.50	2.75	0.95	2.56	2.09	1.01
MARE ₃	0.25	1.12	0.44	0.34	0.31	0.50	0.13	0.84	0.72	0.43
MARE	0.86	1.82	0.80	0.64	0.60	0.88	0.34	1.14	0.98	0.58

T

V көлемі A3, ϕ , θ , O1-Ru-O21, O1-Ru-O22 және O21-Ru-O22 бұрыштары көрсетілген магниттік момент МКБ-да формула бірлігіне көрсетілген. MARE (%) орташа абсолютті салыстырмалықа теңі білдіреді: mare1 A, b, c және V үшін бағаланады ; ϕ және θ үшін mare2; Ru-O1, Ru-O21, Ru-O22, O1-RU-O21, O1-Ru-O22 және O21-RU-O22 үшін MARE3; MARET барлық 12 құрылымдық параметрлердің жалпы мәнін білдіреді. Жақшадағысандар(%) әрқұрылымдық параметр үшінә бсолютті салыстырмалы қателерді білдіреді. Магниттік момент 1,5 К тәжірбелік геометриямен есептеулерден алынады.

Қорытынды

Бұл жұмыста біз орторомбиялық SrRuO₃ кристалды құрылымын DFT жуықтаудың үш отбасының: LDA, GGAs және будандардың функционалды жиынтығын қолдана отырып зерттедік. Есептелген тепе-теңдік құрылымдық параметрлері – (а) тор константалары және көлемі, (б) көлбеу және бұрылу бұрыштары және (в) RuO₆ октаэдрларының ішіндегі ішкі бұрыштар мен байланыс қашықтықтары-төмен температуралы эксперименттердің

деректерімен салыстырылды. Біздің нәтижелерді талдауымыз бірнеше маңызды ойларды бөліп көрсетуге мүмкіндік береді.

Біріншіден, PBE функционалдығы барлық қатысушылар арасында ең нашар болып көрінеді, сондықтан оны SrRuO₃ геометриясын оңтайландырудың соңғы нұсқасы ретінде қарастырған жөн. Екіншіден, айырбастау үшін екінші ретті GE тығыздығын қалпына келтіру-қайтақаралған PBESOL, SOGGA және WC GGAs құрамына кіреді-PBE тәсілінің жұмысын, әсіресе тор мен көлем тұрақтылары үшін тиімді жақсартады.

Үшіншіден, HF алмасу бөлігін қосу PBE нәтижелеріне қатысты SrRuO₃ кристалды құрылымына да оң әсеретеді. Сонымен қатар, нақты алмасудың LR бөлігінің HSE түрін тексеру гибридтік құрылыммен қамтамасыз етілген жақсартудың маңызды құрамдас бөлігі емес.

Төртіншіден, ақырында, қайта қаралған GGAs-тің гибридтсхема мен үйлесуі сыртқы және ішкі және құрылымдық параметрлерді бір уақытта дәл сипаттау үшін ең қолайлы құрал болып көрінеді. Алайда, стандартты 25% - дан аз жоғары жиілікті алмасу көлеміне артықшылық беру керек. Осы тұжырымдарға сүйене отырып, біз эксперименттік бақыланатын SrRuO₃ фазаларын одан әрі теориялық модельдеу үшін бір неше ұсыныстар ұсына аламыз. Егерз ерттеу тор тұрақтылары мен және көлемі меншектелген болса, олардың әсерлі өнімділігі мен айтарлықтай аз есептеулеріне байланысты қатты заттарға (PBESOL / PBEsol^{PBE}, SOGGA, WC) қайта қаралған GGAs-қамүмкіндік беру керек.

Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. Y. Liu. Van der Waals Heterostructures and Devices //et.al. Nature ReviewsMaterials.-2016. –Vol.1, -P.16042 .
2. R. Roldan . Theory of 2D crystals: graphene and beyond// et.al. Chem. Soc. Rev. -2017.-Vol. 4387.-P.46.
3. A. S. Mayorov. Interaction-Driven Spectrum Reconstruction in Bilayer Graphene //etal. Science.-2011. –Vol.333,-P. 860.
4. Y. Cao.Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices // etal., Nature -2018.-Vol.556,-P. 43
5. Y. Cao.Correlated insulator behaviour at half-filling in magic-angle graphene superlattices // et al. Nature. -2018.-Vol.556, -P.80

ӘӨЖ 29.19.22

АЦЕТОН ГАЗЫН АНЫҚТАУ ҮШІН JANUS ӨТПЕЛІ МЕТАЛДЫН ДИХАЛКОГЕНИДТІ МОНОҚАБАТЫН КОМПЬЮТЕРЛІ ЕСЕПТЕУ

Сейтжапар Н.Г¹, Хамитұлы А.²

Seitzhapar13@gmail.com

¹Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар халықаралық кафедрасы докторанты, Нұр-Сұлтан, Қазақстан.

²Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ Техникалық физика кафедрасы магистранты, Нұр-Сұлтан, Қазақстан.

Ғылыми жетекшісі- Ф.У.Абуова

Соңғы уақытта Janus 2D материалдары деп аталатын 2D материалдарының жаңа класы бірте-бірте айтарлықтай қызығушылық тудырды, себебі Janus 2D материалдарыныңдәстүрлі 2D материалдарынан ерекшеленетін тамаша қасиеттері бар. Janus 2D материалдары 2D материалдарының екі жағында екі түрлі қыры бар асимметриялық құрылымдары бар материалдар болып табылады. Чжоу және т.б. модельдеген графон деп аталатын бірінші