

Учреждение образования
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАТИКИ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ

УДК 537.611.2

БАРАНОВА
Мария Сергеевна

**МАГНИТНЫЙ ПОРЯДОК И ОБМЕННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ
В ДВУМЕРНЫХ АТОМНЫХ СТРУКТУРАХ
ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВСКОГО ТИПА И ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ
ZnO С ПЕРЕХОДНЫМИ ЭЛЕМЕНТАМИ**

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

по специальности 05.16.08 – Нанотехнологии и наноматериалы (по отраслям)

Минск 2022

Научная работа выполнена в учреждении образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».

Научный руководитель **Стемпичкий Виктор Романович**, кандидат технических наук, доцент, проректор по научной работе учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».

Официальные оппоненты: **Прищепя Сергей Леонидович**, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры защиты информации учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»;

Пушкарчук Александр Леонидович, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник государственного научного учреждения «Институт физико-органической химии Национальной академии наук Беларуси».

Оппонирующая организация Научно-исследовательское учреждение «Институт ядерных проблем» Белорусского государственного университета.

Защита состоится 24 ноября 2022 г. в 14:00 на заседании совета по защите диссертаций Д 02.15.07 при учреждении образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники» по адресу: 220013, г. Минск, ул. П. Бровки, 6, корп. 1, ауд. 232, e-mail: dissovet@bsuir.by, тел. +375172938989.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».

Автореферат разослан « 21 » октября 2022 г.

Ученый секретарь
совета по защите диссертаций
доктор физико-математических наук доцент



С. К. Лазарук

ВВЕДЕНИЕ

Технологические лидеры производства современных электронных компонентов (Intel, TSMC и пр.) в последних годовых отчетах отмечают, что разработка нового поколения устройств спинтроники является приоритетным направлением стратегического развития микро- и наноэлектроники. Ожидается, что глобальный рынок магнитной памяти будет расти со средним годовым темпом роста 28,71 % и достигнет размера рынка в 5 млрд дол. США в 2026 году. При этом в 2019 году данный показатель составил более 800 млн дол. США.

Прогресс в области серийного производства спинтронных устройств осуществляется за счет внедрения электронных компонентов, которые функционируют на новых физических принципах. Работа современных устройств спинтроники основана на принципах туннельного магнитосопротивления, эффектах управления направлением намагниченности материала с помощью спин-поляризованного тока и спин-орбитального взаимодействия. Реализация таких устройств возможна при условии использования низкоразмерных магнитных систем, то есть атомных структур, в которых магнитное взаимодействие ограничено по одному или более пространственных направлений.

Проблемой низкоразмерного магнетизма является сохранение дальнего магнитного порядка при конечной температуре. Упорядоченное пространственное расположение магнитных моментов атомов возможно, когда значение энергии магнитного взаимодействия атомной структуры превышает значение характерной энергии тепловых флуктуаций $k_B T$. Решению этой проблемы будет способствовать исследование особенностей низкоразмерных магнитных систем, которые приводят к повышению энергии магнитного взаимодействия атомной структуры.

Таким образом, актуальным является решение задач, направленных на установление и теоретическое обоснование механизмов формирования магнитного порядка в атомных структурах, где магнитное взаимодействие ограничено по одному или более пространственных направлений, а именно в двумерных магнитных системах, формирующихся в атомных структурах с общей формулой MAX_3 ($M = Cr$; $A = Ge, Si$; $X = S, Se, Te$), кавизиодномерных и квазинульмерных магнитных системах, формирующихся замещением атомов Zn атомами переходных элементов (Cr, Mn, Fe, Co, Ni) в объемной атомной структуре ZnO, на основе данных исследования их состава, структуры, магнитных и электронных свойств в рамках многоуровневого подхода расчета магнитных параметров.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Связь работы с научными программами, темами

Работа выполнялась в рамках обеспечения решения задач Государственных программ научных исследований (ГПНИ), договоров с БРФФИ и гранта Министерства образования: задание 2.53 «Разработка методов исследования из первых принципов электрофизических характеристик структур на основе халькогенидов переходных металлов, используемых в качестве элементов конструкции приборов нанoeлектроники и спинтроники, микро- и нанoeлектромеханических систем (МЭМС и НЭМС), сенсоров» ГПНИ «Физическое материаловедение, новые материалы и технологии», подпрограмма «Наноматериалы и нанотехнологии», 2016–2018, № ГР 20164228; задание 2.07 «Разработка комплексной модели оценки и управления магнитной анизотропией в двумерных магнитных системах на основе результатов квантовомеханического моделирования» ГПНИ «Материаловедение, новые материалы и технологии», подпрограмма «Наноструктура», 2021–2025, № ГР 20211433; задание 3.02.6 «Разработка методов квантовомеханического моделирования электронных и магнитных свойств металлических нанокластеров» ГПНИ «Конвергенция-2025», подпрограмма «Междисциплинарные исследования и новые зарождающиеся технологии», 2021–2025, № ГР 20211547; договор с БРФФИ Ф20В-008 «Абсорбция терагерцевого излучения квазидвумерными магнитными материалами на основе MAX_3 халькогенидов переходных металлов для устройств наноплазмоники», 2020–2021, № ГР 20200548; договор с БРФФИ Ф13А3-024 «Исследование из первых принципов структурных, электронных и магнитных свойств дефектных соединений ZnO и $ZnSnAs_2$, легированных переходными 3d-элементами», 2013–2015, № ГР 20132358; грант Министерства образования «Исследование магнитных свойств наноструктурированных оксидов ванадия и цинка, легированных переходными металлами», 2018–2019, № ГР 20180675.

Цель и задачи исследования

Целью диссертационной работы является установление и теоретическое обоснование в рамках методологии многоуровневого моделирования механизмов возникновения магнитного порядка в низкоразмерных магнитных системах, формирующихся в двумерных атомных структурах MAX_3 ($M = Cr$; $A = Ge, Si$; $X = S, Se, Te$) ван-дер-ваальсовского типа, а также в твердых растворах ZnO с переходными

элементами (Cr, Mn, Fe, Co, Ni), и определение эффективных способов их модификации для обеспечения условий практического использования.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

1. Обозначить проблемы в области практического использования различных классов низкоразмерных магнитных систем и пути их решения, обосновать перспективность применения низкоразмерных магнитных систем в спинтронных устройствах.

2. Разработать и апробировать в рамках компьютерного моделирования многоуровневый подход для описания фундаментальных и прикладных характеристик низкоразмерных магнитных систем, а именно, определения структуры, электронных и магнитных свойств, а также микроскопических и макроскопических магнитных параметров.

3. Исследовать двумерные магнитные системы MAX_3 : выполнить квантовомеханическое моделирование структурных, электронных и магнитных свойств, рассчитать микроскопические магнитные параметры, а также выявить механизмы формирования магнитного порядка с помощью установленных зависимостей.

4. Исследовать квазиодномерные (цепочки) и квазиульмерные (димеры) магнитные системы, сформированные в объемном оксиде цинка ZnO, путем замещения атомов Zn атомами переходных элементов (Cr, Mn, Fe, Co, Ni): выполнить квантовомеханическое моделирование структурных, электронных и магнитных свойств, рассчитать микроскопические магнитные параметры, а также выявить механизмы формирования магнитного порядка с помощью установленных зависимостей.

5. Выполнить сравнение механизмов обменного взаимодействия в атомных структурах с различной размерностью магнитного взаимодействия и определить способы повышения энергии магнитного взаимодействия с целью формирования устойчивого ферромагнитного порядка, что позволит повысить эффективность их применения в качестве элементов конструкции спинтронных устройств.

Научная новизна

1. Предложен подход к организации многоуровневого моделирования микроскопических магнитных параметров низкоразмерных магнитных систем, отличающийся от ранее известных учетом особенностей конкретных атомных структур (двумерного MAX_3 и объемного ZnO) с верифицированными параметрами квантовомеханического моделирования на атомном уровне.

2. Выявлены и обоснованы зависимости магнитных параметров от структуры и электронных свойств в двумерных атомных структурах MAX_3 с учетом симметрии кристаллического поля, дополняющие известные ранее теоретические представления о новом классе материалов.

3. Установлены зависимости и определены механизмы обменного взаимодействия от состава и структуры в квазиодномерных и квазиульмерных магнитных системах, вызванные включением в структуру объемного ZnO примеси переходного элемента.

4. Впервые проведено сравнение механизмов обменного взаимодействия в низкоразмерных магнитных системах на основе двумерных слоев MAX_3 и объемного ZnO с различной размерностью магнитного взаимодействия, по результатам которого установлено, что механизм формирования ферромагнитного порядка во всех объектах исследования одинаков и обусловлен суперобменным взаимодействием между орбиталями разной симметрии.

Положения, выносимые на защиту

1. Многоуровневый подход, включающий этапы квантовомеханического моделирования структуры, электронных и магнитных свойств и определения полной энергии атомных структур, путем расчета интеграла обменного взаимодействия с использованием модельного гамильтониана Гейзенберга обеспечивает возможность выявления условий формирования низкоразмерных магнитных систем в соединениях типа MAX_3 ($M = Cr$; $A = Ge, Si$; $X = S, Se, Te$) с ограниченной геометрической размерностью по одному из пространственных направлений от 3,40 до 3,50 Å и в объемном ZnO с примесью переходных элементов и ограничением по двум (цепочка) и трем (димер) пространственным направлениям до 2,85 Å.

2. Формирование низкотемпературного ферромагнитного порядка в двумерных магнитных системах на основе MAX_3 ($M = Cr$; $A = Ge, Si$; $X = S, Se, Te$) происходит за счет суперобменного взаимодействия между обусловленной гибридизацией sp^3d^2 -орбиталей части ионов Cr^{3+} с p -орбиталями промежуточного халькогена молекулярной орбиталью σ и атомными t_{2g} -орбиталями другой части ионов Cr^{3+} , а антиферромагнитного порядка — за счет прямого обменного взаимодействия между d -орбиталями одной симметрии (t_{2g}) двух ионов Cr^{3+} и суперобменного взаимодействия между орбиталями, имеющими различные симметрии на этих ионах через гибридизацию с p -орбиталями халькогена.

3. В квазиодномерных и квазиульмерных магнитных системах, сформированных в объемном оксиде цинка путем внедрения переходных элементов (Cr, Mn, Fe, Co, Ni) с концентрацией примеси от 6,25 до 12,5 % от общего числа атомов, антиферромагнитный порядок формируется за счет прямого обменного взаимодействия между *d*-орбиталями ионов примеси и косвенного суперобменного взаимодействия между частично заполненными *d*-орбиталями ионов примеси одной симметрии посредством гибридизации с *p*-орбиталями кислорода, а ферромагнитный порядок формируется за счет косвенного суперобменного взаимодействия между частично заполненными (пустыми для низкоразмерных магнитных систем с Cr) и полностью заполненными (частично заполненными для низкоразмерных магнитных систем с Cr) *d*-орбиталями разной симметрии благодаря гибридизации с *p*-орбиталями кислорода.

4. Формирование устойчивого высокотемпературного ферромагнетизма в атомных структурах CrGeSe₃, CrGeTe₃, CrSiSe₃, CrSiTe₃ с температурой Кюри в диапазоне от 59 до 129 К, а также в объемном ZnO с примесью переходных элементов Cr, Fe, Co с температурой Кюри в диапазоне от 59 до 287 К обеспечивается за счет увеличения вероятности прямого и суперобменного взаимодействий между орбиталями разной симметрии, которое достигается путем изменения структуры и/или уменьшения вкладов прямого обменного взаимодействия между орбиталями одной симметрии.

Личный вклад соискателя ученой степени

Содержание диссертационной работы отражает личный вклад автора, заключающийся в разработке подходов и методик, получении, интерпретации и анализе результатов исследований. Совместно с научным руководителем кандидатом технических наук, доцентом Стемпицким Виктором Романовичем определены структура, цели и задачи исследования, обобщены основные научные результаты. Совместно с соавторами публикаций осуществлялась подготовка и проведение исследований, обсуждались полученные результаты.

Апробация диссертации и информация об использовании ее результатов

Основные результаты диссертационных исследований докладывались и обсуждались на международных и республиканских научно-технических конференциях: Международная научно-практическая конференция «Физика конденсированного состояния — ФКС-XXIII», Гродно, Республика Беларусь, 2015; 58th Scientific Conference for Students of Physics and Natural Sciences:

Open Readings 2015, Vilnius, Lithuania, 2015; Conference Series on Advanced Nano Materials Held Annually at the University of Aveiro, Portugal 2018; 10-я Юбилейная международная научно-практическая конференция по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ-электроники, Москва, 15–16 мая 2019 г.; Междисциплинарный научный форум с международным участием «Новые материалы и перспективные технологии», Москва, Российская Федерация, 2019; XVI Международная научная конференция «Молодежь в науке 2.0'19», Минск, Республика Беларусь, 2019; International Workshop on New Approaches to High-Tech: Nano-Design, Technology, Computer Simulations – NDTCS, Minsk, Belarus, 2017, 2021; IX International Scientific Conference, Actual Problems of Solid State Physics, Minsk, November 22–26, 2021; the 10th International Workshop on Advanced Materials Science and Nanotechnology IWAMSN 2021 November 4th – 6th, 2021.

Результаты диссертационных исследований внедрены в учебный процесс кафедры микро- и нанoeлектроники учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники» и кафедры «Интеллектуальные и мехатронные системы» Белорусского национального технического университета.

Опубликование результатов диссертации

Основные результаты диссертационных исследований опубликованы в 18 научных работах общим объемом 5,6 авторского листа. Из них 7 статей объемом 4,2 авторского листа в рецензируемых научных журналах в соответствии с пунктом 18 Положения о присуждении ученых степеней и присвоении ученых званий, 5 публикаций в материалах и сборниках трудов научных конференций объемом 0,8 авторского листа, 6 тезисов докладов на научных конференциях объемом 0,6 авторского листа.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из перечня условных обозначений, введения, общей характеристики работы, 5 глав с краткими выводами, заключения, библиографического списка и приложений.

Общий объем диссертационной работы составляет 145 страниц, из них 98 страниц основного текста, 34 рисунка на 10 страницах, 22 таблицы на 6 страницах, библиографический список из 132 наименований на 10 страницах, список публикаций автора из 18 наименований на 3 страницах, 5 приложений на 18 страницах.

ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

В **первой главе** отражены основные проблемы, сдерживающие практическое применение низкоразмерных магнитных систем в современных устройствах спинтроники, определены возможные способы их решения в рамках теоретических исследований, включающих этап квантовомеханического моделирования. Представлен анализ публикаций зарубежных и отечественных авторов, где отмечена перспективность использования соединений MAX_3 , а также ZnO с примесью переходных элементов в качестве материалов для устройств спинтроники, функционирующих при условии наличия низкоразмерного магнитного порядка. Определены цель, задачи, объект и предмет исследования.

Во **второй главе** описан подход к многоуровневому моделированию низкоразмерных магнитных систем на основе двумерных MAX_3 и объемного ZnO с примесями переходных элементов, а также представлена теоретическая база его реализации.

Описана разработанная методика расчета интеграла обменного взаимодействия в двумерных магнитных системах, формирующихся в MAX_3 , и квазиодномерных и квазиульмерных магнитных системах, сформированных в ZnO , которая основана на совместном использовании результатов квантовомеханических расчетов, теории возмущений и модели Гейзенберга. На рисунке 1 изображена подрешетка кристаллической структуры, состоящая из магнитных ионов одного типа в MAX_3 . Стрелками показаны направления собственных магнитных моментов ионов.

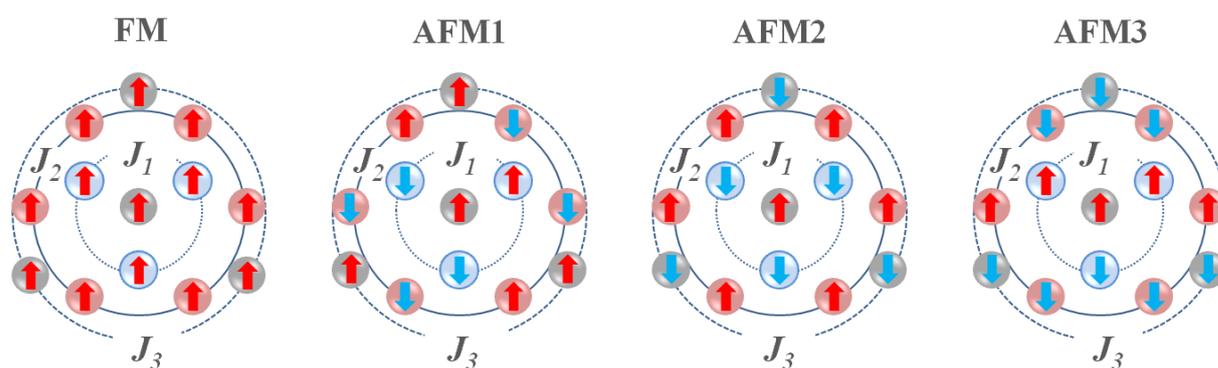


Рисунок 1. – Магнитные конфигурации гексагональной подрешетки переходных элементов в MAX_3

С учетом структуры и состава MAX_3 интегралы обменного взаимодействия запишутся в виде

$$J_1 = (-E_{AFM2} + E_{AFM3} + E_{FM} - E_{AFM1}), \quad (1)$$

$$J_2 = (E_{AFM2} - E_{AFM3})/288 + J_1, \quad (2)$$

$$J_3 = (E_{AFM3} - E_{AFM1})/216 + J_1, \quad (3)$$

где $J_{1(2,3)}$ – интегралы обменного взаимодействия между центральным атомом и атомом из первой, второй и третьей координационных сфер соответственно;

$E_{AFM1(2,3)}$, – значения полной энергии атомной структуры для различных магнитных конфигураций.
 E_{FM}

Для расчета интеграла обменного взаимодействия J в ZnO принято, что обменное взаимодействие происходит только между двумя ближайшими ионами примеси, а магнитные низкоразмерные системы не взаимодействуют между собой. Тогда интеграл обменного взаимодействия вычисляется с помощью выражения

$$J = (E_{FM} - E_{AFM})/2 S^2, \quad (4)$$

где S – эффективный магнитный момент атома.

В главе 3 на примере моделирования фундаментальных свойств объемного CrGeTe_3 показана возможность получения близких к экспериментальным значениям параметров структуры, электронных и магнитных свойств. Определены источники возникающих погрешностей и предложены способы их минимизации путем подбора эффективных параметров моделирования.

Установлено, что постоянные решетки a на 0,4 % и c на 5,3 % больше экспериментальных значений в случае использования функционала LDA (англ. Local Density Approximation). При этом функционал GGA (англ. Generalised Gradient Approximation) позволяет получить a на 0,6 % больше, а c на 4 % меньше экспериментальных значений. Определено, что применение параметра Хаббарда $U_{\text{Cr}} = 1,5$ эВ позволяет достичь показателя несоответствия с экспериментальным значением ширины запрещенной зоны, равным 10 %. Использование U_{Cr} от 3 эВ и больше приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны, что объясняется уменьшением степени гибридизации

p - и d -орбиталей. При этом значительно ослабевает ковалентная связь, что влечет за собой рост межатомного расстояния между Cr и Te от 2,76 Å для $U_{Cr} = 0$ до 2,85 Å для $U_{Cr} = 5$ эВ и изменению угла связи с 91,7 до 89,3°.

Выводы об особенностях квантовомеханического моделирования CrGeTe₃, которые подтверждают адекватность получаемых результатов, могут быть распространены на весь класс соединений MAX₃, где M = Cr.

В главе 4 приведены результаты исследования двумерных атомных структур MAX₃. В рамках квантовомеханических расчетов: установлено, что основным магнитным порядком представленных соединений является ферромагнитный (ФМ) порядок, кроме тех соединений, где в качестве халькогена выступает сера S, тогда основным является антиферромагнитный (АФМ) порядок; определено, что все атомные структуры относятся к непрямозонным полупроводникам. В CrGeSe₃ и CrGeTe₃ запрещенные зоны для двух спиновых подсистем отличаются в 1,29 и 1,51 раза соответственно, а в CrSiSe₃ и CrSiTe₃ в 1,67 и 1,95 раза соответственно, что позволяет формировать в данных атомных структурах спин-поляризованный ток.

Основываясь на результатах расчета эффективных магнитных моментов, используя уравнения (1)–(3) и энергетические параметры системы, полученные из квантовомеханических расчетов, рассчитаны интегралы обменного взаимодействия J . Все соединения, кроме соединений с X = S, имеют положительный знак J между магнитными атомами из первой координационной сферы, что подтверждает ФМ-порядок между ближайшими соседними атомами Cr. Установлено, что ось легкого намагничивания для рассматриваемых атомных структур MAX₃ направлена вдоль кристаллографического направления [001]. Температура Кюри для атомных структур MAX₃ с ферромагнитным порядком находится в диапазоне от 59 до 129 К. Определено, что соединения CrSiSe₃ и CrSiTe₃ имеют значения коэффициентов спиновой поляризации P , равные 0,98 и 0,73 соответственно, что делает их перспективными материалами для спинтронных применений.

Выявлено три доминирующих механизма обменного взаимодействия. Механизм 1 (на рисунке 2 обозначен как J_{ipe}) осуществляется между общей молекулярной орбиталью σ , обусловленной гибридизацией sp^3d^2 -орбиталей одного иона Cr³⁺ с p_x -, p_y -, и p_z -орбиталями промежуточного халькогена, и атомных орбиталей d_{xz} , d_{yz} и d_{xy} (t_{2g}) второго иона Cr³⁺. Согласно правилам Гуденафа – Канамори – Андерсона, такое суперобменное взаимодействие формирует ФМ-порядок. Согласно полученным парциальным плотностям числа электронных состояний, гибридизация sp^3d^2 -орбиталей с p -орбиталями халькогена наблюдается во всех изучаемых атомных структурах, угол $\alpha_{Cr-X-Cr}$ имеет значения от 88,68 до 92,14°. Также доказательством осуществления

данного механизма являются следующие полученные результаты: при d_{M-M} , равном от 3,64 Å и выше, доминирует ФМ-взаимодействие; доказана гибридизация атомных орбиталей иона Cr^{3+} и окружающих лигандов с формированием общей молекулярной орбитали σ ; степень гибридизации определяется только p -орбиталью халькогена, а атомы Si и Ge не имеют прямого влияния на связь между электронными свойствами и магнитными параметрами.

Механизм 2 (на рисунке 2 обозначен как J_{tt}) осуществляется между d -орбиталями одной симметрии (t_{2g}) двух ионов Cr^{3+} и является прямым АФМ обменным взаимодействием. Угол взаимодействия равен 180° или близкий к нему, а обмен происходит между частично заполненным t_{2g} -орбиталями. Доказательством осуществления данного механизма являются следующие установленные зависимости: уменьшение расстояния между Cr^{3+} в первой координационной сфере приводит к ослаблению ФМ-взаимодействия; большее значение ζ^2 в соединениях с АФМ-порядком ($CrSiS_3$ и $CrGeS_3$) приводит к меньшему значению обменного интеграла J_1 .

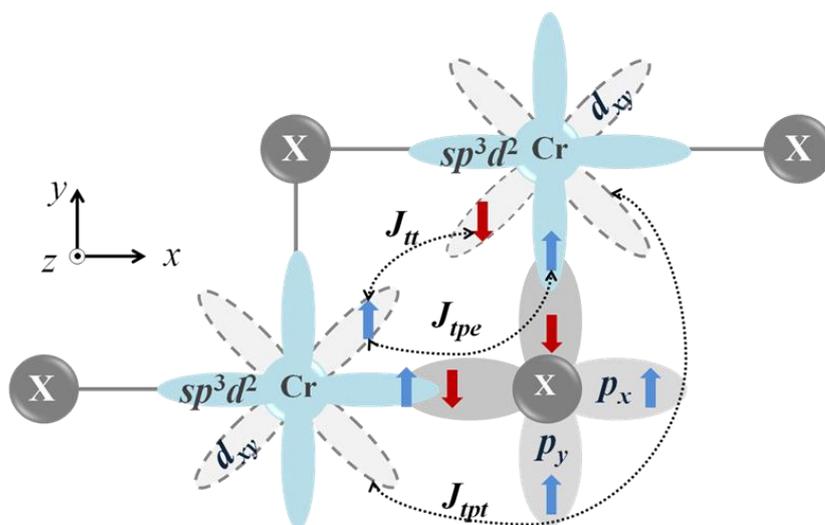


Рисунок 2. – Механизмы обменного взаимодействия между магнитными ионами Cr в двумерных атомных системах MAX_3

Механизм 3 (на рисунке 2 обозначен как J_{tpt}) осуществляется между t_{2g} -орбиталями двух ионов Cr^{3+} через гибридизацию с p -орбиталями халькогена. Данный механизм формирует АФМ-порядок. Вклад его незначителен и определяется небольшим отклонением эффективного магнитного момента на t_{2g} -орбиталях.

Суммарный интеграл обменного взаимодействия состоит из вкладов, характеризующих каждый механизм:

$$J = J_{tpe} - J_{tt} - J_{tpt}. \quad (5)$$

Знаки в уравнении (5) соответствуют магнитному порядку, который формируют соответствующие механизмы.

В главе 5 представлены результаты исследования квазиодномерных и квазиульмерных магнитных систем, сформированных в объемной матрице – кристалле оксида цинка ZnO путем замещения атомов Zn переходными элементами (Cr, Mn, Fe, Co, Ni) заданной структурной конфигурации. В качестве низкоразмерных магнитных систем рассматривались квазиодномерные магнитные цепочки с пространственным направлением магнитного взаимодействия в плоскости (001) – *Цепочка*|| и в плоскости (110) – *Цепочка*⊥, а также квазиульмерные магнитные димеры с пространственным направлением магнитного взаимодействия в плоскости (001) – *Димер*|| и в плоскости (110) – *Димер*⊥.

В рамках квантовомеханических расчетов установлено, что ФМ-порядок наблюдается только для *Цепочек*⊥, состоящих из Cr, Fe и Co. Рассчитаны интегралы обменного взаимодействия J и показано, что формируемый в низкоразмерных магнитных системах магнитный порядок зависит как от типа примеси, так и от класса низкоразмерной магнитной системы. Для *Димеров*|| и *Цепочек*||, состоящих из Cr, средний модуль значений интеграла обменного взаимодействия больше в 1,59 раза, чем для *Димеров*⊥ и *Цепочек*⊥. Для Mn, Fe, Co и Ni этот показатель составляет 3,56, 9,03, 2,93, и 11,01 раза соответственно.

Рассчитана энергия магнитокристаллической анизотропии E_{MCA} и определено, что наибольшим значением $E_{MCA} = 3,47$ мэВ обладает *Цепочка*⊥ из ионов Co, при этом ось легкого намагничивания направлена вдоль [001]. В *Цепочках*⊥ из ионов Cr и Fe E_{MCA} составляет 0,29 мэВ (ось легкого намагничивания вдоль [001]) и 0,02 мэВ (ось легкого намагничивания вдоль [100]) соответственно, что говорит о слабой устойчивости магнитного порядка.

Рассчитана температура Кюри T_C и установлено, что *Цепочка*⊥ из ионов Cr обладает наибольшим значением T_C , равным 287 К. Для низкоразмерных магнитных систем *Цепочек*⊥ из Fe и Co полученные значения составляют 59 К и 86 К соответственно, что значительно ниже комнатной температуры.

Выявлено три доминирующих механизма обменного взаимодействия. Механизм 1 (J_{pre}) осуществляется между частично заполненными (пустыми для низкоразмерных магнитных систем с Cr) и полностью заполненными (частично заполненными для низкоразмерных магнитных систем с Cr) d -орбиталями разной симметрии благодаря гибридизации с p -орбиталями O и представляет собой ФМ суперобменное взаимодействие.

Механизм 2 (J_{epc}) осуществляется между частично заполненными d -орбиталями одной симметрии, благодаря гибридизации примесной зоны низкоразмерных магнитных систем и p -орбиталью кислорода O. Косвенное

суперобменное взаимодействие между частично заполненными орбиталями одной симметрии, согласно правилу Гуденафа – Канамори –Андерсона, приводит к усилению АФМ-порядка. Доказательством существования данного механизма является установленная закономерность, которая показывает, что низкоразмерные магнитные системы с ФМ-порядком имеют наибольший показатель дисперсии углов связи (ζ). При увеличении показателя ζ , который характеризует отклонение углов тетраэдрического комплекса от идеальных значений, уменьшается степень гибридизации, что приводит к ослаблению АФМ-взаимодействия.

Механизм 3 (J_{ee}) осуществляется между d -орбиталями без привлечения атомов кислорода и является прямым АФМ обменным взаимодействием. Поскольку прямое обменное взаимодействие имеет сильную зависимость от расстояния между магнитными ионами, то есть степени перекрытия электронных орбиталей, то доказательством осуществления такого механизма является установленная закономерность: низкоразмерные магнитные системы с ФМ-порядком обладают наибольшим значением расстояния d_{M-M} между магнитными ионами среди всех низкоразмерных магнитных систем.

Суммарный интеграл обменного взаимодействия будет состоять из вкладов, характеризующих каждый механизм:

$$J = J_{tpe} - J_{epe} - J_{ee} + J_{RKKY}. \quad (6)$$

Знаки в уравнении (6) соответствуют магнитному порядку, который формируют соответствующие механизмы. Косвенное обменное взаимодействие через электроны проводимости (J_{RKKY}) в исследуемых структурах не реализуется, поскольку все ионы переходных элементов являются двухвалентными, как и ион Zn^{2+} .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные научные результаты диссертации

1. По результатам анализа проблем, возникающих при внедрении новых материалов в конструктивные элементы устройств спинтроники, выделены основные задачи, которые могут быть решены в рамках подхода, включающего этапы квантовомеханического моделирования структуры, электронных и магнитных свойств и определения полной энергии атомных структур, а также методики расчета интеграла обменного взаимодействия с применением модельного гамильтониана Гейзенберга [2, 3, 6, 7].

2. Показано, что повышение энергии магнитного взаимодействия за счет усиления магнитной анизотропии и изменения обменного взаимодействия будет способствовать формированию высокотемпературного

ферромагнетизма, при этом физические механизмы, лежащие в основе данных явлений, могут быть исследованы с помощью компьютерного эксперимента [6, 17].

3. Показано, что MAX_3 является подходящим объектом для изучения условий возникновения собственного магнитного порядка благодаря возможной сильной магнитной анизотропии в плоскости слоев; ZnO является подходящей объемной матрицей для изучения условий возникновения примесного магнитного порядка благодаря хорошей растворимости примеси (Cr, Mn, Fe, Co, Ni), отсутствия намагниченности у идеального ZnO и широкой запрещенной зоне. Формирование низкоразмерного магнитного порядка изинговского типа в MAX_3 возможно ограничением размерности при переходе от объемной структуры к монослою. В таком случае толщина одного слоя составляет от 3,40 до 3,50 Å, а формирующаяся низкоразмерная магнитная система является двумерной. Для атомных структур на основе ZnO ограничение размерности магнитной системы по двум или трем направлениям до размера одного атома или межатомного расстояния (2,85 Å) достигается путем замещения атомов Zn примесью переходных элементов. В таком случае формируются квазиодномерные и квазиульмерные магнитные системы [6, 7, 13].

4. По результатам анализа перспективных спинтронных устройств показано, что для практического использования низкоразмерных магнитных материалов необходимо: предложить методы повышения температуры Кюри T_C для работы спинтронных устройств при комнатной температуре и выше; обеспечить возможность формирования магнитной анизотропии перпендикулярно плоскости образца для снижения тока переключения направления намагниченности; создать условия получения энергии магнитной анизотропии выше, чем энергия термической активации $k_B T$, для снижения влияния теплового шума [6, 12].

5. Предложен и апробирован многоуровневый подход исследования магнитных свойств атомных структур с низкоразмерным магнитным порядком, в рамках которого разработаны следующие методики:

– методика квантовомеханического моделирования электронных и магнитных свойств атомных структур на основе ZnO и двумерных MAX_3 с подбором параметров, которые могут вносить значительные погрешности в результаты моделирования, путем сравнения результатов моделирования постоянных решеток, межатомного расстояния, ширины запрещенной зоны, магнитного момента тестовой атомной структуры с экспериментальными значениями [5];

– методика расчета интеграла обменного взаимодействия для квазиодномерных и квазинульмерных магнитных систем в ZnO, а также двумерных магнитных систем MAX_3 , в которой с использованием модели Гейзенберга определен вид соответствующих атомным структурам уравнений для расчета интеграла обменного взаимодействия на основе результатов квантовомеханического моделирования [2, 4, 6, 7, 14, 15].

6. С использованием разработанного многоуровневого подхода выполнено исследование атомных структур MAX_3 . Установлено, что основным магнитным порядком атомных структур $CrGeSe_3$, $CrGeTe_3$, $CrSiSe_3$ и $CrSiTe_3$ является ферромагнитный порядок, а $CrGeS_3$ и $CrSiS_3$ обладают антиферромагнитным порядком. Магнитный момент локализован на d -орбиталях ионов Cr^{3+} и его значение составляет от 2,938 до 3,436 μ_B . Все рассмотренные соединения являются полупроводниками с запрещенной зоной от 0,37 до 1,35 эВ. В атомных структурах с ферромагнитным порядком запрещенные зоны для двух спиновых подсистем отличаются от 1,3 до 1,9 раз, что позволяет формировать спин-поляризованный ток. Ось легкого намагничивания для рассматриваемых атомных структур MAX_3 лежит перпендикулярно плоскости двумерных слоев, то есть вдоль кристаллографического направления [001], что обеспечивает возможность повышения эффективности спинтронных устройств на основе данных материалов. Температура Кюри для исследованных атомных структур MAX_3 находится в диапазоне от 59 до 129 К [10, 11, 12, 16, 18].

Анализ полученных результатов позволил установить доминирующие механизмы обменного взаимодействия. Установлено, что ферромагнитный порядок формируется за счет механизма суперобменного взаимодействия между молекулярной орбиталью σ , обусловленной гибридизацией sp^3d^2 -орбиталей части ионов Cr^{3+} с p_x -, p_y - и p_z -орбиталями промежуточного халькогена, и атомными t_{2g} -орбиталями другой части ионов Cr^{3+} . Антиферромагнитный порядок формируется за счет обменного взаимодействия, осуществляемого по двум механизмам. Первый механизм обусловлен прямым обменным взаимодействием между d -орбиталями одной симметрии (t_{2g}) ионов Cr^{3+} . Вторым механизмом, приводящим к антиферромагнитному порядку, обусловлен суперобменным взаимодействием и осуществляется между t_{2g} -орбиталями, имеющими различные симметрии на ионах Cr^{3+} , через гибридизацию с p -орбиталями халькогена. Данный обмен незначителен и определяется небольшим отклонением эффективного магнитного момента на t_{2g} -орбиталях от целочисленного значения [7].

Смена халькогена в MAX_3 влияет на степень гибридизации. Так самая слабая гибридизация возникает в соединениях с Те из-за большей протяженности валентной оболочки [7].

7. По результатам исследования квазиодномерных и квазинульмерных магнитных систем, сформированных в объемном оксиде цинка ZnO путем внедрения переходных элементов (Cr, Mn, Fe, Co, Ni) с заданной структурной конфигурацией установлено, что ферромагнитный порядок формируется в *Цепочке* \perp , состоящей из Cr, Fe и Co, для остальных магнитных систем предпочтительным является антиферромагнитный порядок. Установлено, что от 85 до 95 % суммарного магнитного момента локализовано на d -орбиталях двухвалентных ионов переходных элементов. Для *Димеров* \parallel и *Цепочек* \parallel , состоящих из Cr, средний модуль значений интеграла обменного взаимодействия, больше в 1,6 раз, чем для *Димеров* \perp и *Цепочек* \perp . Для Mn, Fe, Co и Ni этот показатель составляет 3,6, 9,0, 2,9, и 11,0 раз соответственно. Возникающая разница в значении интеграла обменного взаимодействия J между низкоразмерными магнитными системами объясняется перекрытием орбиталей одной или разной симметрии, что определяется взаимной пространственной ориентацией тетраэдрических комплексов.

В атомных структурах с *Цепочками* \perp из ионов Cr и Fe значение E_{MCA} составляет 0,29 мэВ (ось легкого намагничивания вдоль [001]) и 0,02 мэВ (ось легкого намагничивания вдоль [100]) соответственно, что говорит о слабой устойчивости магнитного порядка. Атомная структура с *Цепочкой* \perp из ионов Cr обладает высокой температурой Кюри, $T_C = 287$ К, но для практических применений необходимо повысить E_{MCA} . Наибольшим значением $E_{\text{MCA}} = 3,47$ мэВ обладает атомная структура с *Цепочкой* \perp из ионов Co, но T_C в этом случае составляет 86 К. Формирование высокотемпературного ферромагнитного порядка для атомных структур с такой цепочкой возможно при условии увеличения интеграла обменного взаимодействия J .

Анализ полученных результатов позволил установить доминирующие механизмы обменного взаимодействия: ферромагнитный порядок формируется за счет доминирующего суперобменного взаимодействия между частично заполненными (пустыми для низкоразмерных магнитных систем с Cr) и полностью заполненными (частично заполненными для низкоразмерных магнитных систем с Cr) d -орбиталями разной симметрии благодаря гибридизации с p -орбиталями O, а антиферромагнитный порядок формируется за счет доминирующего прямого обменного взаимодействия между d -орбиталями ионов примеси и косвенного суперобменного взаимодействия между частично заполненными d -орбиталями ионов примеси одной симметрии посредством гибридизации с p -орбиталями кислорода [1, 2, 6, 8, 9].

8. Интеграл обменного взаимодействия для MAX_3 и низкоразмерных магнитных систем в ZnO представляет собой сумму обменных взаимодействий по каждому механизму с учетом типа магнитного порядка, к которому он приводит; во всех исследуемых магнитных системах между d -орбиталями одной симметрии осуществляется как прямое антиферромагнитное обменное взаимодействие, так и антиферромагнитное суперобменное взаимодействие через гибридизацию с p -орбиталью халькогена или кислорода. Ферромагнитный порядок формируется за счет суперобменного взаимодействия между орбиталями разной симметрии посредством p -орбитали халькогена (Te, S, Se) в MAX_3 и p -орбитали O в низкоразмерных магнитных системах, сформированных в ZnO [6, 7, 12].

9. Таким образом, выполненные исследования позволяют определить критерии и условия формирования устойчивого высокотемпературного ферромагнитного порядка, которые заключаются в следующем:

– повышение температуры Кюри достигается за счет увеличения вероятности суперобменного взаимодействия между орбиталями разной симметрии за счет изменения структурных свойств;

– формирование устойчивого коллинеарного магнитного порядка обеспечивается посредством увеличения E_{MCA} с помощью варьирования состава исследуемых атомных структур [6, 12].

Рекомендации по практическому использованию результатов

1. Исследуемые атомные структуры MAX_3 ($CrGeS_3$, $CrGeSe_3$, $CrGeTe_3$, $CrSiS_3$, $CrSiSe_3$, $CrSiTe_3$) являются перспективными материалами для спинтронных устройств со спиновой поляризацией, близкой к 100 %, и перпендикулярной анизотропией при условии повышения температуры Кюри с помощью стратегий, оказывающих влияние на выявленные механизмы обменного взаимодействия [7].

2. Для применения ZnO с примесью переходных элементов в устройствах, требующих для своего функционирования использования ферромагнитного материала, необходимо добиться формирования низкоразмерных магнитных систем типа *Цепочка*⊥ из ионов Cr^{2+} , Fe^{2+} , и Co^{2+} и повысить температуру Кюри с помощью стратегий, оказывающих влияние на выявленные механизмы обменного взаимодействия [6].

3. Основные результаты диссертационной работы, в частности разработанные методики моделирования, могут быть использованы для повышения уровня подготовки студентов в высших учебных заведениях (БГУИР, БНТУ и прочие) за счет изучения современных подходов к исследованию магнитных характеристик наноструктурированных материалов

и наноразмерных систем, а также соответствующих программных средств при выполнении курсовых работ, дипломных проектов, а также при проведении научных исследований.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СОИСКАТЕЛЯ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ

Статьи в рецензируемых научных журналах

1. Magnetic properties of vacancies and doped chromium in a ZnO crystal / V. N. Jafarova, G. S. Orudzhev, S. S. Huseynova, V. R. Stempitsky, M. S. Baranova // *Semiconductors*. – 2018. – Vol. 52, № 8. – P. 1047 – 1050.

2. Baranova, M. S. Direct exchange interaction of cobalt chains in zinc oxide: model approach / M. S. Baranova, A. L. Danilyuk, V. R. Stempitsky // *Materials Physics and Mechanics*. – 2018. – Vol. 39. – P. 15 – 20.

3. Magnetic interactions in Cr₂Ge₂Te₆ and Cr₂Si₂Te₆ monolayers: *ab initio* study / M. S. Baranova D. C. Hvezdouski, V. A. Skachkova, V. R. Stempitsky, A. L. Danilyuk // *Materials Today: Proceedings*. – 2020. – Vol. 20, P. 342 – 347.

4. Баранова, М. С. Электронные свойства квазидвумерных халькогенидов переходных металлов с низкоразмерным магнетизмом / М. С. Баранова, П. А. Проскурова // *Доклады БГУИР*. – 2020. – Т. 18, № 7. – С. 87 – 95.

5. Baranova, M. S. Influence of exchange-correlation functional on the structural and electronic properties of periodic structures with transition metal atoms / M. S. Baranova // *Доклады БГУИР*. – 2021. – Т. 19, № 8. – С. 87 – 91.

6. Баранова, М. С. Низкоразмерный магнетизм в соединениях с различной размерностью магнитного взаимодействия / М. С. Баранова // *Доклады БГУИР*. – 2022. – Т. 20, № 4. – С. 62 – 70.

7. Baranova, M. S. Magnetic properties of low-dimensional MAX₃ (M = Cr, A = Ge, Si and X = S, Se, Te) systems / M. S. Baranova, V. R. Stempitsky // *Materials Physics and Mechanics*. – 2022. – Vol. 49. – P. 73 – 84.

Статьи в сборниках материалов конференций

8. Скачкова, В. А. Магнитные свойства ZnO, легированного переходными металлами (Co, Fe, Ni, Cu) / В. А. Скачкова, М. С. Зеленина (Баранова), О. А. Козлова / *Физика конденсированного состояния : материалы XXIII междунар. науч.-практ. конф. аспирантов, магистрантов и студентов, Гродно, 16 апреля 2015 г. / ГрГУ им. Я. Купалы; 2015 г. редкол.: В. Г. Барсуков [и др.]. – Гродно, 2015. – С. 135 – 136.*

9. Zialenina (Baranova), M. S. Exchange interaction in zinc oxide doped by cobalt / M. S. Zialenina (Baranova), V. R. Stempitsky, A. L. Danilyuk // *Nano-*

design, technology, computer simulations : proc. of the 17th Intern. workshop on new approaches to High-Tech, Minsk, 26–27 October, 2017 / BSUIR. – Minsk, 2017. – P. 193 – 195.

10. Баранова, М. С. Обменное магнитное взаимодействие в монослоях $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ и $\text{Cr}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ / М. С. Баранова В. Р. Стемпицкий // 10 Юбилейная междунар. науч.-практ. конф. по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ-электроники : сб. тр., Москва, 15 – 16 мая 2019 г. / НИЯУ МИФИ. – М., 2019. – С. 85 – 86.

11. Баранова, М. С. Магнитные свойства монослоя халькогенида переходного металла: $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ / М. С. Баранова, Д. Ч. Гвоздовский, В. Р. Стемпицкий // Новые материалы и перспективные технологии : сборник материалов Пятого междисциплин. науч. форума с междунар. участием, Москва, 30 октября – 1 ноября 2019 г. : в 2 Т. / НПП «ИСИС»; – М., 2019. – Т. 1. – С. 53 – 57.

12. Baranova, M. S. *Ab initio* study of Exchange Interactions in the Nanoscale Magnetic Systems Based on CrGeX_3 ($X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) / M. S. Baranova, V. R. Stempitsky // Actual Problems of Solid State Physics : proc. of the IX Intern. Scient. Conf., Minsk, November 22 – 26, 2021 / SSPA; ed. by V. M. Fedosyuk [et al.]. – Minsk, 2021. – P. 75 – 78.

Тезисы докладов на научных конференциях

13. Zialenina (Baranova), M. S. Magnetic properties of transition-metal-doped ZnO / M. S. Zialenina (Baranova), V. A. Skachkova, O. A. Kozlova // 58th Scient. Conf. for Students of Physics and Natural Sciences : open readings, Vilnius, 24 – 27 March, 2015 / Vilnius University. – Vilnius, 2015. – P. 224.

14. Exchange Interaction in $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ Monolayers M. S. / Baranova, V. A. Skachkova, V. R. Stempitsky, D. C. Hvazdouski // ANM2018 conf.: book of the conf., Aveiro, 18 – 20 July 2018 / Aveiro, 2018. – P. 389.

15. Баранова, М. С. Собственный ферромагнетизм в двумерных кристаллах Ван-дер-Ваальса / М. С. Баранова, Д. Ч. Гвоздовский, В. Р. Стемпицкий // Молодежь в науке – 2019 : тезисы докладов XVI Междунар. науч. конф. молодых ученых, Минск, 14 – 17 октября 2019 г. / Беларуская навука. – Минск, 2019. – С. 400 – 401.

16. Baranova, M. S. *Ab initio* study of exchange interactions in the magnetic systems based on $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{X}_6$ ($X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) / M. S. Baranova, V. R. Stempitsky // Nano-Desing, Tehnology, Computer Simulations = Нанопроектирование, технология, компьютерное моделирование (NDTCS-2021) : тезисы докладов XIX Междунар. симпозиума, Минск, 28 – 29 октября 2021 г. / Беларус. гос.

ун-т информатики и радиэлектроники ; редкол.: В. А. Богуш [и др.]. – Минск, 2021. – С. 27 – 28.

17. Magnetic anisotropy energy of CrGeX_3 ($X = \text{Te, Se, S}$) / M. S. Baranova, V. R. Stempitsky, B. X. Khuyen, T. V. Huynh, B. S. Tung, N. T. Mai, and N. T. Tu // The 10th int. workshop on advanced materials science and nanotechnology IWAMSN 2021: book of abstracts, Hanoi, November 4th – 6th, 2021 / Hanoi, 2021. – P. 136.

18. Baranova, M. S. *Ab initio* study of exchange interactions in the nanoscale magnetic systems based on CrGeX_3 ($X = \text{S, Se, Te}$) / M. S. Baranova, V. R. Stempitsky // Actual Problems of Solid State Physics : book of abstracts of the IX Intern. Scient. Conf., Minsk, November 22 – 26, 2021 / SSPA; ed. by V. M. Fedosyuk [et al.]. – Minsk, 2021. – P. 201 – 202.



Баранава Марыя Сяргееўна

Магнітны парадак і абменнае ўзаемадзеянне ў двухмерных атамных структурах ван-дэр-ваальсаўскага тыпу і цвёрдых растворах ZnO з пераходнымі элементамі

Ключавыя словы: нізкапамерны магнетызм, MAX_3 , ZnO, энергія магнітакрышталічнай анізатрапіі, інтэграл абменнага ўзаемадзеяння.

Мэта працы: устанаўленне і тэарэтычнае абгрунтаванне ў рамках метадалогіі шматузроўневага мадэлявання механізмаў узнікнення магнітнага парадку ў нізкапамерных магнітных сістэмах, якія фарміруюцца ў двухмерных атамных структурах MAX_3 ($M = Cr$; $A = Ge, Si$; $X = S, Se, Te$) ван-дэр-ваальсаўскага тыпу, а таксама ў цвёрдых растворах ZnO з пераходнымі элементамі (Cr, Mn, Fe, Co, Ni), і вызначэнне эфектыўных спосабаў іх мадыфікацыі для забеспячэння ўмоў практычнага выкарыстання.

Метад даследавання: шматузроўневы падыход, заснаваны на квантавамеханічным мадэляванні, тэорыі абурэнняў і мадэлі Гейзенберга.

Атрыманыя вынікі і іх навізна: распрацаваны шматузроўневы падыход, які ўключае этапы квантавамеханічнага мадэлявання, які забяспечвае магчымасць выяўлення ўмоў фарміравання нізкаразмерных магнітных сістэм у злучэннях тыпу MAX_3 ($M = Cr$; $A = Ge, Si$; $X = S, Se, Te$) і ў аб'ёмным ZnO з прымешкай пераходных элементаў. Выяўлены фізічныя механізмы фарміравання нізкапамернага ферромагнітнага парадку ў двухмерных магнітных сістэмах на аснове MAX_3 і ў квазіаднамерных і квазінульмерных магнітных сістэмах, утвораных у аб'ёмным ZnO метадам укаранення пераходных элементаў. Устаноўлены спосабы фарміравання ўстойлівага высокатэмпературнага ферромагнетизма ў атамных структурах $CrGeSe_3$, $CrGeTe_3$, $CrSiSe_3$, $CrSiTe_3$, а таксама ў аб'ёмным ZnO з прымешкай пераходных элементаў Cr, Fe, Co за кошт знешніх уздзеянняў на ўласцівасці нанаструктур і нанаструктураваных матэрыялаў.

Рэкамендацыі па выкарыстанні і вобласць прымянення: доследныя атамныя структуры з'яўляюцца перспектыўнымі матэрыяламі для спінтронных прылад, са спінавай палярызацыяй блізкай да 100 % і перпендыкулярнай анізатрапіі пры ўмове павышэння тэмпературы Кюры з дапамогай стратэгіі, якія аказваюць уплыў на выяўленыя механізмы абменнага ўзаемадзеяння.

РЕЗЮМЕ

Баранова Мария Сергеевна

Магнитный порядок и обменное взаимодействие в двумерных атомных структурах ван-дер-ваальсовского типа и твердых растворах ZnO с переходными элементами

Ключевые слова: низкоразмерный магнетизм, MAX_3 , ZnO, энергия магнитокристаллической анизотропии, интеграл обменного взаимодействия.

Цель работы: установление и теоретическое обоснование в рамках методологии многоуровневого моделирования механизмов возникновения магнитного порядка в низкоразмерных магнитных системах, формирующихся в двумерных атомных структурах MAX_3 ($M = Cr$; $A = Ge, Si$; $X = S, Se, Te$) ван-дер-ваальсовского типа, а также в твердых растворах ZnO с переходными элементами (Cr, Mn, Fe, Co, Ni), и определение эффективных способов их модификации для обеспечения условий практического использования.

Метод исследования: многоуровневый подход, основанный на квантовомеханическом моделировании, теории возмущений и модели Гейзенберга.

Полученные результаты и их новизна: разработан многоуровневый подход, включающий этапы квантовомеханического моделирования, который обеспечивает возможность выявления условий формирования низкоразмерных магнитных систем в соединениях типа MAX_3 ($M = Cr$; $A = Ge, Si$; $X = S, Se, Te$) и в объемном ZnO с примесью переходных элементов. Выявлены физические механизмы формирования низкоразмерного ферромагнитного порядка в двумерных магнитных системах на основе MAX_3 и в квазиодномерных и квазинульмерных магнитных системах, образованных в объемном ZnO путем внедрения переходных элементов. Установлены способы формирования устойчивого высокотемпературного ферромагнетизма в атомных структурах $CrGeSe_3$, $CrGeTe_3$, $CrSiSe_3$, $CrSiTe_3$, а также в объемном ZnO с примесью переходных элементов Cr, Fe, Co за счет внешних воздействий на свойства наноструктур и наноструктурированных материалов.

Рекомендации по использованию и область применения: исследуемые атомные структуры являются перспективными материалами для спинтронных устройств со спиновой поляризацией, близкой к 100 % и перпендикулярной анизотропией при условии повышения температуры Кюри с помощью стратегий, оказывающих влияние на выявленные механизмы обменного взаимодействия.

SUMMARY

Maryia Baranova

Magnetic order and exchange interaction in two-dimensional atomic structures of the Van-der-Waals type and ZnO solid solutions with transition elements

Key words: low-dimensional magnetism, MAX₃, ZnO, energy of magnetocrystalline anisotropy, exchange interaction integral.

The goal of the work: establishment and theoretical substantiation within the framework of the multilevel simulation methodology of the magnetic order appearance mechanisms in low-dimensional magnetic systems formed in MAX₃ (M = Cr; A = Ge, Si; X = S, Se, Te) two-dimensional atomic structures Van-der-Waals type, as well as in the solid solution ZnO with transition elements (Cr, Mn, Fe, Co, Ni), and determination of effective methods for their modification to provide conditions for practical use.

Research method: Multilevel approach based on quantum mechanical simulation, perturbation theory and the Heisenberg model.

The results obtained and their novelty: a multilevel approach has been developed included the stages of quantum mechanical simulation. Approach makes possible to identify the conditions for the formation of low-dimensional magnetic systems in compounds of the MAX₃ type (M = Cr; A = Ge, Si; X = S, Se, Te) and in bulk ZnO with an impurities of transition elements. Physical mechanisms of the formation of a low-dimensional ferromagnetic order in two-dimensional magnetic systems based on MAX₃ and in quasi-one-dimensional and quasi-zero-dimensional magnetic systems formed in bulk ZnO by introducing transition elements have been identified. Methods for the formation of stable high-temperature ferromagnetism in the atomic structures of CrGeSe₃, CrGeTe₃, CrSiSe₃, CrSiTe₃, as well as in bulk ZnO with an admixture of transition elements Cr, Fe, Co due to external influences on the properties of nanostructures and nanostructured materials have been established.

Recommendations for use and scope: The studied atomic structures are promising materials for spintronic devices, with spin polarization close to 100 % and perpendicular anisotropy. To do this, the Curie temperature must be increased using strategies that affect the mechanisms of exchange interaction.

Научное издание

Баранова Мария Сергеевна

**МАГНИТНЫЙ ПОРЯДОК И ОБМЕННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ
В ДВУМЕРНЫХ АТОМНЫХ СТРУКТУРАХ
ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВСКОГО ТИПА И ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ ZnO
С ПЕРЕХОДНЫМИ ЭЛЕМЕНТАМИ**

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

по специальности 05.16.08 – Нанотехнологии и наноматериалы
(по отраслям)

Подписано в печать __.__.20__.	Формат 60×84 ¹ / ₁₆ .	Бумага офсетная.
Гарнитура «Таймс».	Отпечатано на ризографе.	Усл. печ. л. 1,63.
Уч.-изд. л. 1,4.	Тираж 60 экз.	Заказ 90.

Издатель и полиграфическое исполнение: учреждение образования
«Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».

Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя,
распространителя печатных изданий №1/238 от 24.03.2014,
№2/113 от 07.04.2014, №3/615 от 07.04.2014.

Ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск