**Звіт про науково-дослідну роботу: „Моделювання магнітних властивостей, магнітоелектричних взаємодій та аномалій поверхневих станів в наноматеріалах, мультифероїках і графеноподібних матеріалах”**

Мета роботи - теоретичне дослідження властивостей нанорозмірних матеріалів.

Терміни виконання наукової роботи: початок І кв. 2013 р.

закінчення IV кв. 2015 р.

**Керівник роботи**: Глинчук Майя Давидівна, д.ф.-м.н., член-кор. НАНУ, (Email:glin@ipms.kiev.ua)

**Скорочений зміст висновків рецензентів.**

В роботі вирішена низка актуальних фундаментальних задач сучасного

матеріалознавства та теорії твердого тіла. Одержані нові фундаментальні результати, які вносять суттєвий внесок у фізику твердого тіла. Слід відмітити теоретичне дослідження та розрахунки магнітних властивостей та механізмів появи d° - магнетизму в оксидних наноматеріалах. Встановлення природи фізичних явищ, які відповідають за модифікацію магнітоелектричних властивостей мультифероїків, що є перспективними матеріалами для застосування в наноелектроніці. Треба підкреслити, що більшість теоретичних досліджень, викладених в звіті, виконана вперше і вже знайшла визнання світової наукової спільноти.. Всі теоретичні дослідження виконані на високому науковому рівні. Автори володіють та застосовують новітні чисельні методи теоретичних розрахунків. Результати опубліковані в провідних фізичних журналах. Звіт заслуговує позитивної оцінки.

**Пропозиції про подальше використання результатів роботи.**

Теоретичні дослідження рекомендовано продовжити, накопичений досвід, комплекси програм, апробовані аналітичні та чисельні методи розрахунків рекомендовано використати для подальших теоретичних розрахунків властивостей наноматеріалів.

Дані про реєстрацію роботи: № 0113U000479

**РЕФЕРАТ**

**Мета роботи** - теоретичне дослідження властивостей нанорозмірних матеріалів. **Об’єктом дослідження** - нанорозмірні сегнетоелектрики, феромагнетики, кристали зі структурою сфалериту та фулерени.

Запропоновано теоретичний опис фізичної природи феромагнітних, cегнетоелектричних і магнітоелектричних властивостей твердих розчинів Pb(Fе1/2Та1/2)x(Zr1/2Ті1/2)1-х03 і Pb(Fe1/2Nb1/2)x(Zr1/2Ti1/2)1-x03 при температурах вищих за 100 К, включаючи феромагнетизм при кімнатній температурі, залежність фазової діаграми від складу з особливою увагою до мультифероїчних властивостей при кімнатній температурі. Проведено порівняння теорії з експериментально встановленими границями між параелектричною, сегнетоелектричною, парамагнітною, антиферомагнітною, феромагнітною, і магнітоелектричною фазами. Теоретичні розрахунки описали особливості вмикання магнітним полем сегнетоелектричного домену. Причини експериментально встановленої відсутності феромагнітної фази у PFN, PFT і твердому розчині PFN-РbТіОз встановлені в рамках запропонованої теорії.

Проведено теоретичне дослідження мультифероїків PbFe1/2Sb1/203 з високим ступенем хімічного упорядкування. Зокрема, ab initio розрахунки пояснили мікроскопічний механізм формування гігантських суперспінів. Проведено високотемпературне детальне обчислення морфології цих кластерів. Запропоновано новий механізм формування суперспіна в подвійних перовскітах PbFe1/2M1/203 (М = Nb, Та і Sb).

Проведено ab initio розрахунки електронної структури 4-х варіантів полярної поверхні CdTe (111) А(2x2), що закінчується Cd: ідеальної, релаксованої, реконструйованої з вилученням іона Cd і реконструйованої з дальшою релаксацією. Визначені оптимальні міжатомні сили і рівноважні ординати атомів Cd і Те верхніх чотирьох шарів. Розраховані зонні структури 4-х варіантів слебів та проаналізовано вплив релаксацій та конструкції на особливості поведінки зон провідності і валентної.Створено комп’ютерну модель фулереноподібного ZnO кластеру зі змішаним sp­3/sp2 типом зв'язків та алмазоподібною структурою оболонки, досліджено вплив геометрії поєднання уособлених атомних кластерів ZnxOx та домішок Мп, Co, Cd на електронні властивості і стабільність отриманих цеолітоподібних структур. Досліджено вплив магнітної домішки Со на оптимізовану геометрію і електронну структуру фулереноподібного кластеру Zn24Coi2036­ особленого та з урахуванням кристалічного простору. Встановлена перевага в значенні енергії когезії кластерів імплантованих домішкою Со в порівнянні з кластером на основі чистого ZnO.

**Ключові слова**: НАНОМАТЕРІАЛИ, ПОВЕРХНЕВИЙ СТАН, НАПІВПРОВІДНИК, ГРАФЕН, ЕЛЕКТРОННА СТРУКТУРА, АДСОРБЦІЯ КИСНЮ.

**Публікації**

М. D. Glinchuk, Е. A. Eliseev, V. Khist, А. N. Morozovska. Ferromagnetism induced by magnetic vacancies as a size effect in thin films of nonmagnetic oxides, Thin Solid Films, 534, 685-692 (2013).

S.M.Zubkova, T.V.Gorkavenko, L.N.Rusina, V.A.Makara, O.V.Smelyansky. Peculiarities of the temperature dependence of electronic properties of (111) surface in Si, Abstracts of the Third International conference “Modem problems of condensed state physics”. Kiev, October, 2013, p.85-87 (2013).

S.M.Zubkova, L.N.Rusina, T.V.Gorkavenko. Electronic properties of (111) Surface in ZnTe, ZnS, CdTe crystals, Materials of XIV International conference “Phys.and Technology of Thin Films and Nanosystems”. Ivano-Frankivsk, May, 2013, p.590.

С.М. Зубкова, Т.Н. Горкавенко, Л.Н Русина. Чисельний розрахунок електронної структури в об'ємі та на поверхні кристалів методом самоузгодженого псевдо потенціалу. Вісник Національного унів. ім. Тараса Шевченка, серія фіз.-мат. науки, вип.2,2013, с. 295-300.

С.М.Зубкова, Л.Н.Русина, В.Л.Бекенев. Электронные свойства поверхностей (111) и (0001) в кристаллах ZnTe, ZnS, CdTe со структурой сфалерита и вюрцита. Сборник трудов ИПМ НАНУ “Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении”. Киев, 2013, вып.15, с.50-68.

A.A Лисенко, B.B. Картузов, H.H. Роженко. Моделирование скручивания графена и монослоя BN в нанотрубку. // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. - К.: Ин-т проблем материаловедения НАН Украины, вып.15, 74- 80(2013).

С.М.Зубкова, Л.Н.Русина, Особенности электронного строения поверхности (111) в кристаллах типа А2В6, Доповіді НАНУ, № 1, 72-80 (2014).

Л.И. Овсянникова. Исследование влияния кадмия на свойства ZnCdO сплавов методом функционала электронной плотности с использованием Zn36036 кластеров. Электронная микроскопия и прочность материалов, т. 15, К: Ин-т пробл. Материаловедения НАН Украины (2014).

Лисенко А.А. Теоретическое исследование стабильности композитных нанотрубок С— BN—С, К.: Ин-т проблем материаловедения НАН Украины, вып.16, 92-101 (2014).

А. N. Morozovska, V. V. Khist, М. D. Glinchuk, V. Gopalan, Е. A. Eliseev. Linea antiferrodistortive-antiferromagnetic effect in multiferroics: physical manifestations. Phys Rev. В 92, 054421 (2015).

E. A. Eliseev, M. D. Glinchuk, V. Gopalan, A. N. Morozovska, Rotomagnetic couplings influence on the magnetic properties of antiferrodistortive antiferromagnets, J. Appl. Phys. 118, 144101 (2015)

A.N.Morozovska, Y.M.Vysochanski, O.V.Varenyk, M.V.Silibin, S.V.Kalinin, E.A.Eliseev, Flexocoupling impact on the generalized susceptibility and soft phonon modes in the ordered phase of ferroics, Phys. Rev. В 92,094308 (2015)

A.N. Morozovska, A. S. Pusenkova, O.V. Varenyk, S.V. Kalinin, E.A. Eliseev, M. V. Strikha, Finite size effects of hysteretic dynamics in multi-layer graphene on ferroelectric. Phys. Rev. B 91-, 235312(2015)

E. A. Eliseev, The Structure of a 180-Degree Domain Wall near the Surface of Ferroics. Ukr. J. Phys. 60, N 7, 627-633 (2015)

S. Nishimoto, S -L. Drechsler, R. Kuzian, J. Richter, J. van den Brink, Interplay of interchain interactions and exchan ge anisotrop y: Stability and f ragility o f multipolar states in spin - 12 quasi-one-dimensional frustrated helimagnets, Phys. Rev. B 92, 214415 (2015)