**Звіт про науково-дослідну роботу: „Моделювання особливостей фазових діаграм та фізичних властивостей оксидних мультифероїків з ротосиметрією, електронної структури реальних поверхонь в кристалах типу сфалериту і вюрциту та оксидних уособлених нанокластерів, імплантованих магнітними домішками"**

**Мета роботи** - моделювання особливостей фазових діаграм та фізичних властивостей оксидних мультифероїків та магнітних напівпровідників, електронної структури реальних поверхонь в кристалах типу сфалериту і вюрциту та оксидних нанокластерів, імплантованих магнітними домішками.

Терміни виконання наукової роботи: початок І кв. 2016 р.

закінчення IV кв. 2018 р.

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

**Скорочений зміст висновків рецензентів.**

В роботі виконано широкий обсяг досліджень по теорії мультифероїків, а також магнітних діелектричних і класичних напівпровідникових матеріалів з особливими поверхнями. Одержані нові фундаментальні результати, які вносять суттєвий внесок у фізику твердого тіла. Звертає на себе увагу запропонований метод розрахунку температури антиферомагнітного переходу у нанозеренній кераміці з урахуванням наявності в деяких мультифероїках антиферодисторсної фази. Запропонована модель рото-магнітного зв’язку дозволила пояснити виявлений експериментально факт зсуву температури Неєля на 45 К у кераміці порівняно з монокристалом. Привертає увагу також дослідження магнітної системи матеріалу Lі2CuO2, де показано, що величини обмінних взаємодій узгоджуються з вимірюваннями температурної залежності магнітної сприйнятливості. Більшість результатів виконаних за темою робіт опубліковано у високо рейтингових наукових виданнях, як зарубіжних, так і вітчизняних. Це свідчить про високий науковий рівень виконаних досліджень, які визнані світовою науковою спільнотою і є перспективними для подальших досліджень. 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: № 0116U003511

**РЕФЕРАТ**

**Об’єктом дослідження** були мультифероїки, феромагнетики, кристали зі структурою сфалериту та вюрциту.

**Мета роботи** – моделювання особливостей фазових діаграм та фізичних властивостей оксидних мультифероїків та магнітних напівпровідників, електронної структури реальних поверхонь в кристалах типу сфалериту і вюрциту та оксидних нанокластерів, імплантованих магнітними домішками.

Вперше отримано суттєвий зв’язок між структурними деформаціями, поляризацією та намагніченістю для наносистеми мультифероїка EuxSr1-xTiO3 , розраховано фазові діаграми для нанотрубок і нанострижнів. Вперше розраховано неочікувано значне зростання температури антиферо­магнітного фазового переходу у кераміці мультифероїка BiFeO3, наведене розмірами зерен та внеском ротомагнітного та магнітострикційного зв’язків. Теорія добре описала експериментально спостережене зростання температури Неєля до 690 К у кераміці порівняно з 645 К у монокристалі.

Для розбавлених магнітних напівпровідників показана можливість феримагнітного упорядкування за малої концентрації магнітних домішок. На прикладі магнітної системи Lі2CuO2 показано, що для моделювання магнітної сприйнятливості фрустрованих магнетиків у великому діапазоні температур необхідно користуватися методом високотемпературного розкладання високого порядку, а величини обмінних взаємодій узгоджуються з вимірюваннями температурної залежності магнітної сприйнятливості. Розвинуто одноетапну теорію фотоелектронної спектроскопії з кутовим розділенням, що формулюється у базисі локалізованих орбіталей.

Проведено ab initio розрахунки електронної структури 4-х варіантів полярної поверхні СdTe (111) А (2х2), що закінчується Cd: ідеальної, релаксованої, реконструйованої з вилученням іона Cd і реконструйованої з подальшою релаксацією. Визначені оптимальні міжатомні сили і рівноважні координати атомів Сd і Te верхніх чотирьох шарів. Розраховані зонні структури 4-х варіантів слебів та проаналізовано вплив релаксацій та реконструкції на особливості поведінки зон провідності і валентної.

Проведено дослідження засобами обчислювальної фізики структурних, електронних і когезійних властивостей ізольованих фулереноподібних кластерів на основі прямозонних напівпровідників A2B6: ZnO, ZnSe, CdSe. Проведені обчислення з перших принципів атомної і електронної структури фулереноподібних кластерів ZnnSen и CdnSen для n = 12, 36, 48, 60. Вперше побудована модель двошарових фулереноподібних кластерів (ZnSe)60 і (CdSe)60 зі змішаним sp2/sp3 типом зв´язків.

**Ключові слова**: мультифероїк, поверхневий стан, напівпровідник, фазовий перехід, електронна структура, фулерен.

**Публікації**

A. N. Morozovska, E. A. Eliseev, M. D. Glinchuk et al., Flexocouling impact on size effects of piezoresponse and conductance in mixed-type ferroelectric semiconductors under applied pressure, Phys. Rev. B 94, 174101(9) (2016).

E. A. Eliseev, A. V. Semchenko, Y. M. Fomichov, M. D. Glinchuk, V. V. Sidsky, V. V. Kolos, Yu. M. Pleskachevsky, M. D. Glinchuk, E. A. Eliseev, A. N. Morozovska, Landau-Ginzburg description of anomalous properties of novel room temperature multiferroics Pb(Fe1/2Ta1/2)x(Zr0.53Ti0.47)1-xO3 and Pb(Fe1/2Nb1/2)x(Zr0.53Ti0.47)1-xO3, J. Appl. Phys. 119, 024102(10) (2016).

R. O. Kuzіan, J. Rіchter, M. D. Kuz’mіn, R. Hayn, Lіeb-Mattіs ferrіmagnetіsm іn magnetіc semіconductors, [Phys. Rev.](http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.93.214433) [B,](http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.93.214433) 93, 214433 (2016).

R. O. Kuzіan, E. E. Krasovskіі One-step approach to ARPES from strongly correlated solіds: A Mott − Hubbard system, [Phys. Rev.](http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.94.115119) [B](http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.94.115119) 94, 115119 (2016).

L. Ovsiannikova, V. Kartuzov, I. Shtepliuk, G. Lashkarev, [Study of the Clusterization of CdO Phase in ZnCdO Alloys by Modeling Fullerene-Like Zn44Cd4O48 Cluster](javascript:void(0)), Acta Physica Polonica A 129, 41–43 (2016).

С.М.Зубкова, В.Л.Бекенев. Первопринципное изучение свойств атомной и электронной поверхности CdTe (111)B –(2√3x4) орт. Сборник трудов ИПМ НАНУ “Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении”. Киев, 2016, вып.18, с.56-71

E. A. Eliseev, A. N. Morozovska, M. D. Glinchuk, S. V. Kalinin, Lost surface waves in nonpiezoelectric solids, Phys. Rev. B 96, 045411(11) (2017).

A. N. Morozovska, M. D. Glinchuk, E. A. Eliseev, Yu. M. Vysochanskii, Flexocoupling-induced soft acoustic mode and the spatially modulated phases in ferroelectrics, Phys. Rev. B 96, 094111(11) (2017).

V. V. Khist, E. A. Eliseev, M. D. Glinchuk, D. V. Karpinsky, M. V. Silibin, A. N. Morozovska. Size Effects of Ferroelectric and Magnetoelectric Properties of Semi-ellipsoidal Bismuth Ferrite Nanoparticles. Journal of Alloys and Compounds, 714, 15, 303–310 (2017).

D. V. Karpinsky, E. A. Eliseev, M. D. Glinchuk, A. N. Morozovska, et al. A Comprehensive Thermodynamic Potential and Phase Diagram for Multiferroic Bismuth Ferrite. npj Computational Materials 3:20 (2017).

В.Л.Бекенев, С.М.Зубкова. Атомная и электронная структура поверхности CdTe (111)B –(2√3x4) орт. Физика и техника полупроводников, т.51, вып. 1, 2017, с. 26 – 35.

V.L.Bekenev, S.M.Zubkova. Atomic and Electronic Structure of the CdTe (111)B –(2√3x4) rect. Surface. Semiconductors, 2017, v.51, No.1, p.p. 26-35.

L. Ovsiannikova, M. Dranchuk, G. Lashkarev, V. Kartuzov, M. Godlewski, Study of donor Al impurity state in ZnO by fullerene like model, Superlattice and Microstructures 107. 1–4 (2017).

С.М.Зубкова, В.Л.Бекенев. Теоретическое изучение атомной и электронной структуры поверхности (111) в кристаллах ZnSe и CdSe. Сборник трудов ИПМ НАНУ “Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении”. Киев, 2017, вып.19, с.69-89

A. N. Morozovska, E. A. Eliseev, M. D. Glinchuk, et al., Rotomagnetic coupling in fine-grained multiferroic BiFeO3: Theory and experiment, Phys. Rev. B 97, 134115(9) (2018).

A. N. Morozovska, V. V. Khist, M. D. Glinchuk, E. A. Eliseev et al. Flexoelectricity induced spatially modulated phases in ferroics and liquid crystals. (Author review) Journal of Molecular Liquids 267, 550–559 (2018).

M. D. Glinchuk, E. A. Eliseev, G. Li, J. Zeng, S. V. Kalinin, A. N. Morozovska. Oxygen vacancies induced ferroelectricity in relaxors with ABO3 structure Phys.Rev. B 98, 094102 (2018).

E. A. Eliseev, A. N. Morozovska. Hidden Symmetry of Flexoelectric Coupling. Phys. Rev. B 98, 094108 (2018).

Yu. O. Zagorodniy, R. O. Kuzian, I. V. Kondakova, et al. Chemical disorder and 207Pb hyperfine fields in the magnetoelectric multiferroic Pb(Fe1/2Sb1/2)O3 and its solid solution with Pb(Fe1/2Nb1/2)O3, Phys. Rev. Materials 2, 014401 (2018).

A. N. Morozovska, C. M. Scherbakov, M.D. Glinchuk. Dependence of the soft phonon spectra on flexoelectric coupling in ferroelectrics. Ukr. J. Phys. 63, No. 2, 168 (2018).

R O Kuzian, R Klingeler, W E A Lorenz, et al. Comment on 'Oxygen vacancy-induced magnetic moment in edge-sharing CuO2 chains of Li2CuO2', New J. Phys. 20, 058001 (2018).

С.М.Зубкова, В.Л.Бекенев. Атомная и электронная структура реконструкций поверхности (111) в кристаллах ZnSe и CdSe. ФТТ, т.60, вып.1, 187-201 (2018).

С.М.Зубкова, В.Л.Бекенев. Ocoбенности атомной и электронной структуры поверхности 3С-SiC (111) (2√3 х 2√3)R30o. ФТТ, т. 60, вып. 10, 187-201 (2018).

E. A. Eliseev, A. N. Morozovska, C. T. Nelson, S. V. Kalinin. Intrinsic structural instabilities of domain walls driven by gradient couplings: meandering anferrodistortive-ferroelectric domain walls in BiFeO3. <http://arxiv.org/abs/1810.06668> .

M. D. Glinchuk, A. N. Morozovska, D. V. Karpinsky, M. V. Silibin. Anomalies of Phase Diagrams and Physical Properties of Antiferrodistortive Perovskite Oxides. (Author Review) Journal of Alloys and Compounds (2019).