

рис. 2. Рассчитанные зависимости отношения  $w/l$  для включений с разной площадью их сечений  $S$ , мигрировавших в одинаковых тепловых условиях при разной степени затрудненности межфазных процессов (степень затрудненности межфазных процессов возрастает с номером кривой;  $\eta = \gamma_{\max}/\gamma_{\min} = 1.4$ )

Однако, как видно из рис. 2, если иметь информацию об отношении  $w/l$  для включений с разной площадью их сечений  $S$ , мигрировавших в одинаковых тепловых условиях, то путем экстраполяции аппроксимирующей зависимости  $w/l = f(S)$  к  $S=0$ , можно оценить истинное значение анизотропии межфазной энергии. В докладе рассматривается вопрос о выборе площадей сечений включений, по формам которых можно определить анизотропию межфазной энергии с необходимой точностью.

Список публикаций:

- [1] Cline H.E., Anthony T.R. // *J. Appl. Phys.* 1977. V. 48. P. 5096.  
 [2] Garmashov S.I., Gershanov V.Y. // *J. Cryst. Gr.* 2009. V. 311. P. 413.  
 [3] Garmashov S.I., Prikhodko Y.V. // *Abstracts of Lecturers and Young Scientists of Fourth China-Russia Conference on Numerical Algebra with Applications (CRC-NAA'15)*, 26-29 June 2015, Rostov-on-Don. 2015. P. 99.

## Влияние интеркаляции хрома на структуру и кинетические свойства системы $\text{Cr}_x\text{VSe}_2$ ( $x \geq 0.25$ )

*Радостев Илья Николаевич*

*Селезнева Надежда Владимировна, Топорова Наталья Максимовна, Шерокалова Елизавета Маратовна*

*Уральский федеральный университет*

*Селезнева Надежда Владимировна, к.ф.-м.н.*

*[radostev.ilya4955148@gmail.com](mailto:radostev.ilya4955148@gmail.com)*

Из литературных данных известно, что в диселениде ванадия ( $\text{VSe}_2$ ) на температурной зависимости электросопротивления при  $T_1 \sim 110$  К наблюдается аномалия. Аналогичная аномалия наблюдается и в изоструктурном диселениде титана ( $\text{TiSe}_2$ ) при  $T_1 \sim 150$  К. Такое поведение вызвано формированием состояния с волной зарядовой плотности (ВЗП) при  $T < T_1$  [1, 2]. Интеркаляции хрома  $x \leq 0.02$  в  $\text{Cr}_x\text{TiSe}_2$  приводит к подавлению перехода. На основании детальных структурных исследований, данных магнитных измерений и теплового расширения для системы  $\text{Cr}_x\text{TiSe}_2$  сделан вывод о возможном возвращении ВЗП при большой концентрации внедренных атомов хрома  $x \geq 0.25$  [1].

Данная работа посвящена изучению влияния интеркаляции хрома в  $\text{Cr}_x\text{VSe}_2$  ( $x = 0, 0.25, 0.33, 0.5, 0.6$ ) на структуру и кинетические свойства.

Синтез системы  $\text{Cr}_x\text{VSe}_2$  ( $x = 0, 0.2, 0.25, 0.33, 0.5, 0.6$ ) производился методом твердофазных реакций по двухступенчатой технологии при температуре  $580^\circ\text{C}$  с последующим медленным охлаждением. Для проведения рентгенофазового анализа и уточнения параметров элементарных ячеек использовался метод рентгеновской дифракции на порошковых материалах. Измерения электрического сопротивления проводились стандартным четырехзондовым методом на образцах правильной геометрической формы.

Соединения  $\text{Cr}_x\text{VSe}_2$   $0.25 \leq x \leq 0.6$  индицируются в моноклинной сингонии с пространственной группой  $I 2/m$ . Атомы хрома упорядочиваются в цепочки с образованием сверхструктуры  $\sqrt{3}a_0 \times a_0 \times 2c_0$ . В исходном соединении-матрице  $\text{VSe}_2$ , синтезированном при  $T = 580^\circ\text{C}$ , наблюдается металлическое поведение сопротивления и обнаружена аномалия в области  $T_1 = 110$  К, что согласуется с литературными источниками. На температурных зависимостях сопротивления  $\text{Cr}_x\text{VSe}_2$  при концентрациях хрома  $x = 0, 0.25, 0.33, 0.5, 0.6$

наблюдаются аномалии в области температур 110 К – 160 К. При термоциклировании выявлен заметный гистерезис в этой области температур (рис. 1). Это дает возможность предположить, что большая концентрация хрома приводит к возобновлению перехода в состояние с ВЗП в  $\text{Cr}_x\text{VSe}_2$  аналогично  $\text{Cr}_x\text{TiSe}_2$ .

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-32-00278 мол\_а.

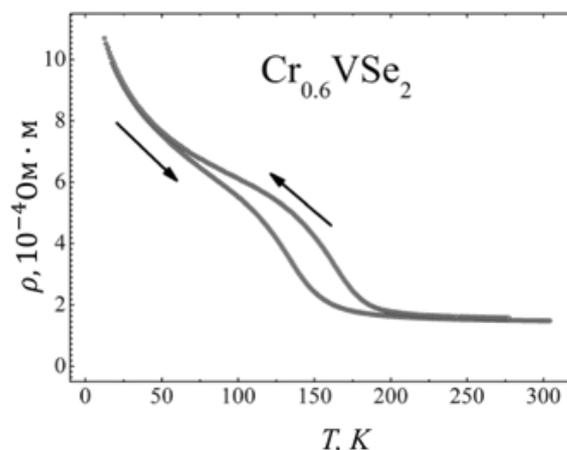


рис.1. Температурная зависимость электропроводности состава  $\text{Cr}_{0.6}\text{VSe}_2$

Список публикаций:

[1] N.V. Selezneva et al. // *J. Phys. Condens. Matter*. 2016. Т. 28. №31. 315401

[2] Libowitz G.G. // *J. Phys. Chem. Solids*. 1994. Т. 55. №12. С. 1461

## Изменение химической связи в ряду алмаза, нитрида бора и халькопирита $\text{BC}_2\text{N}$

*Руковицына Ксения Сергеевна*

*Кемеровский государственный университет*

*Поплавной Анатолий Степанович, д.ф.-м.н.*

[rukovitsyna.ksu@mail.ru](mailto:rukovitsyna.ksu@mail.ru)

В современном материаловедении важной задачей является поиск новых супертвердых соединений и сопоставление их свойств известными и хорошо изученными. В представленной работе на основе единого, первопринципного подхода исследованы электронные строения и химическая связь в ряду: алмаз-нитрид бора-халькопирит  $\text{BC}_2\text{N}$ . Установлены новые особенности химической связи соединения  $\text{BC}_2\text{N}$ .

В расчетах электронного строения алмаза, нитрида бора и халькопирита применялся пакет CRYSTAL09 в рамках приближения Хартри-Фока и теории функционала плотности (DFT-LDA). В вычислениях использовались гибридные обменно-корреляционные функционалы B3LYP, LDA Pz и базисные наборы для алмаза: C\_pob\_TZVP\_2012, для нитрида бора: B\_pob\_TZVP\_2012 и N\_pob\_TZVP\_2012 кристалла  $\text{BC}_2\text{N}$ : B\_6-21G\*\_pople, C\_6-21G\*\_catti\_1993, N\_6-21G\*\_dovesi\_1990[3]. Применялась сетка 8\*8\*8.

Алмаз имеет пространственную группу симметрии  $Fd3m$  с постоянной решеткой  $a=3.567(\text{Å})$ . Нитрид бора имеет постоянную решетку равной  $a=3.615(\text{Å})$  и пространственную группу симметрии  $F43m$ . У халькопирита группа симметрии  $I-42d$  с параметрами решетки  $a=3.6526(\text{Å})$  и  $c=7.2310(\text{Å})$ . Параметры полученной оптимизации структур близки к экспериментальным значениям, в пределах 2 %.

На рисунке представлены карты вычисленной деформационной плотности. Деформационная электронная плотность алмаза показала, что имеет место чисто ковалентную связь, осуществляемая за счет электронной пары между ближайшими атомами. Результат расчета деформационной электронной плотности нитрида бора показывает, что симметричные ковалентные электронные “мостики” между ионами углерода в алмазе в  $\text{BN}$  оказались сильно деформированными, так что максимум деформационной плотности сместился в сторону иона азота и появился максимум за этим ионом. Такое распределение деформационной плотности характерно для смешанной ионно-ковалентной связи, которая обычно менее прочна, чем идеальная ковалентная связь.