

ДИМЕРИЗАЦИЯ В СОЕДИНЕНИИ Na_2RuO_3 ПОД ДАВЛЕНИЕМ

Газизова Д.Д.^{1*}, Ушаков А.В.², Стрельцов С.В.^{1,2}

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: darya.05.02@mail.ru

DIMERIZATION IN Na_2RuO_3 COMPOUND UNDER PRESSURE

Gazizova D.D.^{1*}, Ushakov A.V.², Streltsov S.V.^{1,2}

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Institute of Metal Physics, Russian Academy of Science, Yekaterinburg, Russia

In the thesis are presented results of pressure calculation using first-principal calculations using density functional theory. Was found that may expect a structural transition in Na_2RuO_3 at ~ 3 GPa.

В последние годы в физике твердого тела большое внимание уделяется соединениям с кристаллической решеткой «пчелиные соты». Данные соединения

демонстрируют широкий спектр различных магнитных и электрических свойств [1, 2].

В данной работе изучалась возможность образования димеризованной кристаллической структуры Na_2RuO_3 [3] под давлением, с использованием первопринципных расчетов в теории функционала электронной плотности (DFT – density functional theory) в приближение обобщенного градиента (GGA – generalized gradient approximation) [4]. Был обнаружен возможный фазовый переход при внешнем давлении 3 ГПа. В данной фазе ионы Ru образуют димеры, а также проявляются сильные изменения в электронных и магнитных свойствах кристалла Na_2RuO_3 , связанные с разрушением дальнего магнит-

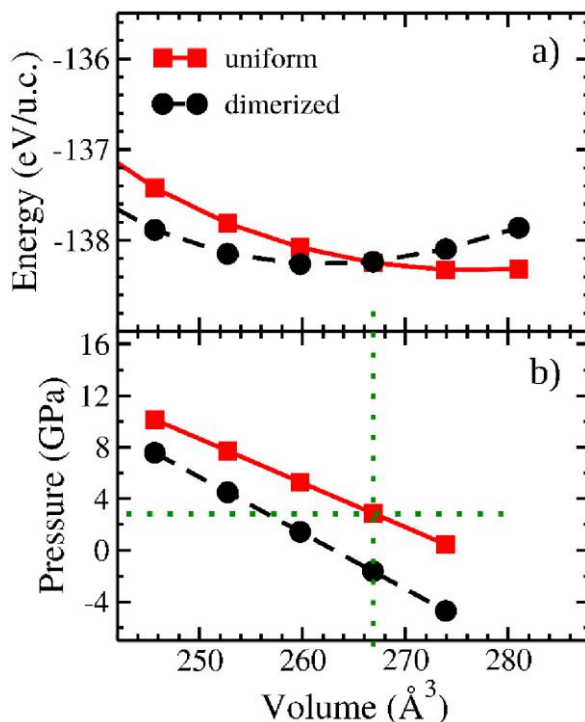


Рис. 1. (а) Зависимость полной энергии двух структур Na_2RuO_3 (без и со структурными димерами $\text{Ru} - \text{Ru}$) для различных объемов, (б) Зависимость давления от объема для этих двух структур.

ного порядка в низкотемпературной фазе и образованием спиновой щели при давлении большем, чем 3ГПа.

По данной теме написана рукопись и отправлена в журнал JETP Letters.

1. Miura Y., Yasui Y., Sato M., et al., J. Phys. Soc. Jpn. **76** 033705 (2007). Вонсовский С.В., Магнетизм, Наука (1971).
2. Kimber S. A. J., Mazin I. I., Shen J., et al., Phys. Rev. B **89**, 081408 (2014).
3. Wang J. C., Terzic J., Qi T. F., et al., Phys. Rev. B **90**, 161110(R) (2014).
4. Изюмов Ю.А., Анисимов В.И., Электронная структура соединений с сильными корреляциями, -М. –Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика» (2008).

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЯВЛЕНИЯ ЭФФЕКТА ЯНА-ТЕЛЛЕРА В УПРУГИХ СВОЙСТВАХ КРИСТАЛЛА ZnSe:Ni МЕТОДОМ АККУСТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Шутов И.С., Харитонов К.И., Сарычев М.Н.*

Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: m.n.sarychev@urfu.ru

THE STUDY OF MANIFESTATIONS OF THE JAHN-TELLER EFFECT IN THE ELASTIC PROPERTIES OF CRYSTALS ZNSE:NI BY ACOUSTIC SPECTROSCOPY

Shutov I.S., Haritonov K.I., Sarychev M.N.*

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The article is devoted to the method of the evaluation of the relaxation contribution to the total elastic moduli for crystals with Jahn–Teller (JT) impurities applied to the analysis of the experimentally measured ultrasound velocity and attenuation in ZnSe:Ni.

В ходе ультразвуковых измерений были сняты зависимости амплитуды и скорости звуковой волны, проходящей через образец от температуры в диапазоне 4-120К. Измерительная установка построена по схеме с фазовым детектированием с помощью автоподстройки частоты что позволяет, используя выражение 1, перейти к скоростям ультразвуковых волн.

$$\frac{\Delta f}{f_0} = \frac{\Delta v}{v_0} \quad (1)$$

Ультразвуковые колебания генерировались с помощью пьезопреобразователей на частотах 25-167 МГц. Данные были получены как для продольных коле-