

ИССЛЕДОВАНИЕ ИНТЕРКАЛЯЦИОННОЙ СИСТЕМЫ $\text{Fe}_{1/3}\text{TiS}_2$ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭВОЛЮЦИОННЫХ АЛГОРИТМОВ И ПЕРВОПРИНЦИПНЫХ РАСЧЁТОВ

Чубарова А.А.¹, Мамонова М.В.¹, Кемпф Л.А.¹

¹) Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского, г.Омск, Россия
E-mail: ChubarovaAA@stud.omsu.ru

STUDY OF THE $\text{Fe}_{1/3}\text{TiS}_2$ INTERCALATION SYSTEM USING EVOLUTIONARY ALGORITHMS AND FIRST-PRINCIPLE CALCULATIONS

Chubarova A.A.¹, Mamonova M.V.¹, Kempf L.A.¹

¹) F.M. Dostoevsky Omsk State University, Omsk, Russia

The Fe_xTiS_2 intercalation system with atom Fe concentration $x=1/3$ was studied using first-principle calculations and evolutionary algorithms. Calculations were performed for a single unit cell for various magnetic and nonmagnetic configurations with changes in the shape and volume of the unit cell.

Интеркаляционные соединения переходных металлов относятся к материалам, обладающих большим значением коэффициента магнитосопротивления, чем вызывают большой интерес для исследования в физике конденсированного состояния [1,2]. Интеркаляция - введение «гостевых» атомов, ионов или молекул между слоями слоистых соединений, и результирующие вещества, полученные в процессе интеркаляции, называются «интеркаляционными соединениями» или «интеркалатами». Интеркалаты, содержащие атомы переходных металлов, типа Fe_xTS_2 , где T = Ti или Ta, проявляют различные магнитные состояния в зависимости от концентрации интеркалируемого железа [3].

В данной работе проводилось исследование интеркаляционного соединения Fe_xTiS_2 с концентрацией атомов железа $x = 1/3$ с применением первопринципных расчётов [4] и эволюционных алгоритмов программного комплекса USPEX [5].

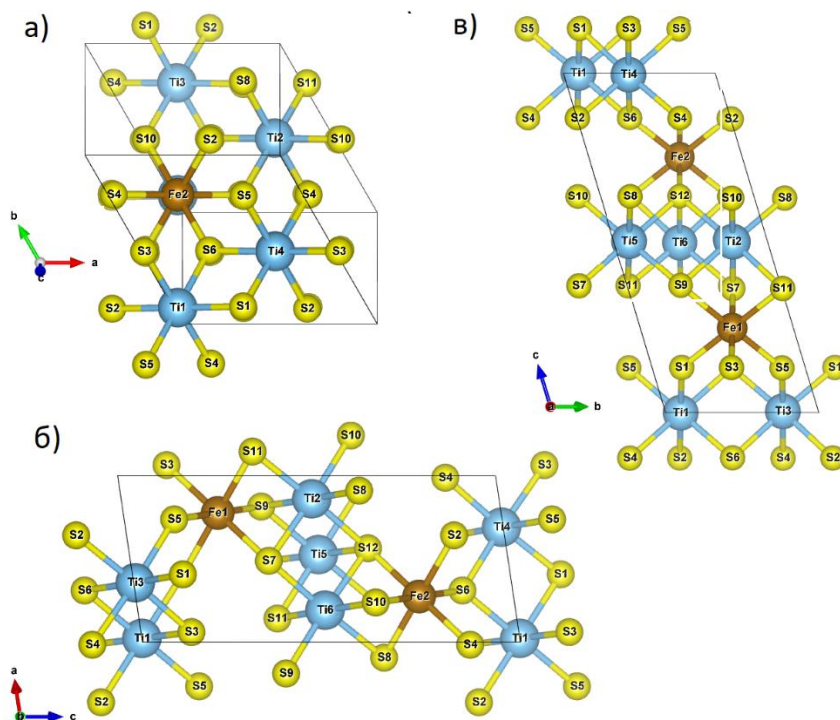


Рис. 1. Вариант лучшей структуры, выбранный эволюционным алгоритмом с применением программы оптимизации VASP в разных проекциях.

По результатам проведенных расчётов были получены кристаллические структуры с помощью алгоритмов USPEX и первопринципных расчётов для немагнитной и различных магнитных конфигураций. Предсказаны кристаллические структуры при учёте изменения формы и объёма элементарной ячейки. При исследовании немагнитной конфигурации (рис. 1) была получена структура, у которой наблюдается сохранение октаэдральной формы соединения TiS_2 и FeS_2 , изменения угла в проекции координатной оси C , незначительное смещение атомных слоёв в ячейки. При исследовании магнитных конфигураций выявлено нарушения октаэдральной формы соединений, аномально большие значения магнитных моментов Ti , превышающие магнитные моменты атомов Fe .

Исследования проведены с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием «Центр обработки и хранения научных данных ДВО РАН», финансируемого Минобрнауки России по соглашению № 075-15-2021-663.

1. McGuire T., Potter R.L., IEEE Trans. on Magn, 11, 1018, (1975)
2. Motizuki K., Suzuki N., Springer Series in Materials Science, 27, 106–138, (1994)
3. Choe J., Lee K., Huang C.L., Trivedi N., Morosan E., Phys. Rev., 99, 064420, (2019)
4. Kresse P.G., Furthmuller J., Phys. Rev., 54, 11169, (1996)
5. Lyakhov A.O., Oganov A.R., Valle M., Comp. Phys. Comm., 181, P. 1623 – 1632, (2010)