увеличением примесных атомов, которые приводят к замещению атомов Al и N в структуре. Возникновение дополнительных дефектов в структуре приводит к поглощению TSL центров и снижению интенсивности спектров.

- 1. Kozlovskiy A.L. et al., Vacuum. 155, 412-422 (2018).
- 2. Kozlovskiy A., et al. Ceramics International. 44(16), 19787-19793 (2018).

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА, ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВА Мn_{1.8}Co_{1.2}Al и СОСТОЯНИЕ СПИНОВОГО БЕСЩЕЛЕВОГО ПОЛУПРОВОДНИКА

Коренистов П.С. 1,2* , Шредер Е.И. 2 , Лукоянов А.В. 1,2 , Марченков В.В. 1,2

- 1) Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
- ²⁾ Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия *E-mail: korenistov1995@mail.ru

ELECTRONIC STRUCTURE, ELECTRICAL AND OPTICAL PROPERTIES OF Mn_{1.8}Co_{1.2}Al ALLOY AND SPIN GAPLESS SEMICONDUCTOR STATE

Korenistov P.S. 1,2*, Shreder E.I.2, Lykoyanov A.V.1,2, Marchenkov V.V.1,2

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia ²⁾ M.N. Mikheev Institute of Metal Physics, Yekaterinburg, Russia

Alloy Mn_{1.8}Co_{1.2}Al was synthesized, and its electroresistivity and optical properties were investigated. A comparison of the obtained experimental data with the results of calculations of the electronic structure of a similar alloy composition was carried out. The obtained results are discussed in frame of modern ideas on spin gapless semiconductors.

В последние годы внимание исследователей привлекают сплавы Гейслера Mn_2CoZ , где Z – элемент III, IV – группы. Данные сплавы относятся к так называемым спиновым бесщелевым полупроводникам (СБП), в которых может возникать зонная щель в одной спиновой подзоне носителей тока и нулевая щель в другой, что может приводить к сильной спиновой поляризации носителей заряда. Это делает данные сплавы многообещающими материалами для спинтроники. Атомный беспорядок, возникающий за счет взаимного замещения атомов в таких материалах, может стать причиной «закрытия» энергетической щели в электронной плотности состояний, а также к увеличению плотности состояний для электронов со спином вверх, т.е. к нарушению условий СБП-состояния. Вероятнее всего атомный беспорядок будет происходить и при отклонении состава от стехиометрического, что должно проявляться в электрических и оптических свойствах таких СБП-материалов.

Поэтому был синтезирован сплав $Mn_{1.8}Co_{1.2}Al$, исследованы его электросопротивление и оптические свойства, проведено сравнение полученных экспериментальных данных с результатами расчетов близкого по составу сплава $Mn_{1.75}Co_{1.25}Al$. Цель работы — изучение электронных свойств спинового бесщелевого полупроводника $Mn_{1.8}Co_{1.2}Al$, трансформации его электронной структуры при изменении типа кристаллической структуры.

Работа выполнена в рамках государственного задания (тема "Электрон", AAAAA18-118020190098-5 и "Спин", № AAAA-A18-118020290104-2) при частичной поддержке РФФИ (проекты № 16-52-48012 и № 18-02-00739) и Правительства Российской Федерации (постановление № 211, контракт № 02.A03.21.0006).

МИКРОСТРУКТУРА ТЕРМОБАРИЧЕСКИ ОБРАБОТАННОЙ СИСТЕМЫ Al-Ti-N

Зыков Ф.М.^{1*}, Кудякова В.С.¹, Шишкин Р.А.¹, Юферов Ю.В.¹

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

*E-mail: <u>zykov.fm@yahoo.com</u>

MICROSTRUCTURE OF THE HPHT TREATED AI-Ti-N SYSTEM

Zykov F.M.^{1*}, Kudyakova V.S.¹, Shishkin R.A.¹, Yuferov Yu.V.¹

1) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Microstructure of the HPHT treated Al-Ti-N system was investigated by XRD, Raman spectroscopy, BSE and chemical microanalysis to study influence of the TiN additivity on the parameters of the AlN polymorphic transition.

Известно несколько кристаллических модификаций нитрида алюминия: наиболее устойчивая (и хорошо изученная) обладает гексагональной решеткой типа вюрцита (w-AlN), а известные метастабильные фазы — кубической структурой типа сфалерита (zb-AlN) и каменной соли (rs-AlN), для которых спрогнозированы более высокие значения теплопроводности, механической и электрической прочностью вследствие большей симметрии кристаллической структуры. Модификация rs-AlN становится стабильной при повышенных давлениях (более 16,5 $\Gamma\Pi$ a), в то время как zb-AlN является метастабильной модификацией во всех изученных диапазонах давлений.

В настоящей работе представлено исследование полиморфного перехода смеси AlN/TiN с небольшой концентрацией TiN (3 мол. %) с оценкой влияния добавки нитрида титана, обладающего схожими параметрами ячейки с кубическим нитридом алюминия, на значение давления, стабилизирующего кубический нитрид алюминия.