

возникающей при использовании метода DMFT, следует ожидать отрицательных значений D , когда как результаты расчетов НПХФ, демонстрирующие стабильное ферромагнитное решение, должны привести к положительному значению D .

В работе [3] было показано, что величина константы спиновой жесткости может быть оценена по следующей формуле:

$$D = \sum_{\alpha} \sum_j J_{0j} \cdot (R_{0j}^{\alpha})^2, \quad (1)$$

где индекс j обозначает номер соседнего атома Cr к некоторому фиксированному атому, R_{0j}^{α} - α -компонента соответствующего радиус-вектора, J_{0j} - величина обменного интеграла. Применение (1) приводит к следующей оценке D : -46 мэВ (DMFT), 43 мэВ (НПХФ). Характер полученных величин полностью соответствует ожидаемому. Проведенный расчет подкрепляет сделанный в работе [4] вывод о том, что учет динамических электронных корреляций играет очень важную роль в корректном описании магнитных свойств таких сильно коррелированных систем, как CrO_2 .

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-32-00076.

1. Skomski R., Simple Models of Magnetism, Oxford University Press (2008)
2. Katsnelson M.I., Lichtenstein A.I., Phys. Rev. B, **61**, 8906 (2000)
3. J. Phys. F: Met. Phys., **14**, L125 - L128 (1984)
4. Solovyev I.V., Kashin I.V., Mazurenko V.V., Phys. Rev. B, **92**, 144407 (2015)

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СИСТЕМЫ Gd_xNbSe_2

Симонов М.Н.*, Плещев В.Г.

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

*E-mail: mihail.jaxak.simonov@gmail.com

ELECTRIC AND MAGNETIC PROPERTIES OF Gd_xNbSe_2

Simonov M.N.*, Pleschov V.G.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The layered Gd_xNbSe_2 compounds with the Gd content from $x=0.1$ up to $x=0.33$ are synthesized by the direct intercalation of Gd into NbSe_2 matrix. The measurements of the dc magnetic susceptibility and magnetization in steady and pulsed magnetic fields have revealed an paramagnetic behavior of Gd_xNbSe_2 . The effective magnetic moment per Gd ion in Gd_xNbSe_2 is observed to be close to μ_{eff} for the free Gd^{3+} ion.

Соединение $NbSe_2$ относится к семейству металлических слоистых соединений MX_2 , (где $M = V, Nb$ или Ta и $X = S$ или Se). Особый интерес при изучении $NbSe_2$ вызывает существование сверхпроводимости ($T_C = 7.4$ К) и переход в состояние с волной зарядовой плотности (ВЗП) при 39 К [1]. Также, по данным работы [2] соединение $NbSe_2$ имеет семь различных типов структур (шесть структурных политипов), различающихся последовательностью слоев плотно упакованных атомов. Внедрение иных атомов (интеркалирование), молекул и даже структурных фрагментов между слоями дает возможность получать материалы с новыми свойствами.

Поликристаллические образцы Gd_xNbSe_2 , где $x = (0.1, 0.2, 0.25, 0.33)$, были получены обычным методом твердофазного ампульного синтеза в вакуумированных кварцевых ампулах при температуре отжига 800 °С в два этапа: получение 2H-модификации матрицы $NbSe_2$ с последующим интеркалированием атомами гадолиния. Рентгеновская аттестация образцов произведена на дифрактометре BrukerD8 Advance. Измерения электросопротивления проводились четырехзондовым методом в области температур от 7 до 300 К, а измерения магнитной восприимчивости в интервале от 2 до 350 К и намагниченности в полях до 70 кЭ.

Полученные температурные зависимости электросопротивления для соединений Gd_xNbSe_2 показали, что внедрение атомов гадолиния подавляет переходы с ВЗП и в сверхпроводящее состояние. По полученным зависимостям магнитной восприимчивости от температуры видно, что, несмотря на увеличение концентрации Gd , образцы имеют парамагнитное упорядочение и подчиняется закону Кюри-Вейсса во всем температурном интервале. Рассчитанные параметры, входящие в закон, приведены в таблице 1.

Таблица 1. Результаты обработки измерений для системы Gd_xNbSe_2 .

| x | $\chi_0, 10^{-6} \text{ см}^3 / \text{г}$ | $C, \text{ г}^* \text{ К} / \text{ см}^3$ | $\Theta, \text{ К}$ | $\mu_{\text{эфф}}, \mu_B$ |
|------|---|---|---------------------|---------------------------|
| 0.1 | -0.497 | 0.00311 | -26 | 8.14 |
| 0.2 | -0.258 | 0.00571 | -17 | 7.79 |
| 0.25 | -2.961 | 0.00783 | -22 | 8.17 |
| 0.33 | -3.001 | 0.00923 | -29 | 7.72 |

Рассчитанный эффективный магнитный момент на ион гадолиния варьируется около теоретического значения для свободного иона ($\mu_{\text{эфф}}^{Gd^{3+}} = 7.94\mu_B$), что указывает на хорошее экранирование $4f$ оболочки, характерное для редкоземельных элементов.

1. C. Berthier, D. Jerome & P. Molinie, J. Phys. C: Solid State Physics 11, 797 (1978).

2. H. Katzke, P. Toledano, W. Depmeier. Phase transitions between polytypes and intralayer superstructures in transition metal dichalcogenid., Phys. Rev., Vol.69, 134111(2004)

ELECTROSTRICTION MEASUREMENTS IN GADOLINIUM DOPED CERIUM OXIDE

Ushakov A.D.^{1*}, Alikin D.O.¹, Slautin B.N.¹, Mishuk E.²,
Lubomirsky I.², Shur V.Ya.¹, Kholkin A.L.³

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²) Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel

³) University of Aveiro, Aveiro, Portugal

*E-mail: bddah@ya.ru

Off-center shift of the Ce⁴⁺ ions in the cubic oxygen environment away from oxygen vacancies under the action of the external electric field in Ce_{0.9}Gd_{0.1}O_{2-x} (CGO) results in appearance of the “giant” electromechanical strain [1]. This strain looked pretty attractive for the application and initially was attributed to the electrostriction phenomena [1]. However up to date the phenomena has been studied only by bulk technique based on the cantilever resonator approach [2]. On contrary microscopical studies in CGO (the most part which was realized on 1st harmonic) attributed induced strain to the Vegard expansion due to electrodiffusion of the oxygen vacancies or polarons [3,4].

Here we performed comprehensive analysis both by multi-harmonic close-to-resonance strain based scanning probe microscopy and laser interferometry to probe electrostriction in the CGO thin films and bulk ceramics.

Interferometric measurements have been realized in a special manner allowing to avoid the effect of the sample bending that could lead to the overestimation of the piezoelectric and electrostriction coefficients. The resulting electrostriction coefficient was about $10^{-19} \text{ m}^2 \cdot \text{V}^{-2}$ at 13 kHz.

Strain based scanning probe microscopy (S-SPM) was realized both at the first and at the second harmonic. Though resulted S-SPM images are correlated with topography the value of registered electrostriction: $6.7 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2 \cdot \text{V}^{-2}$ is quite close to those measured by interferometry technique. Voltage and time spectroscopy were performed to clarify the nature of the registered signal. Additional modelling in COMSOL Multiphysics was performed to feed a parallel between bulk and local measurements.

The equipment of the Ural Center for Shared Use “Modern nanotechnology” UrFU was used. The research was made possible with the financial support of Russian Foundation for Basic Research grant (15-52-06006-MNTI_a).

1. Korobko R. et al., Advanced Materials, Vol. 24, 5857 (2012).
2. Korobko R. et al., Sensors and Actuators A: Physical, Vol. 201, 73 (2013)