

1. Lassagne B., Garcia-Sanchez D., Aguasca A., Bachtold A., Nano Lett., 8, 3735 (2008).
2. Chiu H.-Y., Hung P., Postma H.W.Ch., Bockrath M., Nano Lett., 8, 4342 (2008).
3. Jensen K., Kim K., Zettl A., Nature Nanotechnology, 3, 533 (2008).
4. Chaste J., Eichler A., Moser J., Ceballos G. et al., Nature Nanotechnology, 7, 301 (2012).

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ РЕШЕТКИ КРИСТАЛЛА TiPO_4

Праведников А.В.^{*}, Прищенко Д.А., Мазуренко В.Г.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России

Б.Н.Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: Exigo3756@yandex.ru

MODELING THE DYNAMICS OF THE CRYSTAL LATTICE TiPO_4

Pravednicov A.V.^{*}, Prishchenko D.A., Mazurenko V.G.

Ural Federal University named after the first Russian President Boris Yeltsin,

Yekaterinburg, Russia

In this work we performed analysis of the lattice dynamics of TiPO_4 . Electronic ground state and interatomic forces was calculated using VASP package. As a first step, we calculated electronic density of states, which showed that this material is a semiconductor. To check for the structure stability and to obtain phonon spectrum we used frozen phonon method.

Соединение TiPO_4 представляет интерес с точки зрения магнитной структуры (неколлинеарное основное состояние) и фазового структурного перехода (димеризация цепочек атомов титана). В данной работе было проведено моделирование динамики решетки кристалла TiPO_4 методом замороженных фононов. Расчет основного электронного состояния и межатомных сил производили при помощи программного пакета VASP в соответствии с теорией функционала электронной плотности в рамках обобщенного градиентного приближения с использованием псевдопотенциалов. Фононные спектры рассчитывали с использованием программного пакета Phonopy. Для правильного описания низкочастотной области спектра смещения атомов произведены для $2 \times 2 \times 2$ суперячейки.

На первом этапе работы была рассчитана плотность электронных состояний (рис.1), из анализа которой видно, что материал обладает полупроводниковым характером проводимости с шириной запрещенной зоны равной 2.38 эВ.

Методом замороженных фононов проверили стабильность соединения. Получили фононный спектр без мягких мод и частичное совпадение частот, в пределах погрешности измерений и погрешности численного расчета, с экспериментом. Из этого можно сделать вывод, что природа структурного перехода не

связана с появлением нестабильности из-за размягчения фононных мод. В будущем будут рассчитаны свойства низкотемпературной фазы, структура которого известна из эксперимента.

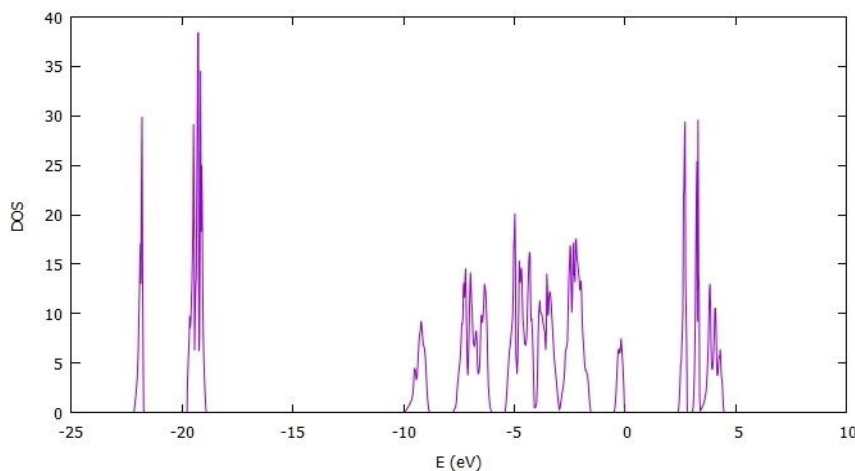


Рис. 1. Плотность электронных состояний TiPO_4

1. A. Leclaire, A. Benmoussa, M.M. Borel, A. Grandin, B. Raveau, Eur. J. Solid State Inorg. Chem., t.28, p. 1323-1333(1991)
2. D. Wulferding, A. Möller, Kwang-Yong Choi, Yu. G. Pashkevich, R. Yu. Babkin, K. V. Lamonova, P. Lemmens, J. M. Law, R. K. Kremer, R. Glaum, Phys. Rev. B, 88, 205136 (2013)

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ФОТОСТИМУЛЯЦИИ ПРИ РЕГИСТРАЦИИ ФТТЛ ДЕТЕКТОРОВ ТЛД-500К ПОСЛЕ ВЫСОКОДОЗНОГО ОБЛУЧЕНИЯ

Казанцева М.Г.*, Кортков В.С.

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

*E-mail: masanya_91@mail.ru

DEFINITION OF PHOTOSTIMULATION PARAMETERS FOR REGISTRATION OF PHOTOTRANSFERRED LUMINESCENCE OF TLD-500K DETECTORS AFTER HIGH-DOSE IRRADIATION

Kazantseva M.G.*, Kortov V.S.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Annotation. TLD-500K standard detectors sample were studied. The goal of this work is to evaluate the possibility of usage of phototransferred thermoluminescence of TLD-500K detectors for high-dose measurements. This work resulted in finding of the optimal conditions of photostimulation for irradiated TLD-500K detectors.