

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U001948

Державний реєстраційний номер: 0117U002132

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-02-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Електронна структура та магнітні властивості складних оксидів перехідних металів та гетероструктур

Початок етапу: 01.2017

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417331

Місцезнаходження: бульвар Академіка Вернадського, буд. 36, м. Київ, 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444243110, 380444241005

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, 01061, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 2867.432

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Електронна структура та магнітні властивості складних оксидів перехідних металів та гетероструктур

Назва роботи англійською:

Electronic structure and magnetic properties of complex transition metal oxides and heterostructures

Реферат українською:

На основі розрахунків в рамках теорії функціонала густини (DFT) повністю релятивістським лінійним зонним методом MT-орбіталей з використанням наближення локальної спінової густини (LSDA), узагальненого градієнтного наближення (GGA) і підходу LSDA/GGA+U, який враховує кулонівські електрон-електронні кореляції, одержані фундаментальні уявлення про електронну структуру, магнітні та інші фізичні властивості складних оксидів перехідних металів та гетероструктур, таких як BaFeO_{3-d} ($0 \leq d \leq 0.5$), Sr_2FeMO_6 , A_2FeReO_6 ($A = \text{Ba, Sr, Ca}$), $\text{A}_2\text{CrB}'\text{O}_6$ ($A = \text{Ca, Sr}$; $B' = \text{W, Re, Os}$), $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6/\text{BaTiO}_3$, 4f сполук SmRh_2Si_2 та YbNiSn , іридатів $b\text{-Li}_2\text{IrO}_3$ та $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$. Теоретично одержані, проаналізовані та пояснені їхні рентгенівські спектри поглинання, спектри рентгенівського магнітного циркулярного дихроїзму та резонансного непружного рентгенівського розсіювання. Виявлено, що вакансії кисню в BaFeO_3 можуть істотно знижувати його температуру Кюрі або навіть змінювати феромагнітне впорядкування на антиферомагнітне чи неколінеарне. Передбачення теорії щодо Sr_2FeMO_6 узгоджуються з експериментальними даними лише при врахуванні кореляційних ефектів та наявності кисневих вакансій. Кореляційні ефекти на Fe в A_2FeReO_6 ($A = \text{Ba, Sr, Ca}$) збільшуються зі зміною $\text{Ba} > \text{Sr} > \text{Ca}$. Кореляції на Re є невеликими в сполуках на основі Ba і Sr, але значними в $\text{Ca}_2\text{FeReO}_6$. Змішана валентність як поверхневих, так і об'ємних атомів Sm в сполуці SmRh_2Si_2 , яка є абсолютно нетиповою для більшості інших матеріалів на основі Sm, пояснюється наявністю сильної 4f гібридизації. Формування когерентного стану при 10 K, яке виявляється в експериментах з транспортних властивостей сполуки YbNiSn , має бути відмежоване від утворення ренормалізованих зон і початку формування ґратки Кондо, яке відбувається при набагато більшій температурі. Через тонку взаємодію спин-орбітальної взаємодії, інтерметалічного зв'язку та магнетизму в $b\text{-Li}_2\text{IrO}_3$ при структурному переході, що відбувається при підвищенні тиску, можуть утворюватись Ir-Ir димери.

Реферат англійською:

On the basis of density functional theory (DFT) calculations by the fully relativistic linear MT orbital band method using the local spin density approximation (LSDA), generalized gradient approximation (GGA) and LSDA/GGA+U approach, which takes into account Coulomb electron correlations, fundamental knowledge about the electronic structure, magnetic and other physical properties of complex transition metals oxides and heterostructures, such as BaFeO_{3-d} ($0 \leq d \leq 0.5$), Sr_2FeMO_6 , A_2FeReO_6 ($A = \text{Ba, Sr, Ca}$), $\text{A}_2\text{CrB}'\text{O}_6$ ($A = \text{Ca, Sr}$; $B' = \text{W, Re, Os}$), $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6/\text{BaTiO}_3$, the 4f compounds SmRh_2Si_2 and YbNiSn , the iridates $b\text{-Li}_2\text{IrO}_3$ and $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$, has been gained. Their X-ray absorption, X-ray magnetic circular dichroism and resonant inelastic X-ray scattering spectra have been theoretically obtained, analyzed and explained. It has been found that O vacancies in BaFeO_3 can significantly reduce its Curie temperature or even change the ferromagnetic ordering to the antiferromagnetic or non-collinear one. The theoretical predictions about Sr_2FeMO_6 are consistent with experimental data only if correlation effects and the presence of oxygen vacancies are taken into account. Correlation effects on Fe in A_2FeReO_6 ($A = \text{Ba, Sr, Ca}$) increase with the $\text{Ba} > \text{Sr} > \text{Ca}$ change. Correlations on Re are small in compounds based on Ba and Sr, but significant in $\text{Ca}_2\text{FeReO}_6$. The mixed valence of both surface and bulk Sm atoms in SmRh_2Si_2 , which is quite unusual for most Sm-based materials, is due to strong 4f hybridization. The formation of a coherent state at 10 K, which is found in experiments on the transport properties of YbNiSn , should be separated from the formation of renormalized zones and the beginning of the Kondo lattice formation, which occurs at much higher

temperatures. In b-Li₂IrO₃ due to the subtle interplay between the spin-orbit coupling, intermetallic bonding and magnetism the structural transition that occurs with increasing pressure can lead to the formation of Ir-Ir dimers.

Індекс УДК: 517.958:530.145, 538.915; 538.955; 537.632; 537.9; 004.942

Коди тематичних рубрик: 27.35.57

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Антонов Віктор Миколайович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: член-кор.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Квантова теорія електронних, магнітних та спектроскопічних властивостей складних перовскітних оксидів $A_2\text{FeReO}_6$ ($A = \text{Ca, Sr, Ba}$) і $A_2\text{CrB}'\text{O}_6$ ($A = \text{Ca, Sr; B}' = \text{W, Re, Os}$), які є кандидатами до матеріалів з колосальним магнетоопором

Назва НТП англійською: The quantum theory of the electronic, magnetic and spectroscopic properties of the complex perovskite oxides $A_2\text{FeReO}_6$ ($A = \text{Ca, Sr, Ba}$) and $A_2\text{CrB}'\text{O}_6$ ($A = \text{Ca, Sr; B}' = \text{W, Re, Os}$), which are candidates for colossal magnetoresistance materials

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Дослідження й експериментальні розробки у сфері природничих і технічних наук (72.1)

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Фізичні основи електронних, магнітних та спектроскопічних властивостей складних перовскітних оксидів $A_2\text{FeReO}_6$ ($A = \text{Ca, Sr, Ba}$) і $A_2\text{CrB}'\text{O}_6$ ($A = \text{Ca, Sr; B}' = \text{W, Re, Os}$)

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Науково-дослідні установи та центри, R&D підрозділи комерційних компаній, освітні заклади

Перспективні ринки: Ринки України та світу

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи: Спільні права на НТП

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): 0

Додаткова інформація: -

Назва НТП українською: Квантова теорія змішаної валентності поверхневих і об'ємних атомів Sm в антиферомагнітній 4f сполуці SmRh_2Si_2

Назва НТП англійською: The quantum theory of the mixed valence of surface and bulk Sm atoms in the antiferromagnetic 4f compound SmRh_2Si_2

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Дослідження й експериментальні розробки у сфері природничих і технічних наук (72.1)

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Фізичні основи змішаної валентності поверхневих і об'ємних атомів Sm в антиферромагнітній 4f сполуці SmRh₂Si₂

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Науково-дослідні установи та центри, R&D підрозділи комерційних компаній, освітні заклади

Перспективні ринки: Ринки України та світу

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: Квантова теорія фотоемісійних властивостей сполуки з важкими ферміонами YbNiSn

Назва НТП англійською: The quantum theory of the photoemission properties of the heavy fermion compound YbNiSn

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Дослідження й експериментальні розробки у сфері природничих і технічних наук (72.1)

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Фізичні основи фотоємисійних властивостей сполуки з важкими ферміонами YbNiSn

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Науково-дослідні установи та центри, R&D підрозділи комерційних компаній, освітні заклади

Перспективні ринки: Ринки України та світу

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: Квантова теорія електронних і магнітних властивостей оксиду з гіперстільниковою ґраткою b-Li₂IrO₃, що є кандидатом до матеріалів з властивостями квантової спінової рідини, під тиском

Назва НТП англійською: The quantum theory of the electronic and magnetic properties of the hyperhoneycomb oxide b-Li₂IrO₃, which is a candidate for quantum spin liquid materials, under pressure

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Дослідження й експериментальні розробки у сфері природничих і технічних наук (72.1)

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Фізичні основи електронних і магнітних властивостей оксиду з гіперстільниковою ґраткою b-Li₂IrO₃

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Науково-дослідні установи та центри, R&D підрозділи комерційних компаній, освітні заклади

Перспективні ринки: Ринки України та світу

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: Квантова теорія електронних, магнітних та спектроскопічних властивостей оксиду $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ зі структурою пірохлору

Назва НТП англійською: The quantum theory of the electronic, magnetic and spectroscopic properties of the pyrochlor oxide $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Дослідження й експериментальні розробки у сфері природничих і технічних наук (72.1)

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Фізичні основи електронних, магнітних та спектроскопічних властивостей оксиду $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ зі структурою пірохлору

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Науково-дослідні установи та центри, R&D підрозділи комерційних компаній, освітні заклади

Перспективні ринки: Ринки України та світу

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: Квантова теорія електронних і магнітних властивостей оксиду BaFeO₃, який є кандидатом для застосування в магнітних тунельних контактах

Назва НТП англійською: The quantum theory of the electronic and magnetic properties of the BaFeO₃ oxide, which is a candidate for using in magnetic tunnel contacts

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Дослідження й експериментальні розробки у сфері природничих і технічних наук (72.1)

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Фізичні основи електронних і магнітних властивостей оксиду BaFeO₃

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Науково-дослідні установи та центри, R&D підрозділи комерційних компаній, освітні заклади

Перспективні ринки: Ринки України та світу

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: Квантова теорія електронних, магнітних та спектроскопічних властивостей подвійного перовскітного оксиду $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$, який є кандидатом на застосування в спінтроніці

Назва НТП англійською: The quantum theory of the electronic, magnetic and spectroscopic properties of the double perovskite oxide $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$, which is a candidate for using in spintronics

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Дослідження й експериментальні розробки у сфері природничих і технічних наук (72.1)

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Фізичні основи електронних, магнітних та спектроскопічних властивостей подвійного перовскіту $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Науково-дослідні установи та центри, R&D підрозділи комерційних компаній, освітні заклади

Перспективні ринки: Ринки України та світу

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: Квантова теорія спектроскопічних властивостей гетероструктури $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6/\text{BaTiO}_3$

Назва НТП англійською: The quantum theory of the spectroscopic properties of the heterostructure $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6/\text{BaTiO}_3$

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Дослідження й експериментальні розробки у сфері природничих і технічних наук (72.1)

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Фізичні основи сектроскопічних властивостей гетероструктури $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6/\text{BaTiO}_3$

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Науково-дослідні установи та центри, R&D підрозділи комерційних компаній, освітні заклади

Перспективні ринки: Ринки України та світу

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Chikina A., Generalov A., Kummer K., Güttler M., Antonov V.N., Kucherenko Yu., Kliemt K., Krellner C., Danzenbächer S., Kim T., Dudin P., Geibel C., Laubschat C., Vyalikh D.V. Phys. Rev. B. 2017. Vol. 95. 155127. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.155127>

Antonov V.N., Bekenov L.V. Low Temp. Phys. 2017. Vol. 43. No. 5. PP. 578–589. doi: <https://doi.org/10.1063/1.4985207>

Generalov A., Sokolov D.A., Chikina A., Kucherenko Yu., Antonov V.N., Bekenov L.V., Patil S., Huxley A.D., Allen J.W., Matho K., Kummer K., Vyalikh D.V., Laubschat C. Phys. Rev. B. 2017. Vol. 95. 184433. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.184433>

Antonov V.N., Bekenov L.V., Uba S., Bonda A., Uba L. Acta Physica Polonica A. 2018. Vol. 133. No. 3. PP. 456–458. doi: <https://doi.org/10.12693/APhysPolA.133.456>

Hoffmann M., Antonov V.N., Bekenov L.V., Kokko K., Hergert W., Ernst A. J. Physics: Condens. Matter. 2018. Vol. 30. 305801. doi: <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aacb8d>

Antonov V.N., Uba S., Uba L. Phys. Rev. B. 2018. Vol. 98. 245113. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.245113>

Suzuki H., Gretarsson H., Ishikawa H., Ueda K., Yang Z., Liu H., Kim H., Kukusta D., Yaresko A., Minola M., Sears J.A., Francoual S., Wille H.-C., Nuss J., Takagi H., Kim B.J., Khaliullin G., Yavaş H., Keimer B. Nature materials. 2019. Vol. 18. PP. 563-567. doi: <https://doi.org/10.1038/s41563-019-0327-2>

Hoffmann M., Ernst A., Hergert W., Antonov V.N., Adeagbo W.A., Geilhufe R.M., Ben Hamed H. Phys. Status Solidi B. 2020. Vol. 257. Iss. 7. PP. 1-24. doi: <https://doi.org/10.1002/pssb.201900671>

Takayama T., Yaresko A.N., Gibbs A.S., Ishii K., Kukusta D., Takagi H. Phys. Rev. Materials. 2020. Vol. 4. 075002. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.4.075002>

Antonov V.N., Bekenov L.V., Kukusta D.A. Phys. Rev. B. 2020. Vol. 102. 195134. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.195134>

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Татаренко Валентин Андрійович
д. ф.-м. н.

Перелік осіб-виконавців

Бекєньов Лев Валерійович
(к.ф.-м.н., 01.04.07)

Журавльов Борис Хомич
(к. ф.-м. н.)

Зєніна Ірина Борисівна

Ковальчук Галина Іванівна

Кукуста Дєнис Олександрович
(к.ф.-м.н., 01.04.07)

Кучєренко Юрій Миколайович
(д.ф.-м.н., 01.04.07)

Мазур Дмитро Вікторович

Мокляк Сергій Вадимович

Сутьєженко Валерій Костянтинович
(к. ф.-м. н.)

Сіренко Василь Тихонович

Січкає Сергій Михайлович
(к.ф.-м.н., 01.04.07)

Уваров Микола Вікторович
(к.ф.-м.н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Бекєньов Л.В.

Телефон

+38 (044) 424-11-21

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**

