

На правах рукописи

МОЦЕЙКО Алексей Витальевич

**АТОМНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ, МАГНИТНЫЕ И
МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
ОКСИДОВ И СУЛЬФИДОВ СО СТРУКТУРАМИ
ПЕРОВСКИТА И ШПИНЕЛИ**

1.3.8. Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени

кандидата физико-математических наук

Ростов-на-Дону — 2025

Работа выполнена в отделе кристаллофизики
Научно-исследовательского института физики Южного федерального
университета.

Научный доктор физико-математических наук
руководитель: **Тер-Оганесян** Никита Валерьевич
(*Южный федеральный университет,
Научно-исследовательский институт физики, главный
научный сотрудник*)

Официальные доктор физико-математических наук, профессор РАН
оппоненты: **Пятаков** Александр Павлович
(*Московский государственный университет имени
М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра
физики колебаний, профессор*)

доктор физико-математических наук
Метлов Константин Леонидович
(*Донецкий физико-технический институт имени
А. А. Галкина, отдел теории электронных и
кинетических свойств нелинейных систем, ведущий
научный сотрудник*)

Защита диссертации состоится **30 сентября 2025 года** в **15.00** часов
на заседании диссертационного совета **ЮФУ801.01.06** по
физико-математическим наукам (специальности 1.3.8. Физика
конденсированного состояния и 1.3.20. Кристаллография, физика
кристаллов) при НИИ физики ЮФУ по адресу: г. Ростов-на-Дону,
пр-т. Стачки, 194, НИИ физики ЮФУ, ауд. 411.

С диссертацией можно ознакомиться в Зональной научной библиотеке имени
Ю. А. Жданова Южного федерального университета по адресу: г. Ростов-на-Дону,
ул. Р. Зорге, 21Ж, и на официальном сайте <https://hub.sfedu.ru/diss/show/1345614/>.

Автореферат разослан _____ июля 2025 года.

Отзывы на автореферат (в нём укажите дату, полностью свои фамилию, имя,
отчество, учёную степень со специальностью, звание, организацию, подразделение,
должность, адрес, телефон, e-mail, своё согласие на обработку персональных данных)
с нумерацией страниц, с заверенной подписью рецензента и печатью организации,
следует направлять Гегузиной Г. А., учёному секретарю диссертационного совета
ЮФУ801.01.06 обязательно в формате .pdf на e-mail geguzina@sfedu.ru, а затем в
бумажном виде в 2 экз. по адресу: 344090, г. Ростов-на-Дону, пр. Стачки, 194, НИИ
физики ЮФУ.

Учёный секретарь диссертационного совета
ЮФУ801.01.06 при НИИ физики ЮФУ

Гегузина Галина Александровна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Одной из задач физики конденсированного состояния является исследование свойств функциональных материалов, перспективных для практических приложений. Особое значение имеют сегнетоэлектрики, ферромагнетики и сегнетоэластики, которые нетривиально взаимодействуют с соответствующими полями — электрическим, магнитным и полем деформаций. Эти классы дополняются материалами с более сложными типами упорядочения, например, антисегнетоэлектриками, антиферромагнетиками, ферримагнетиками и другими. В последние 25 лет активно исследуются мультиферроики — материалы, сочетающие по крайней мере два из трёх типов упорядочения: сегнетоэлектрического, магнитного и сегнетоэластического. Сосуществование сегнетоэлектрического и магнитного упорядочений открывает новые перспективы управления электрической и магнитной подсистемой соответственно магнитным и электрическим полями за счёт магнитоэлектрического эффекта, что перспективно для разработки новых устройств спинтроники, элементов памяти и сенсорных технологий.

Наиболее практически важные сегнетоэлектрики относятся к классу перовскита, к которому относится и мультиферроик феррит висмута BiFeO_3 , сочетающий высокотемпературные сегнетоэлектрические и антиферромагнитные свойства. Однако его практическое применение ограничивают высокая проводимость, наличие антиферромагнитной (АФМ), а не ферромагнитной структуры и её пространственная модуляция [1]. Наиболее известные диэлектрические магнетики принадлежат кристаллическому классу шпинели. Хотя шпинели демонстрируют разнообразные магнитные свойства, лишь немногие из них проявляют магнитоэлектрический эффект, что делает актуальным поиск новых магнитоэлектрических шпинелей и исследование уже известных [2; 3].

Кристаллы типа перовскита часто демонстрируют спонтанную электрическую поляризацию за счёт сегнетоактивных катионов, а магнитный порядок требует наличия переходных элементов в структуре. Перспективным подходом к созданию мультиферроиков является разработка перовскитных твёрдых растворов с магнитными катионами,

в частности систем на основе BiFeO_3 , таких как $\text{BiFeO}_3\text{-PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ и $\text{BiFeO}_3\text{-PbFe}_{1/2}\text{Sb}_{1/2}\text{O}_3$. Это позволяет сблизить температуры сегнетоэлектрического и магнитного фазовых переходов, уменьшить проводимость и подавить пространственную модуляцию магнитной структуры [4]. Особый интерес представляет $\text{PbFe}_{1/2}\text{Sb}_{1/2}\text{O}_3$, который при синтезе в условиях высокого давления является упорядоченным в B -подрешётке. Степень упорядочения Fe/Sb можно варьировать условиями синтеза либо постсинтезной обработкой [5]. Поэтому и в твёрдых растворах $\text{BiFeO}_3\text{-PbFe}_{1/2}\text{Sb}_{1/2}\text{O}_3$ возможно возникновение катионного упорядочения, степень которого может влиять на сегнетоэлектрические и магнитные свойства.

Последние 10 лет активно исследуются так называемые высокоэнтропийные перовскиты с большим числом катионов в одной подрешётке: пять или более, взятых в примерно эквимольном соотношении. Такие соединения обладают высокой конфигурационной энтропией, характеризующей степень «беспорядка» при размещении различных катионов по эквивалентным узлам кристаллической решётки, и часто демонстрируют примечательные функциональные свойства [6; 7]. При размещении атомов двух и более сортов по эквивалентным узлам решётки возникает возможность их упорядочения, что может значительно влиять на свойства подобных кристаллов. Такие явления широко исследованы в двойных перовскитах типа $\text{PbSc}_{1/2}\text{Ta}_{1/2}\text{O}_3$ [5; 8; 9]. В случае высокоэнтропийных перовскитов проблема атомного упорядочения приобретает новую актуальность, требуя изучения возможности и условий возникновения различных типов атомного порядка и их влияния на функциональные свойства. Это определяет важность и научную значимость диссертации, посвящённой исследованию атомного упорядочения, магнитных и магнитоэлектрических свойств перовскитных оксидов и шпинельных сульфидов.

Объекты исследований:

- средне- и высокоэнтропийные соединения $A(B_1, B_2, \dots, B_n)\text{O}_3$ со структурой типа перовскита;
- твёрдые растворы систем $(1 - x)\text{BiFeO}_3 - xA\text{Fe}_{1/2}M_{1/2}\text{O}_3$ ($A = \text{Pb}, \text{Ba}, \text{Ca}$ или Sr ; $M = \text{Nb}$ или Sb) со структурой типа перовскита;
- сульфид MnCr_2S_4 со структурой типа шпинели.

Цель работы. Установить особенности возникновения атомного упорядочения в высокоэнтропийных перовскитах с общей химической формулой $A(B_1, B_2, \dots, B_n)O_3$, влияние степени атомного упорядочения на магнитные свойства твёрдых растворов систем $(1 - x)BiFeO_3 - xAFe_{1/2}M_{1/2}O_3$ ($A = Pb, Ba, Ca$ или Sr ; $M = Nb$ или Sb), а также особенности возникновения магнитных и магнитоэлектрических свойств $MnCr_2S_4$.

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие **задачи:**

1. Разработка модели для численного моделирования процессов атомного упорядочения в перовскитах ABO_3 с произвольным заполнением B -подрешётки и при произвольном давлении.

2. Расчёт температур фазовых переходов атомного упорядочения, определение типов возникающего атомного порядка и выявление общих закономерностей для перспективных высокоэнтропийных оксидов семейства перовскита.

3. Разработка программы для численного моделирования магнитных фазовых переходов при помощи метода Монте-Карло, которая учитывает одноионную анизотропию и произвольное заполнение подрешёток немагнитными атомами.

4. Выявление концентрационной эволюции магнитных свойств в твёрдых растворах систем $(1 - x)BiFeO_3 - xAFe_{1/2}M_{1/2}O_3$ ($A = Pb, Ba, Sr$ или Ca ; $M = Nb$ или Sb) и влияния на них локального и дальнего атомного упорядочения в B -подрешётке структуры перовскита.

5. Расчёт магнитной фазовой диаграммы $MnCr_2S_4$ в координатах магнитное поле-температура и определение механизма возникновения магнитоэлектрических свойств.

Научная новизна полученных результатов заключается в том, что впервые:

– на основе модели ненапряжённых катион-анионных связей разработана программа для моделирования при помощи метода Монте-Карло атомного упорядочения в оксидах типа перовскита с произвольным заполнением B -подрешётки с учётом внешнего давления;

– расчёты температур фазовых переходов атомного упорядочения (T_{od}) для ряда высокоэнтропийных перовскитов выявили количественную

зависимость $T_{\text{од}}$ от нормированного среднеквадратичного отклонения длин катион-анионных связей атомов в B -подрешётке;

– определена эволюция с концентрацией x температуры магнитных фазовых переходов, магнитных свойств и типов возникающего магнитного порядка в твёрдых растворах систем $(1-x)\text{BiFeO}_3-x\text{AFe}_{1/2}\text{M}_{1/2}\text{O}_3$ ($A = \text{Pb}$, Ba , Ca или Sr ; $M = \text{Nb}$ или Sb) с учётом возможности кластеризации атомов, а также локального или дальнего атомного упорядочения в B -подрешётке структуры перовскита;

– на примере соединения MnCr_2S_4 показано, что треугольное упорядочение типа Яфета–Киттеля с неколлинеарным упорядочением спинов в A -подрешётке шпинелей приводит к возникновению электрической поляризации;

– показано, что сложная фазовая диаграмма MnCr_2S_4 в координатах «магнитное поле – температура» объясняется учётом одноионной магнитной анизотропии.

Теоретическая и практическая значимость полученных результатов заключается в том, что

1. Получено простое соотношение для оценки температуры атомного упорядочения в высокоэнтропийных оксидах типа перовскита с произвольным заполнением B -подрешётки, которое может быть использовано в экспериментальных исследованиях для быстрого определения возможности атомного упорядочения в конкретных высокоэнтропийных перовскитах.

2. Разработанная модель расчёта процессов атомного упорядочения в высокоэнтропийных перовскитах позволяет оценивать распределение катионов по упорядочивающимся подрешёткам, что важно для правильной интерпретации экспериментальных рентгendifракционных данных.

3. Рассчитанные зависимости температур магнитного упорядочения от концентрации в твёрдых растворах систем $(1-x)\text{BiFeO}_3-x\text{AFe}_{1/2}\text{M}_{1/2}\text{O}_3$ ($A = \text{Pb}$, Ba , Ca или Sr ; $M = \text{Nb}$ или Sb) с учётом различных вариантов распределения атомов по B -подрешётке важны для поиска новых мультиферроиков с близкими температурами сегнетоэлектрического и магнитного фазовых переходов.

4. Обнаруженное индуцирование электрической поляризации треугольным упорядочением типа Яфета–Киттеля в шпинелях с

неколлинеарными спинами в A -подрешётке может быть использовано для поиска новых мультиферроиков в этом кристаллическом классе.

Научные положения, выносимые на защиту:

1. Температура фазового перехода «порядок-беспорядок» в B -подрешётке высокоэнтропийных оксидов со структурой перовскита в модели ненапряжённых катион-анионных связей пропорциональна квадрату нормированного среднеквадратичного отклонения длин катион-анионных связей атомов в B -подрешётке.

2. При атомном упорядочении в B -подрешётке исследованных высокоэнтропийных оксидов со структурой перовскита формируется 1:1 порядок типа каменной соли, при котором каждая из образующихся подрешёток остаётся разупорядоченной, что приводит к появлению «упорядоченных разупорядоченных» структур с отличной от нуля конфигурационной энтропией.

3. В упорядоченных твёрдых растворах $(1 - x)\text{BiFeO}_3 - x\text{PbFe}_{1/2}\text{Sb}_{1/2}\text{O}_3$ при $x < 0.7$ основным магнитным состоянием является магнитная структура G -типа, а при $x > 0.7$ магнитный порядок, наблюдаемый в упорядоченном $\text{PbFe}_{1/2}\text{Sb}_{1/2}\text{O}_3$.

4. Магнитное упорядочение типа Яфета–Киттеля с неколлинеарными спинами в подрешётке Mn шпинели MnCr_2S_4 приводит к возникновению электрической поляризации, а сложная фазовая диаграмма этого соединения в координатах «магнитное поле – температура» объясняется учётом одноионной магнитной анизотропии.

Достоверность и обоснованность полученных научных результатов и выводов обеспечены тем, что они базируются на современных теоретических подходах физики конденсированного состояния и не противоречат опубликованным современным экспериментальным данным исследований. Их достоверность обеспечивается корректным применением актуальных теоретических и вычислительных методов анализа фазовых переходов в кристаллах, а также использованием современных подходов к обработке данных. Результаты работы опубликованы в высокорейтинговых рецензируемых международных научных изданиях и апробированы на представительных международных и всероссийских тематических конференциях и симпозиумах.

Апробация основных результатов диссертации происходила на следующих научных конференциях и семинарах: II международная конференция Materials Science

and Nanotechnology (Екатеринбург, Россия, 2024), XXIII Всероссийская конференция по физике сегнетоэлектриков (Тверь, Россия, 2023), 10(15) Международный семинар по физике сегнетоэластиков (Воронеж, Россия, 2022), XVIII Ежегодная молодёжная научная конференция «Наука и технологии Юга России» (Ростов-на-Дону, Россия, 2022).

Публикации автора. По теме диссертации автором опубликовано 9 работ, из которых 4 статьи в рецензируемых зарубежных и российских научных журналах, индексируемых в международных базах данных Scopus, Web of Science и РИНЦ, и 5 тезисов докладов в сборниках трудов международных и всероссийских конференций.

Личный вклад автора. Автором лично выполнен анализ научной литературы по тематике диссертации, выбраны теоретические методы и проведены соответствующие исследования, разработаны необходимые компьютерные программы и проведены расчёты. Совместно с научным руководителем автором определены цель и задачи исследования, проведена интерпретация полученных результатов, сформулированы научные положения, выносимые на защиту, основные результаты и выводы. Кроме того, в сотрудничестве с руководителем и соавторами были подготовлены научные публикации.

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, 5 разделов, заключения, списка цитируемой литературы из 292 наименований и 2 приложений, изложенных на 132 страницах, включая 20 рисунков и 7 таблиц. В конце диссертации приведён список публикаций автора, отмеченных литерой «А».

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цель, задачи и объекты исследования. Аргументирована научная новизна исследований и практическая значимость результатов. Представлены научные положения, выносимые на защиту. Также отражены апробация результатов, краткая информация о публикациях автора и его личный вклад.

Первый раздел посвящён литературному обзору исследований мультиферроиков со структурой перовскита и шпинели, а также высокоэнтропийных сложных оксидов со структурой перовскита. Особый акцент сделан на материалах с перовскитной структурой (BiFeO_3 , $\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ и их модификации — легирование, твёрдые

растворы), где сочетание стереохимически активных катионов (Bi^{3+} , Pb^{2+}) и магнитных ионов (Fe^{3+}) обеспечивает высокотемпературные сегнетоэлектрические и антиферромагнитные (АФМ) свойства. В подразделе об однофазных мультиферроиках со структурой шпинели проанализированы магнитоэлектрические эффекты, возникающие при неколлинеарном магнитном упорядочении, а также роль структурных переходов в индуцировании поляризации. Отдельно обсуждаются высокоэнтропийные оксиды, стабилизированные конфигурационной энтропией, которые демонстрируют улучшенные функциональные характеристики (например, высокую каталитическую активность, значительный электрокалорический эффект) за счёт катионного беспорядка. Этот раздел диссертации подчёркивает значимость этих материалов для современных исследований и будущих технологий.

Во **втором** разделе подробно описаны методы исследования атомного и магнитного упорядочения, применённые в диссертации. Представлены алгоритмы оригинальных программных кодов для моделирования процессов атомного и магнитного упорядочения методом Монте-Карло (МС), позволяющие оценивать температуры фазовых переходов (ФП) и предполагать характер упорядочения. Для расчёта обменных констант, необходимых при МС-моделировании магнитных свойств, использована теория функционала плотности (DFT) с поправкой Хаббарда GGA+U, основные положения которой кратко изложены в этом разделе. Эти подходы обеспечивают комплексный анализ свойств функциональных материалов, позволяя раскрыть влияние катионного упорядочения на их магнитные свойства.

В **третьем** разделе представлены результаты численного моделирования атомного упорядочения в B -подрешётке низко-, средне- и высокоэнтропийных соединений со структурой перовскита (ВЭП), выполненного с использованием МС-метода [A1; A5]. Разработанный подход позволяет анализировать ФП «порядок–беспорядок» в структуре перовскита при произвольном давлении, выявлять температурное поведение параметра порядка дальнего атомного упорядочения $s(B)$ и распределение катионов по упорядоченным подрешёткам B' и B'' , формирующимся при упорядочении типа «каменная соль», определять температуры катионного упорядочения T_{od} и оценивать

изменения параметров приведённой ячейки перовскита. Степень атомного упорядочения $s(B)$ для химического элемента B определяется как:

$$s(B) = \frac{N_{B'}(B) - N_{B''}(B)}{N_{B'}(B) + N_{B''}(B)}, \quad (1)$$

где $N_{B'}(B)$ и $N_{B''}(B)$ — количество атомов B во взаимопроникающих подрешётках B' и B'' соответственно. Величина $s(B)$ варьируется от -1 до 1 , отражая степень предпочтения катионом B конкретной подрешётки: нулевое значение соответствует случайному распределению, а ± 1 — полному упорядочению. Расчёты $T_{\text{од}}$ не учитывали структурные ФП, поскольку катионное упорядочение происходит при более высоких температурах при достаточной диффузии ионов, а многокомпонентный состав обычно расширяет область стабильности кубической фазы.

Моделирование охватило уже синтезированные и гипотетические соединения, включая свинецсодержащие системы типа $\text{Pb}B'_{1/2}B''_{1/2}\text{O}_3$ ($B' = \text{Sc}, \text{In}$; $B'' = \text{Nb}, \text{Ta}$) и их многокомпонентные и Ва-содержащие аналоги; отдельно изучены Ва-содержащие ВЭП, ранее синтезированные в литературе. Адекватность разработанной модели оценена на двойных перовскитах: результаты согласуются с более ранними аналитическими оценками в рамках приближения Брэгга–Уильямса [8] с поправкой на его среднеполевую природу — для PST, PSN, PIT, PIN расчётные $T_{\text{од}}$ составили 610, 860, 1410, 1650 К, соответственно (рисунок 1). Разница между теоретическими и экспериментальными значениями параметров решётки δa не превышает 0.5 %.

Моделирование многокатионных систем (PSINTT, PSINTZ и других) выявило формирование упорядочения по типу «каменной соли» с $T_{\text{од}}$, близкой к диапазону температур PST, PSN, PIT и PIN, что, предположительно, позволяет управлять катионным порядком посредством термической обработки в этих соединениях. Для таких многокомпонентных составов в упорядоченном состоянии характерна высокая остаточная конфигурационная энтропия $S_{\text{conf}}^{\text{ord}} > R$ (рисунок 1), способствующая дополнительной стабилизации упорядоченной фазы. В частности, в высокоэнтропийном $\text{PbSc}_{1/5}\text{In}_{1/5}\text{Nb}_{1/5}\text{Ta}_{1/5}\text{Ti}_{1/5}\text{O}_3$ наблюдается промежуточная $T_{\text{од}} \approx 1400$ К с формированием частично упорядоченной структуры: подрешётка B' содержит Sc/In, B'' — Nb/Ti, тогда как Ta распределён между обеими подрешётками. Такое состояние

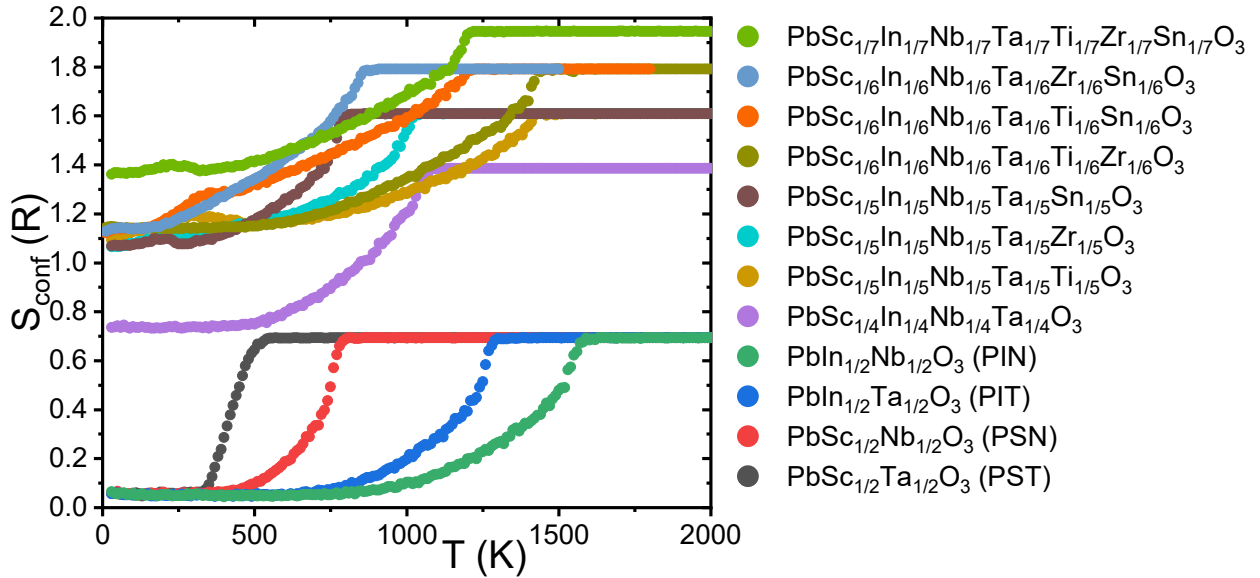


Рисунок 1 — Зависимость конфигурационной энтропии свинецсодержащих двойных, средне- и высокоэнтропийных перовскитов от температуры согласно данным МС-моделирования в единицах газовой постоянной R .

сохраняет остаточную конфигурационную энтропию $S_{\text{conf}}^{\text{ord}} = 1.19R$ при 300 К, рассчитанную по формуле: $S_{\text{conf}} = -\frac{1}{2}R \left(\sum_i x'_i \ln x'_i + \sum_j x''_j \ln x''_j \right)$, где x'_i и x''_j — мольные доли катионов типа i и j в подрешётках B' и B'' .

Далее были исследованы два ряда барий-содержащих ВЭП (10 эквиатомных $\text{Ba}(5B_{0.2})\text{O}_3$ и 8 неэквиатомных составов), успешный синтез которых описан в литературе [6; 7]. МС-моделирование выявило ФП «порядок–беспорядок» с упорядочением типа «каменной соли», при котором B -подрешётка разделяется на две взаимопроникающие субрешётки (B' и B'') с хаотичным распределением катионов внутри каждой. В случаях, когда значения T_{od} в этих материалах довольно высоки, это согласуется с экспериментально подтверждённым наличием атомного упорядочения. Расчёты выявили заметные расхождения вычисленных и экспериментальных параметров решётки для некоторых составов, содержащих катионы с переменной валентностью. Замена степеней окисления этих катионов на отличные от формальных позволила улучшить согласие с экспериментальными данными. Кроме того, проведены МС-моделирования для нескольких других синтезированных ВЭП, которые подтвердили их неупорядоченные состояния относительно низкими расчётными значениями T_{od} .

В низкоэнтропийных двойных перовскитах $AB'_{1/2}B''_{1/2}\text{O}_3$ катионное упорядочение традиционно связывают с разницей степеней окисления $\Delta Z_B = |Z_{B'} - Z_{B''}|$ и ионных радиусов. При $\Delta Z_B \geq 2$ обычно наблюдается

упорядочение, однако исключения (например, $\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ [9] с $\Delta Z_B = 2$ и низкой расчётной $T_{\text{од}} = 17$ К [8]) указывают на необходимость дополнительных критериев. Для обобщения результатов, полученных в этом разделе, определены нормированные стандартные отклонения степеней окисления катионов σ_Z [7] и ненапряжённых длин катион-анионных связей σ_l [8] атомов в B -подрешётке:

$$\sigma_Z = \sqrt{\sum_i x_i (1 - Z_i / \sum_j x_j Z_j)^2}, \quad \sigma_l = \sqrt{\sum_i x_i (1 - l_i / \sum_j x_j l_j)^2}, \quad (2)$$

где x_i — молекулярная доля катиона i в подрешётке, l_i — ненапряжённая длина катион-анионной связи — табулированное значение для пары анион-катион, вычисленное на основе эмпирических данных параметров ячейки (см. приложение работы [8]), а суммирование происходит по всем катионам в B -подрешётке. Анализ зависимости $T_{\text{од}}$ от σ_Z для соединений, изученных в этом исследовании, только подтвердил общую тенденцию увеличения $T_{\text{од}}$ с ростом разницы в степенях окисления катионов (рисунок 2, а). Однако обнаружена чёткая квадратичная зависимость $T_{\text{од}} = C\sigma_l^2$, где $C = 1.73 \cdot 10^6$ К (рисунок 2, б), согласующаяся и с расчётами в приближении Брэгга–Уильямса [8], где $T_{\text{од}}$ также пропорциональна квадрату разницы длин ненапряжённых связей. Полученное выражение упрощает оценку температур упорядочения B -катионов $T_{\text{од}}$ для систем со структурой перовскита, сводя её к расчёту σ_l . Таким образом, результаты этого раздела позволили сформулировать *первое* и *второе* научные положения.

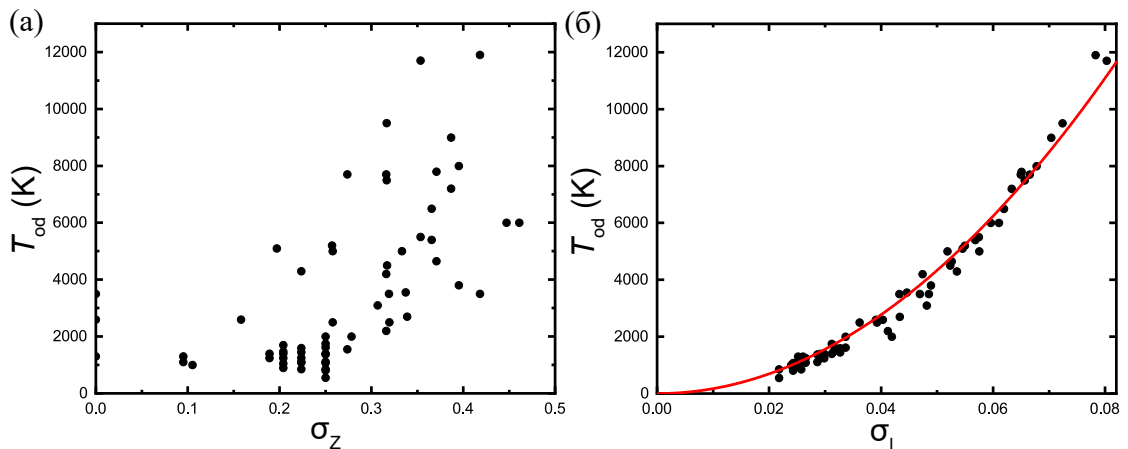


Рисунок 2 — Зависимости температуры ФП катионного упорядочения $T_{\text{од}}$ от стандартного отклонения (а) σ_Z и (б) σ_l . Сплошная кривая представляет собой аппроксимацию при помощи квадратичной функции (б).

Разработанная МС-модель позволяет рассчитывать распределение катионов по упорядоченным подрешёткам перовскитоподобных соединений ABO_3 , что особенно ценно для анализа данных рентгеноструктурных исследований методом Ритвельда, особенно в случаях неочевидного распределения катионов. С увеличением количества катионов в ВЭП расчёты с использованием, например, DFT становятся чрезвычайно сложными, однако изложенный подход требует минимального набора входных параметров и прост в реализации.

В **четвёртом** разделе представлены результаты исследований магнитных ФП в твёрдых растворах (ТР) $(1-x)BiFeO_3-xAFe_{1/2}M_{1/2}O_3$ ($A = Pb, Ba, Ca$ или Sr ; $M = Nb$ или Sb ; $x = 0 \dots 1.0$, $\Delta x = 0.1$) методом МС. Рассчитанные в DFT параметры обменного взаимодействия [A2; A6] использовались для МС-моделирования магнитных свойств ТР при различных сценариях распределения атомов Fe и M в B -подрешётке: статистическое, кластерное и упорядоченное. Особое внимание уделено установлению магнитного основного состояния и магнитных свойств мультиферроика $PbFe_{1/2}Sb_{1/2}O_3$ (PFS) при различных распределениях катионов Fe^{3+} и Sb^{5+} [A3; A7].

Спин-поляризованные DFT-расчёты в приближении GGA+U позволили определить обменные константы J_1 , J_2 и J_3 (до третьего ближайшего соседа) для предельных составов BFO, AFN ($A = Pb, Ba, Ca$ или Sr) и PFS, используемые в последующем МС-моделировании магнитных свойств. Для этого разницы энергий различных коллинеарных магнитных конфигураций аппроксимировались обменным гамильтонианом. Для ТР $(1-x)BFO - xAFN/PFS$ при $0 < x < 1$ использована линейная аппроксимация $J_i = (1-x)J_i^{BFO} + xJ_i^{AFN/PFS}$, $i = 1, 2, 3$. Полученные значения (таблица 1, $J > 0$ соответствует АФМ) согласуются с литературными данными и показывают, что в AFN доминирует J_1 , тогда как в PFS существенно возрастают J_2 и J_3 , причём значительная величина АФМ константы J_2 может приводить к спиновой фрустрации, препятствуя установлению магнитного порядка с J_1 . При этом константа J_1 уменьшается в ряду соединений $PFN \rightarrow BFN \rightarrow SFN \rightarrow CFN$ [A2; A6].

Исследовались четыре типа распределения катионов в ТР $(1-x)BFO-xAFN/PFS$: статистическое (SS_d), два кластеризованных

Таблица 1 — Параметры обменного взаимодействия, рассчитанные с использованием метода GGA+U [A2]. Для сравнения приведены литературные данные.

Соединение	J_1 , мэВ	J_2 , мэВ	J_3 , мэВ	Литература
BiFeO ₃ (BFO)	40.9	1.2	-0.05	[A2]
PbFe _{1/2} Nb _{1/2} O ₃ (PFN)	27.2	0.65	-0.03	[A2]
BaFe _{1/2} Nb _{1/2} O ₃ (BFN)	22.5	0.57	0.01	[A2]
SbFe _{1/2} Nb _{1/2} O ₃ (SFN)	17.0	0.7	0.01	[A2]
CaFe _{1/2} Nb _{1/2} O ₃ (CFN)	15.2	0.8	0.02	[A2]
PbFe _{1/2} Sb _{1/2} O ₃ (PFS)	20.9	5.4	1.5	[A2]
BiFeO ₃ (BFO)	38.0	3.0	—	[10]
PbFe _{1/2} Nb _{1/2} O ₃ (PFN)	40.3	1.1	-0.05	[11]

(SS_{cl1}, SS_{cl2}), локально упорядоченное (SS_{po}) и только для PFS полностью упорядоченное (SS_o). В MC-моделировании для каждого x начальное равномерное случайное распределение катионов Fe³⁺ и Nb⁵⁺/Sb⁵⁺ (SS_d) модифицировалось перестановками катионов: для SS_{cl1}/SS_{cl2} минимизировалось число соседей Nb/Sb у атома Fe, для SS_{po} — максимизировалось. Для $x = 1$ (AFN/PFS) SS_d даёт в среднем 3 соседа Nb/Sb у атома Fe, SS_{cl1}/SS_{cl2} демонстрируют преобладание Fe среди соседей (согласуясь с мёссбауэровскими исследованиями [4]), а SS_{po} — доминирование Nb/Sb среди соседей. В SS_o при $x = 1$ (PFS) каждый атом Fe окружён строго шестью атомами Sb, а при $0 < x < 1$ B -подрешётка разделяется на две: одну, полностью занятую атомами Fe, и другую со случайным распределением атомов Sb и оставшихся Fe.

Расчёты температур магнитных ФП T_N для ТР с различным распределением B -катионов (рисунок 3) показали максимальные значения T_N в кластеризованных системах, в которых высокая концентрация пар катионов $Fe^{3+} - Fe^{3+}$ с наибольшим взаимодействием J_1 . В PFS значительная величина J_2 уменьшает разницу в T_N между разными типами распределений. Экспериментальные данные [5; 9] в целом подтверждают расчётную тенденцию снижения T_N , однако для систем $(1 - x)\text{BFO} - x\text{SFN}/\text{CFN}/\text{PFS}$ при $x > 0.7$ в экспериментах [5; 9] наблюдается резкое падение T_N . Такое расхождение, возможно, связано с неточностями в определении параметров J или с изменением локального катионного окружения. Зависимости магнитной восприимчивости от температуры демонстрируют аномалии вблизи T_N только для SS_{cl1},

SS_{cl2} , аналогичные наблюдаемым экспериментально в PFN, что может свидетельствовать о наличии кластеризации в реальных образцах.

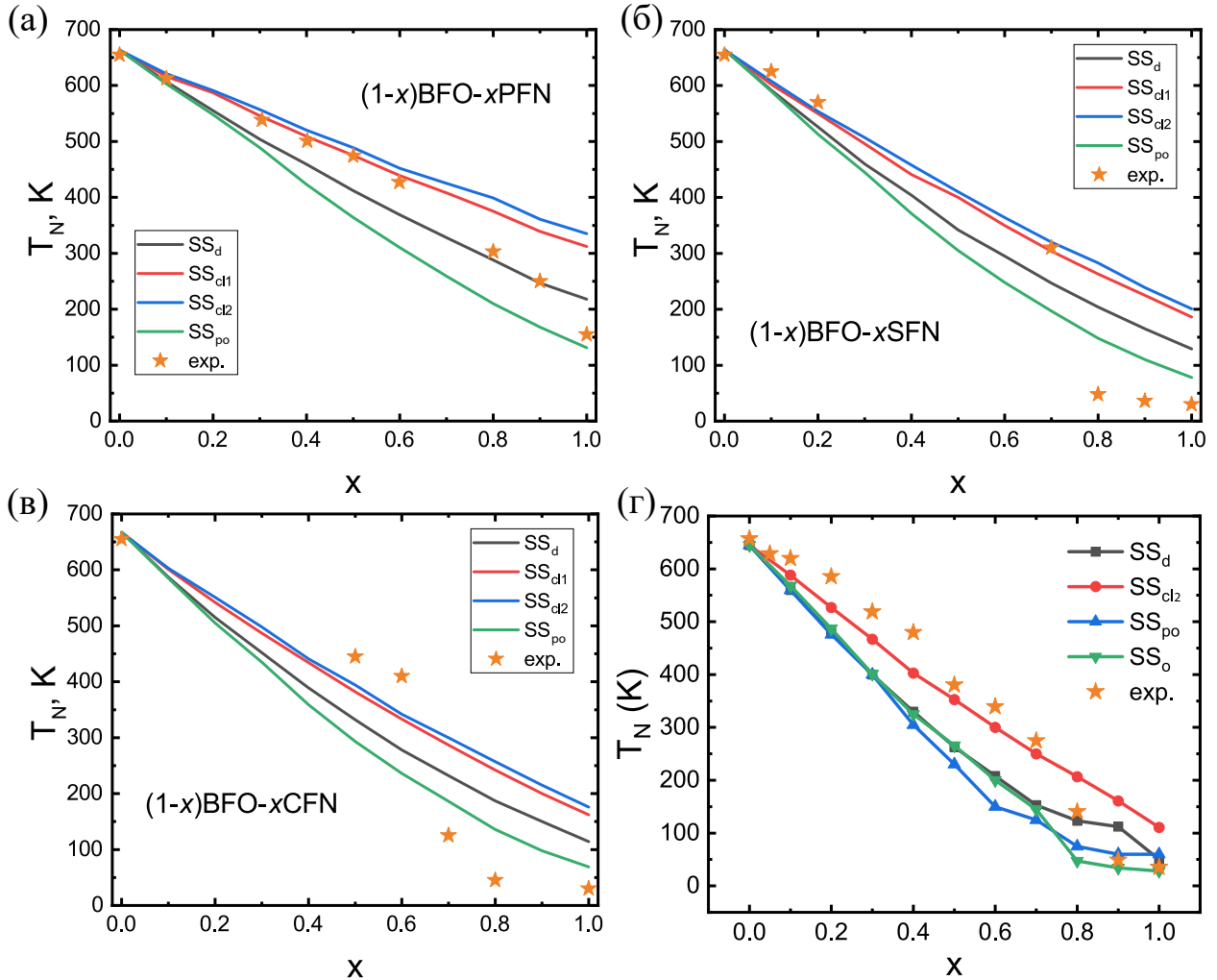


Рисунок 3 — Расчётные зависимости температур магнитных ФП от концентрации для $(1-x)\text{BFO}-x\text{PFN}$ (а), $(1-x)\text{BFO}-x\text{SFN}$ (б), $(1-x)\text{BFO}-x\text{CFN}$ (в), $(1-x)\text{BFO}-x\text{PFS}$ (г). Экспериментальные данные из работ [5; 9] отмечены символами (звёздочки).

Особое внимание уделено изучению магнитных ФП в ТР $(1-x)\text{BiFeO}_3 - x\text{PbFe}_{1/2}\text{Sb}_{1/2}\text{O}_3$ при различных конфигурациях распределения катионов Fe^{3+} и Sb^{5+} [А3]. Результаты показывают, что при охлаждении исследуемые ТР претерпевают магнитный ФП либо в фазу с дальним магнитным порядком, либо в состояние спинового стекла. Анализ параметров порядка позволил построить магнитные фазовые диаграммы (рисунок 4, а, б, в). Ниже определённых критических значений концентрации x_c все ТР демонстрируют основное состояние с магнитным упорядочением G -типа, характерное для ВFO. В кластеризованных ТР SS_{cl1} параметр магнитного порядка G -типа слабо зависит от концентрации x благодаря образованию крупных кластеров Fe^{3+} .

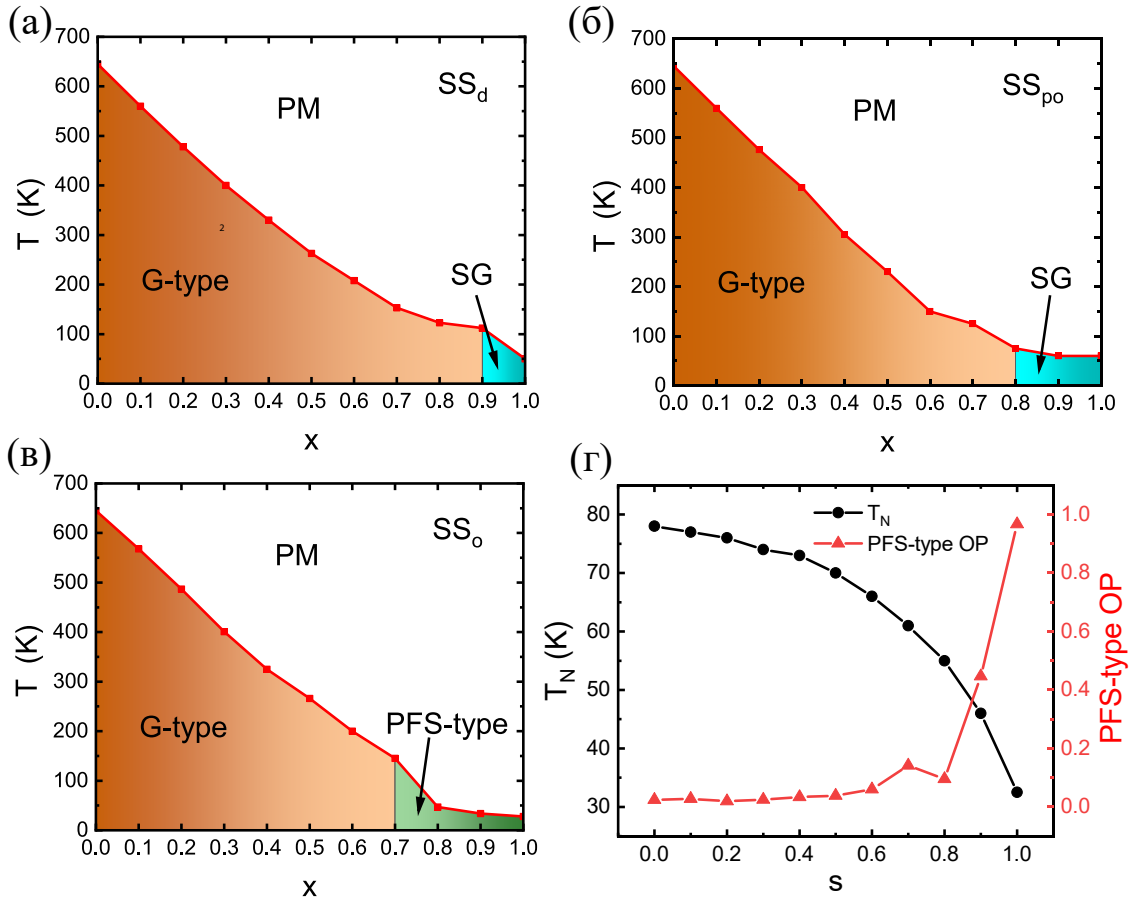


Рисунок 4 — Магнитные фазовые диаграммы «температура T — концентрация x » для ТР $(1-x)\text{BFO} - x\text{PFS}$: SS_d (а), SS_{po} (б) и SS_o (в). Зависимости температуры магнитного ФП $T_N(s)$ (г, левая шкала) и величины параметра порядка PFS-типа при $T \sim 1$ К (г, правая шкала) от степени катионного упорядочения s в PFS.

Неупорядоченные ТР BFO-PFS (SS_d) при $x \geq x_c \approx 0.9$, как и частично упорядоченные SS_{po} при $x \geq 0.8$, переходят в состояние спинового стекла, в отличие от PFN с G -типом упорядочения [4; 12], что объясняется существенно большим значением АФМ константы J_2 в PFS (таблица 1), конкурирующей с J_1 и разрушающей порядок G -типа. Упорядоченные ТР SS_o демонстрируют магнитную морфотропную границу при $x \approx 0.7$, где G -тип сменяется PFS-типом магнитного упорядочения, который наблюдается в упорядоченном PFS (см. ниже). Это составляет суть **третьего** научного положения. В упорядоченных ТР SS_o в фазе G -типа, где одна подрешётка полностью занята катионами Fe^{3+} , а другая содержит как катионы Fe^{3+} , так и Sb^{5+} , возникает ферромагнитное упорядочение с максимальной намагниченностью при $x \approx 0.4$ из-за разного числа спинов в подрешётках с противоположно ориентированными спинами.

Магнитное поведение самого PFS в зависимости от степени упорядочения s катионов Fe^{3+} и Sb^{5+} представляет собой недостаточно

изученный вопрос: экспериментальные исследования магнитных свойств ограничены образцами с высокой степенью атомного упорядочения, где при $T \approx 170 - 190$ К наблюдается небольшое тетрагональное искажение [13]. В приближении кубической симметрии, пренебрегая искажением, магнитная подрешётка образует гранецентрированную кубическую (ГЦК) решётку с АФМ взаимодействием ближайших соседей. Наши расчёты для полностью упорядоченного PFS [A3] подтверждают ФП первого рода в коллинеарную магнитную структуру с волновым вектором $\vec{k} = \frac{2\pi}{a}(1, 0, 0)$, согласующийся с нейтронографическими данными [13]. Исследование влияния разупорядочения катионов $\text{Fe}^{3+}/\text{Sb}^{5+}$ в PFS (рисунок 4, г) показало, что температура ФП $T_N(s)$, определённая с использованием параметра порядка Эдвардса-Андерсона, возрастает с уменьшением степени упорядочения s , что связано с усилением доминирующего взаимодействия J_1 из-за появления катионов Fe^{3+} в ближайшем окружении Fe^{3+} . При $s \leq 0.8$ параметр порядка PFS-типа исчезает, и система переходит в спиновое стекло, что отражается в увеличении температуры Кюри-Вейса $|\Theta_{\text{CW}}(s)|$ с ростом беспорядка.

Полученные результаты демонстрируют хорошее согласие с экспериментальными данными, углубляя понимание магнитных свойств данных систем в широком диапазоне концентраций, а построенные фазовые диаграммы $T - x$ для BFO-PFS и $T - s$ для PFS выявляют магнитные морфотропные границы, что открывает перспективы для усиления магнитного отклика материалов.

В **пятом** разделе показано, что треугольное ферримагнитное упорядочение типа Яфета-Киттеля в шпинелях AB_2X_4 , при котором спины A -подрешётки разбиваются на две неколлинеарные субподрешётки, приводит к возникновению электрической поляризации, а кристалл становится мультиферроиком. Предложенный механизм проиллюстрирован расчётом магнитных и магнитоэлектрических свойств MnCr_2S_4 с учётом одноионной анизотропии [A4; A8; A9].

В шпинелях с АФМ взаимодействиями J_{A-B} и J_{A-A} возможно формирование ферримагнитного порядка Яфета-Киттеля, где подрешётка A разделяется на две с неколлинеарными намагниченностями \vec{M}_{A1} и \vec{M}_{A2} , а полные намагниченности подрешёток A ($\vec{M}_A = \vec{M}_{A1} + \vec{M}_{A2}$) и B (\vec{M}_B) антипараллельны. Такой порядок описывается в группе $Fd\bar{3}m$ двумя

параметрами порядка: ферромагнитным $\vec{M} = \vec{M}_A + \vec{M}_B$, преобразующимся по неприводимому представлению Γ^{4+} , и АФМ $\vec{L} = \vec{M}_{A1} - \vec{M}_{A2}$, преобразующимся по Γ^{5-} [2]. Конденсация Γ^{5-} нарушает инверсионную симметрию, порождая магнитоэлектрическое взаимодействие вида $L_x(M_y P_z + M_z P_y) + L_y(M_z P_x + M_x P_z) + L_z(M_x P_y + M_y P_x)$, что приводит к линейному магнитоэлектрическому эффекту и индуцированной несобственной электрической поляризации \vec{P} ниже T_N . Таким образом, сосуществование \vec{M} и \vec{L} в шпинелях с треугольным упорядочением типа Яфета–Киттеля с неколлинеарными спинами в A -подрешётке делает систему мультиферроиком II типа, где электрическая поляризация индуцируется спиновым порядком, в отличие от шпинелей с неколлинеарностью в подрешётке B без мультипликации ячейки, которые не проявляют магнитоэлектрических свойств.

Мультиферроик MnCr_2S_4 демонстрирует сложное магнитное поведение с последовательными ФП: ферромагнитным при $T_C \approx 65$ К и в состоянии Яфета–Киттеля ниже $T_{\text{YK}} \approx 5$ К, где спины подрешётки Mn^{2+} разделяются на две неколлинеарные. Приложенное магнитное поле индуцирует серию ФП, включая состояние с плато намагниченности, соответствующее антипараллельной ориентации спинов Mn^{2+} . В отличие от существующих изотропных моделей с биквадратным взаимодействием, учёт одноионной анизотропии [A4] позволяет описать экспериментально наблюдаемую магнитную анизотропию [3] и детально воспроизвести экспериментальные фазовые диаграммы, что наряду с предыдущими результатами приводит к **четвёртому** научному положению.

Фазовые диаграммы MnCr_2S_4 «магнитное поле–температура» [A4] демонстрируют симметрию относительно 40 Тл ниже 20 К (рисунок 5). При ориентации магнитного поля вдоль жёсткой оси в области ниже 25 Тл (фаза 2а) и выше 55 Тл (фаза 6а) реализуется неколлинеарный порядок Яфета–Киттеля и его обратная форма, сопровождающиеся ненулевой сегнетоэлектрической поляризацией. Промежуточные поля (35–50 Тл) характеризуются асимметричными состояниями (фазы 3, 5) с отклонением намагниченности хрома от направления поля на 3–5° для жёсткой оси. Вблизи 40 Тл наблюдаются коллинеарные фазы 4а (плато намагниченности) и 4б (ненулевой угол подрешётки Mn с полем). При ориентации поля вдоль лёгкой оси (рисунок 5, б) асимметричные состояния

подавляются, а фаза 4а расширяется. Все несегнетоактивные состояния (1, 4а/4б, 7) связаны с коллинеарным упорядочением спинов Mn^{2+} или чистым индуцированным ферромагнетизмом.

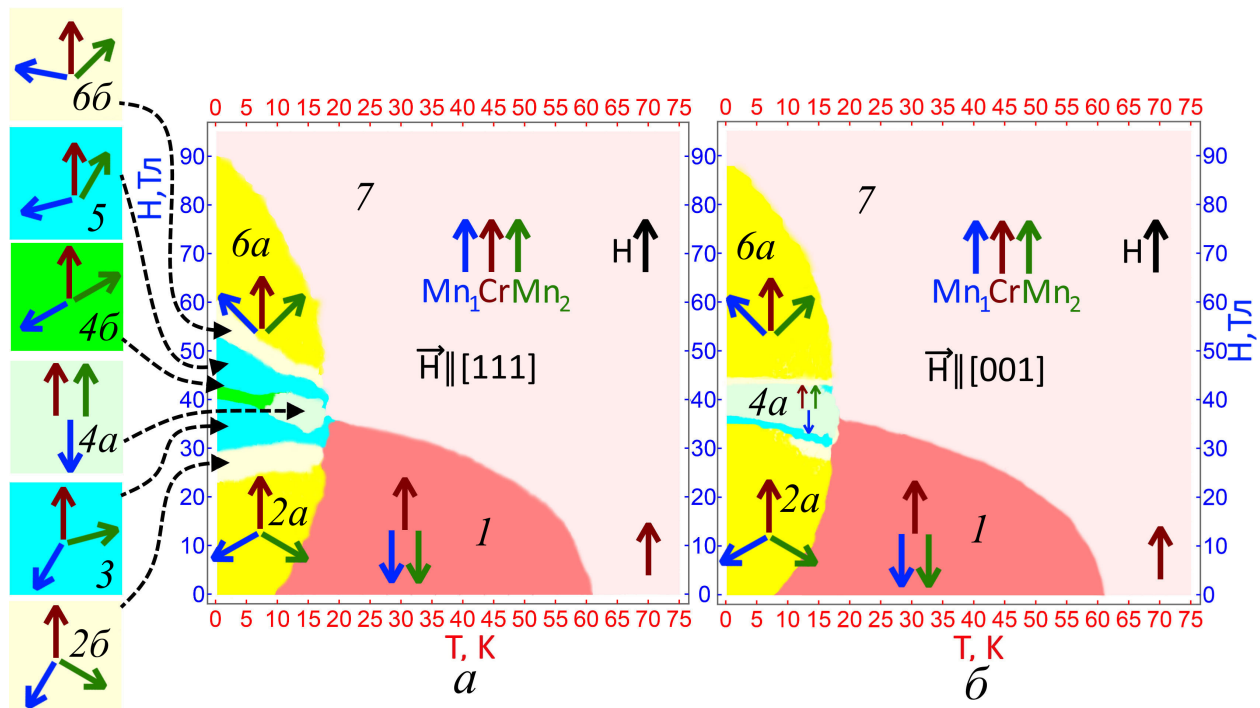


Рисунок 5 — Расчётные фазовые диаграммы «магнитное поле — температура» $MnCr_2S_4$ для направления поля вдоль жёсткой оси [111] (а) и вдоль лёгкой оси [001] (б). Взаимная ориентация магнитных моментов подрешёток изображена стрелками: красная — Cr (сонаправлена с приложенным полем), синяя — Mn_1 , зелёная — Mn_2 .

Электрическая поляризация P , рассчитанная через вышеупомянутое магнитоэлектрическое взаимодействие, и обусловленная спин-зависимыми электрическими дипольными моментами ионов Mn^{2+} , находящимися в нецентросимметричных положениях [2], максимальна в неколлинеарных фазах Яфета–Киттеля (2, 6) и исчезает в фазе 4а из-за коллинеарного АФМ упорядочения спинов Mn^{2+} . Поляризация перпендикулярна полю для лёгкой оси, а для поля вдоль промежуточной или жёсткой осей появляется параллельная компонента, как, например, в асимметричных состояниях (3, 5). Максимум P наблюдается при ориентации поля вдоль лёгкой оси.

Расчётные кривые намагниченностей $M(T)$ и $M(H)$ для $MnCr_2S_4$ выявляют [A4] характерные особенности: излом при $T_{YK} \approx 5$ К, указывающий на ФП в состояние Яфета–Киттеля, и максимум $M(T)$ при ~ 25 К, качественно согласующийся с экспериментом [3], а также чёткое плато намагниченности в фазе 4а при низких температурах, наиболее

выраженное для лёгкой оси. В фазе 4а плато намагниченности обусловлено насыщением моментов Cr^{3+} , так как внешнее поле ~ 43 Тл, эквивалентное среднему молекулярному полю, действующему на спины Mn^{2+} от 12 ближайших спинов Cr^{3+} , компенсирует АФМ Mn–Cr взаимодействие.

В **заключении** приведены **основные результаты и выводы** работы:

1. На основе метода ненапряжённых катион-анионных связей и с использованием метода Монте-Карло разработан подход к моделированию процессов атомного упорядочения в высокоэнтропийных оксидах типа перовскита ABO_3 с произвольным заполнением B -подрешётки атомами различных сортов и при произвольном внешнем давлении.

2. Показано, что катионы в B -подрешётке высокоэнтропийных перовскитов способны формировать упорядоченные структуры типа «каменной соли». Разработанная модель демонстрирует возможность формирования такого порядка в высокоэнтропийных перовскитах, позволяет оценить температуру фазового перехода «порядок-беспорядок» T_{od} , температурное поведение приведённого параметра ячейки и его изменение при фазовом переходе, а также позволяет рассчитать заселённость возникающих подрешёток катионами различного сорта.

3. Установленная зависимость $T_{\text{od}} = C\sigma_l^2$, где $C = 1.73 \cdot 10^6$ К позволяет легко оценить температуру фазового перехода атомного упорядочения T_{od} в высокоэнтропийном перовските заданного состава, рассчитав нормированное стандартное отклонение длин катион-анионных связей σ_l атомов в B -подрешётке.

4. Для ряда высокоэнтропийных перовскитов, синтез которых уже описан в литературе, а также для многих перспективных пока ещё не синтезированных составов определены температуры фазовых переходов атомного упорядочения и приведённые параметры решётки, а также предсказаны возможные распределения катионов по кристаллографическим подрешёткам.

5. Разработана программа численного моделирования магнитных фазовых переходов в кристаллах с использованием метода Монте-Карло, имеющая возможность учёта одноионной магнитной анизотропии и биквадратного обмена.

6. Для твёрдых растворов систем $(1 - x)\text{BiFeO}_3 - x\text{AFe}_{1/2}\text{M}_{1/2}\text{O}_3$ ($A = \text{Pb}, \text{Ba}, \text{Ca}$ или Sr ; $M = \text{Nb}$ или Sb) с помощью теории функционала плотности рассчитаны параметры обменного взаимодействия, что позволило провести исследование их магнитных свойств. Рассчитаны температуры магнитных фазовых переходов, типы возникающего магнитного порядка с учётом различных характеров распределений атомов по B -подрешётке перовскита.

7. Установлено влияние распределения B -катионов (случайное, кластеризованное, частично либо полностью упорядоченное) на температуры магнитных фазовых переходов в твёрдых растворах систем $(1 - x)\text{BiFeO}_3 - x\text{AFe}_{1/2}\text{M}_{1/2}\text{O}_3$ ($A = \text{Pb}, \text{Ba}, \text{Ca}$ или Sr ; $M = \text{Nb}$ или Sb).

8. Экспериментально наблюдаемое падение T_N при $x \gtrsim 0.7$ для $(1 - x)\text{BiFeO}_3 - x\text{CaFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$, $(1 - x)\text{BiFeO}_3 - x\text{SrFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ и $(1 - x)\text{BiFeO}_3 - x\text{PbFe}_{1/2}\text{Sb}_{1/2}\text{O}_3$ объяснено изменением локального катионного порядка.

9. Для твёрдых растворов системы $(1 - x)\text{BiFeO}_3 - x\text{PbFe}_{1/2}\text{Sb}_{1/2}\text{O}_3$ построены магнитные фазовые диаграммы для неупорядоченного, частично упорядоченного и полностью упорядоченного распределения катионов Fe^{3+} и Sb^{5+} . В упорядоченном случае обнаружена магнитная морфотропная фазовая граница между магнитным порядком G -типа при $x < 0.7$ и PFS-типа при $x > 0.7$.

10. На примере MnCr_2S_4 установлено, что треугольное ферримагнитное упорядочение Яфета–Киттеля в шпинелях с неколлинеарными спинами в подрешётке A приводит к возникновению электрической поляризации, а сам кристалл становится мультиферроиком II типа.

11. Найден вклад в разложение термодинамического потенциала, ответственный за индуцирование электрической поляризации при рассматриваемом упорядочении Яфета–Киттеля.

12. С использованием метода Монте-Карло для MnCr_2S_4 построены магнитные фазовые диаграммы в координатах «температура–магнитное поле», хорошо согласующиеся с экспериментальными данными.

13. Показано, что одноионная магнитная анизотропия объясняет сложное поведение магнитных свойств MnCr_2S_4 в магнитном поле и, в частности, фазу с плато намагниченности.

Список цитированной литературы

1. Phase transitions in multiferroic BiFeO₃ crystals, thin-layers, and ceramics: enduring potential for a single phase, room-temperature magnetoelectric ‘holy grail’ / A. M. Kadomtseva, Y. F. Popov, A. P. Pyatakov, [et al.] // Phase Transitions. — 2006. — DOI: 10.1080/01411590601067235.
2. *Ter-Oganessian, N. V.* Cation-ordered $A'_{1/2}A''_{1/2}B_2X_4$ magnetic spinels as magnetoelectrics / N. V. Ter-Oganessian // J. Magn. Mater. — 2014. — Vol. 364. — P. 47–54. — DOI: 10.1016/j.jmmm.2014.04.019.
3. Magnetic, heat capacity, and conductivity studies of ferrimagnetic MnCr₂S₄ single crystals / V. Tsurkan, M. Mücksch, V. Fritsch, [et al.] // Phys. Rev. B. — 2003. — Vol. 68, no. 13. — P. 134434. — DOI: 10.1103/PhysRevB.68.134434.
4. Magnetic properties of PbFe_{1/2}Nb_{1/2}O₃: Mössbauer spectroscopy and first-principles calculations / I. P. Raevski, S. P. Kubrin, S. I. Raevskaya, [et al.] // Phys. Rev. B. — 2012. — Vol. 85. — P. 224412. — DOI: 10.1103/PhysRevB.85.224412.
5. Mössbauer study of cation substitution effect on magnetic phase transitions in (1-*x*)BiFeO₃-*x*AFe_{0.5}B_{0.5}O₃ (*A*=Ba, Sr, Pb; *B*=Nb, Sb) solid solutions / S. P. Kubrin, I. V. Lisnevskaya, I. G. Sheptun, [et al.] // J. Adv. Dielectr. — 2025. — P. 2540012. — ISSN 2010-135X. — DOI: 10.1142/S2010135X25400120.
6. High-entropy stoichiometric perovskite oxides based on valence combinations / J. Ma, K. Chen, C. Li, [et al.] // Ceram. Int. — 2021. — Vol. 47, no. 17. — P. 24348–24352. — ISSN 0272-8842. — DOI: 10.1016/j.ceramint.2021.05.148.
7. High-entropy oxides based on valence combinations: design and practice / L. Tang, Z. Li, K. Chen, [et al.] // J. Am. Ceram. Soc. — 2021. — Vol. 104, no. 5. — P. 1953–1958. — DOI: 10.1111/jace.17659.
8. *Sakhnenko, V.* Theory of order–disorder phase transitions of *B* cations in $AB'_{1/2}B''_{1/2}O_3$ perovskites / V. Sakhnenko, N. Ter-Oganessian // Acta Cryst. B. — 2018. — Vol. 74. — P. 264–273. — DOI: 10.1107/S205252061800392X.
9. Tuning dielectric and magnetic properties of complex perovskites PbB'_{1/2}B''_{1/2}O₃ and solid solutions by varying the degree of compositional (chemical) ordering of *B'* and *B''* ions / I. P. Raevski, S. P. Kubrin, A. A. Gusev, [et al.] // Ferroelectrics. — 2021. — Vol. 576, no. 1. — P. 29–39. — DOI: 10.1080/00150193.2021.1888257.
10. Magnetic interactions in BiFeO₃: A first-principles study / C. Xu, B. Xu, B. Dupé, L. Bellaïche // Phys. Rev. B. — 2019. — Vol. 99. — P. 104420. — DOI: 10.1103/PhysRevB.99.104420.
11. Magnetic interactions in disordered perovskite PbFe_{1/2}Nb_{1/2}O₃ and related compounds: Dominance of nearest-neighbor interaction / R. O. Kuzian, I. V. Kondakova, A. M. Daré, V. V. Laguta // Phys. Rev. B. — 2014. — Vol. 89. — P. 024402. — DOI: 10.1103/PhysRevB.89.024402.

12. Coexistence of antiferromagnetic and spin cluster glass order in the magnetoelectric relaxor multiferroic $\text{Pb}(\text{Fe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5})\text{O}_3$ / W. Kleemann, V. V. Shvartsman, P. Borisov, A. Kania // *Phys. Rev. Lett.* — 2010. — Vol. 105. — P. 257202. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.105.257202.

13. The crystal and magnetic structures of the ordered perovskite $\text{Pb}_2\text{FeSbO}_6$ studied by neutron diffraction and Mössbauer spectroscopy / B. Argymbek, T. Kmjec, V. Chlan, [et al.] // *J. Magn. Magn. Mater.* — 2019. — Vol. 477. — P. 334–339. — DOI: 10.1016/j.jmmm.2019.01.076.

Список публикаций автора

В изданиях, входящих в международную базу цитирования Scopus и/или Web of Science

A1. *Motseyko, A. V.* On the atomic ordering in the *B*-sublattice of high-entropy perovskites / A. V. Motseyko, N. V. Ter-Oganessian // *Journal of Alloys and Compounds.* — 2024. — Vol. 976. — P. 172945. — DOI: 10.1016/j.jallcom.2023.172945. — K1.

A2. Monte Carlo studies of magnetic phase transitions in $(1-x)\text{BiFeO}_3 - x\text{AFe}_{1/2}\text{M}_{1/2}\text{O}_3$ ($A = \text{Pb}, \text{Ba}, \text{Ca}, \text{Sr}; M = \text{Nb}, \text{Sb}$) solid solutions / A. V. Motseyko, S. A. Guda, A. V. Pushkarev, [et al.] // *Ferroelectrics.* — 2025. — Vol. 619, no. 4–6. — P. 216–224. — DOI: 10.1080/00150193.2024.2328847. — K2.

A3. Magnetic phase transitions in $(1-x)\text{BiFeO}_3 - x\text{PbFe}_{1/2}\text{Sb}_{1/2}\text{O}_3$ solid solutions studied by the Monte Carlo method / A. V. Motseyko, A. V. Pushkarev, N. M. Olekhovich, [et al.] // *Computational Materials Science.* — 2025. — Vol. 253. — P. 113860. — DOI: 10.1016/j.commatsci.2025.113860. — K1.

A4. *Motseyko, A. V.* Electric Polarization Induced by Yafet–Kittel Ordering in Spinels / A. V. Motseyko, N. V. Ter-Oganessian // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics.* — 2023. — Vol. 87, no. 9. — P. 1282–1287. — DOI: 10.3103/S1062873823703161. — [*Русскоязычная версия:* Моцейко, А. В. Индуцирование электрической поляризации упорядочением типа Яфета–Киттеля в шпинелях / А. В. Моцейко, Н. В. Тер-Оганесян // *Известия Российской академии наук. Серия физическая.* — 2023. — Т. 87, № 9. — С. 1242–1247. — DOI 10.31857/S0367676523702198.]. — K2 .

В сборниках трудов конференций

A5. *Моцейко, А. В.* Атомное упорядочение в высокоэнтропийных перовскитах / А. В. Моцейко, Н. В. Тер-Оганесян // XXIII Всероссийская конференция по физике сегнетоэлектриков (ВКС 23), [Тверь, 3–6 октября 2023 г.]: тезисы / Министерство науки и высшего образования РФ, Научный совет Российской академии наук по физике конденсированных сред, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», Общероссийская общественная организация «Российское профессорское собрание». — Тверь : Тверской государственный университет, 2023. — С. 156. — URL: <https://cloud.mail.ru/public/FbvE/Y2puikLjn> (дата обр. 15.05.2025).

А6. Моделирование магнитного упорядочения в твердых растворах $\text{BiFeO}_3 - \text{AFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ ($A = \text{Pb}, \text{Ba}, \text{Sr}, \text{Ca}$) методом Монте-Карло / А. В. Моцейко, Н. В. Тер-Оганесян, А. В. Пушкарев [и др.] // XXIII Всероссийская конференция по физике сегнетоэлектриков (ВКС 23), [Тверь, 3–6 октября 2023 г.]: тезисы / Министерство науки и высшего образования РФ, Научный совет Российской академии наук по физике конденсированных сред, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», Общероссийская общественная организация «Российское профессорское собрание». — Тверь : Тверской государственный университет, 2023. — С. 79. — URL: <https://cloud.mail.ru/public/FbvE/Y2puikLjn> (дата обр. 15.05.2025).

А7. Monte Carlo studies of magnetic phase transitions in $(1-x)\text{BiFeO}_3 - x\text{PbFe}_{1/2}\text{Sb}_{1/2}\text{O}_3$ solid solutions / A. V. Motseyko, A. V. Pushkarev, N. M. Olekhovich, [et al.] // Materials Science and Nanotechnology (MSN-2024): Second International Conference, Ekaterinburg, 27–30 August 2024: Abstract Book. — Ekaterinburg : Ural Federal University, 2024. — P. 91. — URL: https://nanocenter.urfu.ru/sites/default/files/MSN-2024_Abstract_book.pdf (visited on 05/15/2025).

А8. Моцейко, А. В. Мультиферроидные свойства шпинелей со спиновым упорядочением Яфета–Киттеля / А. В. Моцейко, Н. В. Тер-Оганесян // Наука и технологии Юга России: XVII Ежегодная молодежная научная конференция, г. Ростов-на-Дону, 15–30 апреля 2021 г.: тезисы докладов. — Федеральный исследовательский центр, Южный научный центр Российской академии наук. Ростов-на-Дону : ЮНЦ РАН, 2021. — С. 231. — URL: <https://www.sps1.nsc.ru/FullText/konfe/ВК2021.pdf> (дата обр. 15.05.2025).

А9. Моцейко, А. В. Исследование магнитных и магнитоэлектрических свойств MnCr_2S_4 методом Монте-Карло / А. В. Моцейко, Н. В. Тер-Оганесян // 10(15) международный семинар по физике сегнетоэластиков: материалы 10(15) международного семинара, (г. Воронеж, 18-21 сентября 2022 г.) / Министерство науки и высшего образования Российской федерации, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Воронежский государственный технический университет»; редакционная коллегия: Коротков Л. Н (ответственный редактор) [и др.] — Воронеж : ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», 2022. — С. 98–99. — URL: https://isfp.cchgeu.ru/upload/staff/upr-nauki-i-innov/RPSandISFP/ISFP-10_%D1%81%D0%B1%D0%BE%D1%80%D0%BD%D0%B8%D0%BA%20%D1%82%D0%B5%D0%B7%D0%B8%D1%81%D0%BE%D0%B2.pdf (дата обр. 15.05.2025).

Работа выполнена при поддержке следующих проектов: Государственное задание в сфере научной деятельности — проект Минобрнауки № FENW-2023-0015 (ГЗ0110/23-08-ИФ) 2023–2025 гг.; проект РНФ № 23-42-10024 (РНФ/23-07-ИФ) 2023–2025 гг.; проект РНФ № 22-22-00678 (РНФ/22-09-ИФ) 2021–2023 гг..