**Катионное упорядочение и магнитные свойства людвигитов Co3-xNixBO5.**

***Чернышев А. В., Мошкина Е.М., Еремин Е.В., Софронова С. Н.***

*Аспирант, 3 год обучения*

*Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук*

*E-mail: totez\_181@mail.ru*

В данной работе мы приводим теоретическое исследование катионного упорядочения соединений Co3+Ni2+2-xCo2+xBO5 со структурой людвигита. В элементарной ячейке людвигита содержится 12 ионов переходных металлов, которые занимают четыре кристаллографические позиции: 2a, 2d, 4g и 4h.

С помощью программного пакета Wien2K мы вычисляли полные энергии различных катионноупорядоченных конфигураций [1-3] для трех составов: Co3+Ni2+0,25Co2+1,75BO5, Co3+Ni2+0,5Co2+1,5BO5, Co3+Ni2+0,75Co2+1,25BO5. В первом составе Co3+Ni2+0,25Co2+1,75BO5 один ион кобальта замещается на ион никеля, во втором составе Co3+Ni2+0,5Co2+1,5BO5 два иона кобальта замещены ионами никеля, и в третьем составе Co3+Ni2+0,75Co2+1,25BO5 три иона кобальта замещены ионами никеля. В таблице 1 представлены расчеты разности энергий для конфигураций состава Co3+Ni2+0,75Co2+1,25BO5.

Таблица 1. Вычисленные разности энергий различных катионноупорядоченных конфигураций по отношению к конфигурации с самой низкой энергией для состава Co3+Ni2+0,75Co2+1,25BO5.

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | 2a | | 2d | | 4g | | | | 4h | | | | E |
| № | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
| *1* | ***Ni*** | ***Ni*** | *Co* | *Co* | ***Ni*** | *Co* | *Co* | *Co* | *Co* | *Co* | *Co* | *Co* | **0** |
| 2 | **Ni** | Co | Co | Co | **Ni** | **Ni** | Co | Co | Co | Co | Co | Co | 0,037859 |
| 3 | Co | **Ni** | Co | Co | **Ni** | **Ni** | Co | Co | Co | Co | Co | Co | 0,036366 |
| *4* | *Co* | ***Ni*** | *Co* | *Co* | *Co* | *Co* | ***Ni*** | ***Ni*** | *Co* | *Co* | *Co* | *Co* | **0,000383** |
| 5 | Co | **Ni** | Co | Co | Co | **Ni** | **Ni** | Co | Co | Co | Co | Co | 0,032364 |
| 6 | **Ni** | Co | Co | Co | Co | **Ni** | **Ni** | Co | Co | Co | Co | Co | 0,032362 |
| 7 | Co | **Ni** | Co | Co | **Ni** | Co | Co | **Ni** | Co | Co | Co | Co | 0,032373 |

В рамках первопринципного расчета энергий различных катионноупорядоченных конфигураций было выявлено, что ионы никеля предпочитают замещать ионы кобальта в позициях 2a и 4g.

Исследование магнитных свойств двух соединений Co3+Ni2+0,33Co2+1,67BO5 и Co3+Ni2+0,59Co2+1,41BO5 показали, что оба соединения являются ферримагнетиками и температуры магнитного упорядочения мало отличаются от температуры магнитного упорядочения Co3+Co2+2BO5.

*Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда и Красноярского краевого фонда поддержки научной и научно-технической деятельности, проект № 23-12-20012 (https://rscf.ru/project/23-12-20012/).*

**Литература**

1. P. Blaha, K. Schwarz, F. Tran, R. Laskowski, G. Madsen, L. Marks, WIEN2k: an APW +lo program for calculating the properties of solids, J. Chem. Phys. 152 (2020) 074101.

2. J. Perdew, Y. Wang, Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy, Phys. Rev. B 45 (1992) 13244.

3. J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized gradient approximation made simple, Phys. Rev. Lett. 77 (18) (1996) 3865.