

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)
Химический факультет



ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ В ГЭК

Руководитель ООП

канд. хим. наук, доцент

В.В.Шелковников

подпись

« 16 » 06 20 23 г.

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА СПЕЦИАЛИСТА

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА Fe_3SiTe_2

по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
специализация "Фундаментальная и прикладная химия"

Ситникова Валерия Александровна

Зав. каф. физической и коллоидной химии,
д-р хим. наук, профессор

О.В. Водянкина

подпись

« 16 » 06 20 23 г.

Руководитель ВКР

канд. физ.-мат. наук, доц. каф. физической и
коллоидной химии

Т.В. Меньщикова

подпись

« 16 » 06 20 23 г.

Научный консультант

канд. физ.-мат. наук, с.н.с

И.П. Русинов

подпись

« 16 » 06 20 23 г.

Автор работы

студент группы №081804

В.А. Ситникова

подпись

« 16 » 06 20 23 г.

Томск - 2023 г.

В соответствии с п 3.2 «Регламента размещения текстов выпускных квалификационных работ в электронной библиотеке Научной библиотеки ТГУ» выпускная квалификационная работа специалиста Ситниковой Валерии Александровны на тему «Электронная структура Fe_3SiTe_2 » размещается в репозитории с изъятием некоторых разделов в соответствии с решением правообладателя.

Руководитель ООП



В.В. Шелковников

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации.
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)
Химический факультет



УТВЕРЖДАЮ

Руководитель ООП

Канд. хим. наук, доцент

В.В. Шелковников

подпись

« 02 » _____ 20 23 г.

ЗАДАНИЕ

по выполнению выпускной квалификационной работы специалиста обучающемуся
Ситниковой Валерии Александровне

по направлению подготовки 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, специализация "Фундаментальная и прикладная химия"

1. Тема выпускной квалификационной работы специалиста

Электронная структура Fe_3SiTe_2 .

2. Срок сдачи обучающимся выполненной выпускной квалификационной работы:

а) на рецензирование – 09.06.2023

б) в деканат – 19.06.2023

в) в ГЭК – 19.06.2023

3. Исходные данные к работе:

Объект исследования – магнитные двумерные Ван-дер-Ваальсовы материалы.

Научная или прикладная проблема – использование соединения Fe_3SiTe_2 при создании устройств магнитно-резистивной памяти.

Цель исследования – исследование электронных и магнитных свойств кристаллической структуры Fe_3SiTe_2 .

Задачи:

1. Провести квантово-механические расчёты в рамках теории функционала плотности.

2. Получить и проанализировать плотности электронных состояний для Fe_3SiTe_2 .

3. Рассчитать электронные спектры Fe_3SiTe_2 и проанализировать вклады атомных орбиталей в полученные электронные уровни.

4. Проанализировать магнитные свойства структуры.

5. Сравнить плотности электронных состояний кристаллических структур Fe_3SiTe_2 и Fe_3GeTe_2 .

Методы исследования:

Расчёты проводить в рамках теории функционала плотности с использованием метода проекционных присоединенных волн, в программном пакете VASP. Использовать обобщенно градиентное приближение (GGA) с функционалом PBE для обменно-корреляционной энергии.

Ожидаемые результаты исследования: предположительно соединение Fe_3SiTe_2 является металлом с антиферромагнитными свойствами. Результатами работы будут являться описание магнитных и электронных свойств исследуемой структуры, а так же сравнительный анализ электронных состояний структуры Fe_3SiTe_2 и Fe_3GeTe_2 .

4. Этапы работы	Сроки
1. Отбор, анализ литературы, патентный поиск	06.02.2023 - 01.03.2023
2. Проведение расчётов и обсуждение результатов	02.03.2023 - 30.04.2023
3. Написание и оформление работы	01.05.2023 - 01.06.2023
4. Допуск к защите на кафедре	08.06.2023
5. Защита	22.06.2023

Руководитель выпускной квалификационной работы

Канд. физ.-мат. наук, доц. КФиКХ

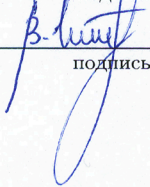
 / Т.В. Меньщикова
подпись

Научный консультант

Канд. физ.-мат. наук, с.н.с

 / И.П. Русинов
подпись

Задание принял к исполнению 06.02.2023

 / В.А. Ситникова
подпись

АННОТАЦИЯ

Выпускная квалифицированная работа включает 62 страницы, 13 рисунков, 9 таблиц, 73 источника

Объект исследования: магнитные двумерные Ван-дер-Ваальсовы материалы.

Предмет исследования: электронная структура и магнитные свойства Ван-дер-Ваальсового соединения Fe_3SiTe_2 .

Цель работы: исследование электронных и магнитных свойств кристаллической структуры Fe_3SiTe_2 .

В программе VASP с использованием методов *ab initio* и PAW (метод проекционных волн) рассчитаны точные параметры кристаллической структуры Fe_3SiTe_2 . В рамках теории функционала плотности исследованы электронные и магнитные свойства Ван-дер-Ваальсового соединения, рассчитаны электронные спектры и плотности электронных состояний. По графикам плотности электронных состояний проанализировано влияние дефектов на электронную структуру Fe_3SiTe_2 .

Установлено, что элементарная ячейка Fe_3SiTe_2 состоит из 12 атомов, для структуры характерны четыре неэквивалентные позиции, две из которых принадлежат атомам Fe_1 и Fe_2 . Появление вакансий в позиции Fe_2 приводит к перераспределению магнитных моментов и изменению магнитного состояния Fe_3SiTe_2 на ферромагнитное. По анализу электронных спектров установлена металлическая природа структуры Fe_3SiTe_2 . Физико-химические свойства исследуемой структуры определяются d-состояниями атома Fe_1 .

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
1. Литературный обзор	5
1.1 Свойства и применение Ван-дер-Ваальсовых структур и гетероструктур на их основе	5
1.2 Синтез Ван-дер-Ваальсовых соединений и гетероструктур	7
1.3 Исследование кристаллической структуры Fe_3GeTe_2	8
2. Описание методов исследования	10
2.1 Основные уравнение квантовой механики	11
2.2 Описание теории функционала электронной плотности	13
2.3 LDA и GGA приближения	16
2.4 DFT+U - подход	17
2.5 Теория псевдопотенциала	19
2.6 Метод PAW	20
2.7 Описание программного пакета VASP	20
2.8 Общая схема проведения первопринципных расчётов	22
3. Элементарная ячейка. Исследование магнитных свойств Fe_3SiTe_2	25
3.1 Параметры кристаллической структуры Fe_3SiTe_2	26
3.2 Исследование магнитных свойств Fe_3SiTe_2	28
4. Исследование электронных свойств системы Fe_3SiTe_2	35
4.1 Анализ графиков плотности электронных состояний	35
4.2 Спектры электронных состояний	42
4.3 Сравнение электронных свойств Fe_3SiTe_2 и Fe_3GeTe_2	43
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	51
ЛИТЕРАТУРА	52
ПРИЛОЖЕНИЕ А	60
ПРИЛОЖЕНИЕ Б	62

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе представленной работы были выполнены все поставленные задачи. Проанализировав полученные результаты теоретического исследования электронных и магнитных свойств структуры Fe_3SiTe_2 , были сделаны следующие выводы:

1. Идеальная структура Fe_3SiTe_2 характеризуется антиферромагнитным порядком. При наличии дефектов, связанных с вакансиями в позиции атома Fe_2 , соединение становится ферромагнитным.
2. Физические и физико-химические свойства Fe_3SiTe_2 преимущественно определяются вкладами от состояний орбиталей $d_{x^2-y^2}$ и d_{xy} атома Fe_1 .
3. Для Fe_3SiTe_2 характерна проводимость преимущественно внутри плоскости, которая реализуется электронами со спином "вниз". Спиновая поляризация на уровне Ферми равна 80 %.
4. Соединение Fe_3SiTe_2 является металлом.
5. Электронный спектр Fe_3SiTe_2 представляет собой n - допированный вариант спектра родственного соединения Fe_3GeTe_2 . Существует возможность управления положением уровня Ферми, проводимостью и транспортными свойствами при перемешивании двух сортов атомов Si и Ge.

Перспективой дальнейшей работы является экспериментальное исследование Ван-дер-Ваальсового соединения Fe_3SiTe_2 , синтез гетероструктур на его основе методом молекулярно-лучевой эпитаксии и исследование их свойств.

ЛИТЕРАТУРА

1. Origin of ferromagnetism and the effect of doping on Fe_3GeTe_2 / Seung Woo Jang, Hongkee Yoon, Min Yong Jeong [et al.] // *Nanoscale*. - 2020. - Vol. 12, is. 25. - P. 13501-13506.
2. Patent № 112713240A China, H01L 43/12 (2006.01). Preparation method of anti-symmetric magneto-resistance device based on two-dimensional material : № 202110125771.3A : application 29.01.2021 : publication 27.04.2021 / Пы Ен , Цао Чжиин , Ню Вэй ; applicant Nanjing University of Posts and Telecommunications. - 15 p. : fig.
3. Patent № 20200138030A South Korea, H01L 43/10 (2006.01). Magnetic memory device and operating method thereof : № 1020190133404 : application 25.10.2019 : publication 09.12.2020 / Чжан Кайсуань, Ю Чжин ; applicant Seoul National University Academic Cooperation Group. - 30 p. : fig.
4. Patent № 111276536B China, H01L 29/66 (2006.01). Spin field effect transistor : № 202010083615.0A : application 07.02.2020 : publication 30.11.2021 / Ван Кайю, Дэн Юнчэн, Чжу Вэнькай, Ху Се, Янь Фагуан ; applicant Institute of Semiconductors of CAS. - 7 p. : fig.
5. Alferov Z. Double heterostructure lasers: early days and future perspectives // *IEEE Journal On Selected Topics In Quantum Electronics*. - 2000. - Vol. 6, is. 6. - P. 832 – 840.
6. Recent progress in quantum cascade lasers and applications / C. Gmachl, F. Capasso, D. Sivco, A. Cho // *Reports on Progress in Physics*. - 2001. - Vol. 64, is. 11. - P. 1533-1601.
7. Geim A. K. Van der Waals heterostructures / A. K. Geim, I. V. Grigorieva // *Perspective*. - 2013. - Vol. 499. - P. 419-425.
8. Tunable metal–insulator transition in double-layer graphene heterostructures / L. A. Ponomarenko, A. K. Geim, A. A. Zhukov [et al.] // *Nature Physics*. - 2011. - Vol. 7. - P. 958-961.

9. Field-effect tunneling transistor based on vertical graphene heterostructures / L. Britnell, R. V. Gorbachev, R. Jalil [et al.] // Science. - 2012. - Vol. 335. - P. 947–950.
10. Cross-sectional imaging of individual layers and buried interfaces of graphene-based heterostructures and superlattices / S. J. Haigh, A. Gholinia, R. Jalil [et al.] // Nature Materials. - 2012. - Vol. 11. - P. 764–767.
11. Vertical field-effect transistor based on graphene–WS₂ heterostructures for flexible and transparent electronics / T. Georgio, R. Jalil, B. D. Belle [et al.] // Nature Nanotechnology. - 2013. - Vol. 8. - P. 100–103.
12. Antisymmetric magnetoresistance in van der Waals Fe₃GeTe₂/graphite/Fe₃GeTe₂ trilayer heterostructures / Sultan Albarakati, Cheng Tan, Zhong-Jia Chen [et al.] // Science Advances. - 2019. Vol. 5, is.7.
13. Фетисов Ю. К. Спинтроника: физические основы и устройства / Ю. К. Фетисов, А. С. Сигов // РЭНСИТ. - 2018. - Т. 10, № 3. - С. 343–356.
14. Giant tunneling magnetoresistance in spin-filter van der Waals heterostructures / T. Song, X. Cai, M. W.-Y. Tu [et al.] // Science 360. - 2018. - P. 1214–1218.
15. Very large tunneling magnetoresistance in layered magnetic semiconductor CrI₃ / Z. Wang, I. Gutiérrez-Lezama, N. Ubrig [et al.] // Nature Communications. - 2018. - Vol. 9. - P. 2516.
16. Jiang S. Electric-field switching of two-dimensional van der Waals magnets / S. Jiang, J. Shan, K. F. Mak // Nature Materials. - 2018. - Vol. 17. - P. 406–410.
17. Electric-field control of magnetism in a few-layered van der Waals ferromagnetic semiconductor / Z. Wang, T. Zhang, M. Ding [et al.] // Nature Nanotechnology. - 2018. - Vol. 13. - P. 554–559.
18. Magnon-assisted tunneling in van der Waals heterostructures based on CrBr₃ / D. Ghazaryan, M. T. Greenaway, Z. Wang [et al.] // Nature Electronics. - 2018. - Vol. 1. - P. 344–349.

19. Ferroelectric field-effect transistors based on MoS₂ and CuInP₂S₆ two-dimensional van der Waals heterostructure / M. Si, P.-Y. Liao, G. Qiu [et al.] // ACS Nano. - 2018. - Vol. 12. - P. 6700–6705.
20. Electrical control of 2D magnetism in bilayer CrI₃ / B. Huang, G. Clark, D. R. Klein [et al.] // Nature Nanotechnology. - 2018. - Vol. 13. - P. 544–548.
21. Probing magnetism in 2D van der Waals crystalline insulators via electron tunneling / D. R. Klein, D. MacNeill, J. L. Lado [et al.] // Science. - 2018. - Vol. 360. - P. 1218-1222.
22. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange / G. Binasch, P. Grunberg, F. Saurenbach, W. Zinn // Physical Review B - 1989. - Vol. 39. - P. 4828-4830.
23. Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices / M.N. Baibich, J.M. Broto, A. Fert [et al.] // Physical Review Letters. - 1988. - Vol. 61. - P. 2472.
24. Tunneling spin valves based on Fe₃GeTe₂/hBN/Fe₃GeTe₂ van der Waals heterostructures / Z. Wang, D. Sapkota, T. Taniguchi [et al.] // Nano Letters. - 2018. - Vol. 18. - P. 4303–4308.
25. Ballistic magnetoresistance in different nanocontact configurations: a basis for future magnetoresistance sensors / N. Garcia, M. Munoz, V. V. Osipov [et al.] // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. - 2002. - Vol. 240. - P. 92-99.
26. Верченко В. Ю. Синтез, кристаллическая и электронная структура и физические свойства полярных интерметаллидов на основе железа : дис. ... канд. хим. наук / В. Ю. Верченко. - Москва, 2016. - 133 с.
27. Любимов Д. В. Влияние вибраций на гидродинамику расплава при выращивании кристаллов бесконтактным методом Бриджмена / Д. В. Любимов, Т. П. Любимова, А. О. Иванцов // Вычислительная механика сплошных сред. - 2011. - Т. 4, № 4. - С. 52-62.

28. Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры / Л. Эсаки, Б. А. Джойс, Р. Хекингботтом [и др.] ; под ред. Л. Ченга, К. Плога ; пер. с англ. под ред. Ж. И. Алферова, Ю. В. Шмарцева. - Москва : Мир, 1989. - 582 с.
29. Chemical Vapor Deposition Growth and Applications of Two-Dimensional Materials and Their Heterostructures / Cai Zhengyang, Liu Bilu, Zou Xiaolong, Cheng Hui-Ming // Chemical Reviews. - 2018. - № 13. - P. 6091-6133.
30. Garcia N. Magnetoresistance in excess of 200 % in Ballistic Ni Nanocontacts at Room Temperature and 100 Oe / N. Garcia, M. Munoz, Y.-W. Zhao // Physical Review Letters. - 1999. - Vol. 82. - P. 2923-2926.
31. Fe₃GeTe₂ and Ni₃GeTe₂ – Two New Layered Transition-Metal Compounds: Crystal Structures, HRTEM Investigations, and Magnetic and Electrical Properties / H. J. Deiseroth, K. Aleksandrov, C. Reiner [et al.] // European Journal of Inorganic Chemistry. - 2006. - Vol. 8. - P. 1561-1567.
32. Houlong L.Z. Strong anisotropy and magnetostriction in the two-dimensional Stoner ferromagnet Fe₃GeTe₂ / L. Z. Houlong, P. R. C. Kent, R. G. Hennig // Physical Review B. - 2016. - Vol. 93. - P. 134447.
33. Jieyu Yi. Competing antiferromagnetism in a quasi-2D itinerant ferromagnet: Fe₃GeTe₂ / Yi Jieyu, Z. Houlong, Z. Qiang // 2D Materials. - 2017. - Vol. 4. - P. 011005.
34. Stahl J. The van der Waals Ferromagnets Fe_{5δ}GeTe₂ and Fe_{5δ-x}Ni_xGeTe₂ Crystal Structure, Stacking Faults, and Magnetic Properties / J. Stahl, E. Shlaen, D. Johrendt // Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie. - 2018. - Vol. 644, is. 24 - P. 1923-1929.
35. Anisotropic anomalous Hall effect in triangular itinerant ferromagnetic Fe₃GeTe₂ / Y. Wang, C. Xian, J. Wang [et al.] // Physical Review B. - 2017. - Vol. 96. - P. 134428.
36. Layer-dependent ferromagnetism in a van der Waals crystal down to the monolayer limit / B. Huang, G. Clark, E. Navarro-Moratalla [et al.] // Nature. - 2017. - Vol. 546. - P. 270.

37. Ferromagnetic Order, Strong Phanerocrystalline Anisotropy, and Magnetometric effect in the layered Telluride $\text{Fe}_{3-\delta}\text{GeTe}_2$ / V. Y. Verchenko, A. A. Tsirlin, A. V. Sobolev [et al.] // Inorganic Chemistry - 2015. - Vol. 54. - P. 8598.
38. Magnetic structure and phase stability of the van der Waals bonded ferromagnet $\text{Fe}_{3x}\text{GeTe}_2$ / A. F. May, S. Calder, C. Cantoni [et al.] // Physical Review B. - 2016. - Vol. 93. - P. 014411.
39. New Fe-based layered telluride $\text{Fe}_{3-\delta}\text{As}_{1-y}\text{Te}_2$: synthesis, crystal structure and physical properties / V. Y. Verchenko, S. S. Sokolov, A. A. Tsirlin [et al.] // Dalton Transactions. - 2016. - Vol. 45. - P. 16938.
40. Hohenberg P. Inhomogeneous electron gas / P. Hohenberg, W. Kohn // Physical Review B. - 1964. - Vol. 136, № 3B. - P. 864-871.
41. Kohn W. Self-consistent equations including exchange and correlation effects / W. Kohn, L.J.Sham // Physical Review B. - 1965. - Vol. 140, No 4A. - P. 33-38.
42. Jones. R. O. Density functional theory: Its origins, rise to prominence, and future // Reviews of modern physics. — 2015. — Vol. 87, No. 3. — P. 897-923.
43. Абгарян К. К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения: монография / К. К. Абгарян. - Москва : МАКС Пресс, 2017. - 284 с.
44. Fermi E. Un metodo statistico par la determinzione di alcune Proprieta dell atome // Modeling and Numerical Simulation of Material Science - 1927. - Vol. 6. - P. 602-607.
45. Hartree D. R. The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part II. Some Results and Discussion // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. – 1928. – Vol. 24, is. 1. – P. 111–132. doi:10.1017/s0305004100011920
46. Fock V. A. An approximate method for solving the quantum many-body problem // Zeitschrift fur Physik. – 1930. – Vol. 61, is. 1-2. – P. 126–148.

47. Kohn W. Electronic structure of matter (Nobel lecture) // Reviews of Modern Physics. - 1999. - Vol. 71 - P. 1253
48. Ашкрофт Н. Физика твёрдого тела: пер. с англ. / Н. Ашкрофт, Н. Мермин ; под ред. М. И. Каганова. - М. : Мир, 1979. - 399 с.
49. Anisimov V. First-principles calculations of the electronic structure and spectra of strongly correlated systems: the LDA+U method / V. Anisimov, F. Aryasetiawan, A. Lichtenstein // Journal of Physics: Condensed Matter. - 1997. - Vol. 9, is. 4. - P. 767–808.
50. Дзедзисашвили Д. М. Низкотемпературные свойства и куперовская неустойчивость сильно коррелированных систем : автореф. дис. ... д-ра физик.-матем. наук / Д. М. Дзедзисашвили. - Красноярск, 2010. - 49 с.
51. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands // The Royal Society. - 1963. - Vol. 276. - P. 238–257.
52. Москвин А. С. Приближают ли нас методы DFT, L(S)DA, LDA+U, LDA+DMFT к правильному описанию оптического отклика для сильно-коррелированных систем? // Оптика и спектроскопия. XVI международный феофиловский симпозиум. - 2016. - Т. 121, № 4. - С. 515-526.
53. Романова К. А. Влияние параметра Хаббарда на моделирование селенидов и сульфидов кадмия и цинка методом теории функционала плотности / К. А. Романова, А. В. Кремлева, Ю. Г. Галяметдинов // Вестник технологического университета. - 2019. - Т. 22, № 3. - С. 30-33.
54. Cococcioni M. Linear response approach to the calculation of the effective interaction parameters in the LDA+U method / M. Cococcioni, S. Gironcoli // Physical Review B. - 2005. - Vol. 71. - P. 035105.
55. Liechtenstein I. Density-functional theory and strong interactions: Orbital ordering in Mott-Hubbard insulators / I. Liechtenstein, V. Anisimov, J. Zaanen // Physical Review B. - 1995. - Vol. 52. - P. 5467.

56. Electron-energy-loss spectra and the structural stability of nickel oxide: An LSDA+U study / S. Dudarev, G. Botton, S. Savrasov [et al.] // Physical Review B. - 1998. - Vol. 57. - P. 1505–1509.
57. Митрохин Ю. С. Применение методов ab initio псевдопотенциала для расчёта физико-механических свойств твёрдых тел / Ю. С. Митрохин, В. Е. Шудегов // Известия института математики и информатики Удмуртского государственного университета - 2006. - №3 - с. 103-104.
58. Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients / M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan [et al.] // Reviews of Modern Physics - 1992.- Vol. 64, is. 4. - P. 1045.
59. Хейне В. Теория псевдопотенциала / В. Хейне, М. Коэн, Д. Уэйр. -М. : Мир, 1973. - 557 с.
60. Клековкина В. В. Ab initio расчёты структурных и электронных свойств кристаллических твердых тел в приближении функционала плотности и псевдопотенциала в импульсном пространстве: детали и примеры / В. В. Клековкина, Р. М. Аминова // Ученые записки Казанского государственного университета. Серия: физико-математические науки - 2009. - Т. 151, №3 - с. 5-30.
61. Chelikowsky J. R. The Pseudopotential-Density Functional Method (PDFM) Applied to Nanostructures // Journal of Physics D Applied Physics. - 2000. - Vol. 33. - P. R33.
62. Feynman R. P. Forces in molecules // Physical Review B. - 1939. - Vol. 56, is. 4 - P. 340.
63. Tuning magnetic properties in quasi-two-dimensional ferromagnetic $\text{Fe}_{3y}\text{Ge}_{1x}\text{As}_x\text{Te}_2$ / D. Yuan, S. Jin, N. Liu [et al.] // Materials Research Express. - 2017. - Vol. 4. - P. 036103.
64. Ming-Chun J. Large magneto-optical effect and magnetic anisotropy energy in two-dimensional ferromagnetic metal Fe_3GeTe_2 / J. Ming-Chun, G. Guang-

Yu // Department of Physics and Center for Theoretical Physics, National Taiwan University, Taipei 10617. - Taiwa.

65. Tataru G. Domain Wall Scattering Explains 300 % Ballistic Magnetoconductance of Nanocontacts / G. Tataru, Y. - W. Zhao, M. Munoz, N. Garcia // Physical Review Letters. - 1999. - Vol. 83. - P. 2030-2033.
66. Garcia N. Ballistic magnetoresistance in transition-metal nanocontacts: The case of iron / N. Garcia, M. Munoz, Y.-W. Zhao // Applied Physics Letters . - 2000. - Vol. 76. - P. 2586-2587.
67. Magnetoresistance of nanocontacts with constrained magnetic domain walls / J.-E. Wegrowe, T. Wade, X. Hoffer [et al.] // Physical Review B. - 2003. - Vol. 67. - P. 104418-1 - 104418-7.
68. Jubert P.-O. Magnetic domain walls in constrained geometries / P.-O. Jubert, R. Allenspach, A. Bischof // Physical Review B. - 2004. - Vol. 69. - P. 220410-1 - 220410-4.
69. Ballistic magnetoresistance in nickel single-atom conductors without magnetostriction / M. R. Sullivan, D. A. Boehm, D. A. Ateya [et al.] // Physical Review B. - 2005. - Vol. 71. - P. 024412-1 - 024412-8.
70. The quantum spin-valve in cobalt atomic point contacts / H. D. Chopra, M. R. Sullivan, J. N. Armstrong, S.Z. Hua // Nature Mater. - 2005. - Vol. 4. - P. 832-837.
71. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов / В. Г. Цирельсон. - Москва : Лаборатория знаний, 2021. - 522 с.
72. Сатанин А. М. Введение в теорию функционала плотности. Учебно-методическое пособие. / А. М. Сатанин. - Нижний Новгород, 2009 - 64 с.
73. Борисенко В. Е. Нанoeлектроника: теория и практика : учебник / В. Е. Борисенко, А. И. Воробьева, А. Л. Данилюк, Е. А. Уткина. - 2-е изд., перераб. и доп. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013 - 366 с.

СПРАВКА

Томский Государственный Университет

о результатах проверки текстового документа
на наличие заимствований

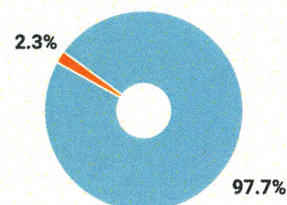
ПРОВЕРКА ВЫПОЛНЕНА В СИСТЕМЕ АНТИПЛАГИАТ.ВУЗ

Автор работы: Ситникова Валерия Александровна
Самоцитирование
рассчитано для: Ситникова Валерия Александровна
Название работы: ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА Fe₃SiTe₂_Ситникова В.А
Тип работы: Выпускная квалификационная работа
Подразделение: Кафедра физической и коллоидной химии

РЕЗУЛЬТАТЫ

СОВПАДЕНИЯ		2.3%
ОРИГИНАЛЬНОСТЬ		97.7%
ЦИТИРОВАНИЯ		0%
САМОЦИТИРОВАНИЯ		0%

ДАТА ПОСЛЕДНЕЙ ПРОВЕРКИ: 16.06.2023



Структура документа: Проверенные разделы: основная часть с.2-52

Модули поиска: ИПС Адилет; Библиография; Сводная коллекция ЭБС; Интернет Плюс*; Сводная коллекция РГБ; Цитирование; Переводные заимствования (RuEn); Переводные заимствования по eLIBRARY.RU (EnRu); Переводные заимствования по коллекции Гарант: аналитика; Переводные заимствования по коллекции Интернет в английском сегменте; Переводные заимствования по Интернету (EnRu); Переводные заимствования по коллекции Интернет в русском сегменте; Переводные заимствования издательства Wiley ; eLIBRARY.RU; СПС ГАРАНТ: аналитика; СПС ГАРАНТ: нормативно-правовая документация; Медицина; Диссертации НББ; Коллекция НБУ; Перефразирования по eLIBRARY.RU; Перефразирования по СПС ГАРАНТ: аналитика; Перефразирования по Интернету; Перефразирования по Интернету (EN); Перефразированные заимствования по коллекции Интернет в английском сегменте; Перефразированные заимствования по коллекции Интернет в русском сегменте; Перефразирования по коллекции

Работу проверил: Дорофеева Наталия Валерьевна

ФИО проверяющего

Дата подписи:

16.06.2023



Подпись проверяющего



Чтобы убедиться
в подлинности справки, используйте QR-код,
который содержит ссылку на отчет.

Ответ на вопрос, является ли обнаруженное заимствование
корректным, система оставляет на усмотрение проверяющего.
Предоставленная информация не подлежит использованию
в коммерческих целях.