

SECTION: PHYSICS AND ASTRONOMY

ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ У СКЛАДНИХ ОКСИДНИХ СТРУКТУРАХ

Мартинюк Володимир Валерійович

кандидат технічних наук, доцент

Кафедра загальної фізики

Гевко Богдан Васильович

здобувач вищої освіти бакалаврського рівня

Кафедра обчислювальної техніки

Вінницький національний технічний університет

Україна

Складні оксиди, такі як перовськіти, шпінелі та гексаферити, привертають значну увагу дослідників завдяки надзвичайно широкому спектру їхніх функціональних властивостей. Вони поєднують у собі унікальні електронні, магнітні, структурні та оптичні характеристики, що робить їх перспективними для застосування в сучасній електроніці, спінтроніці, сенсоріці та елементах квантових технологій. Особливої важливості набуває вивчення фазових переходів у таких матеріалах, оскільки саме вони визначають зміну властивостей при впливі зовнішніх та внутрішніх чинників.

Під фазовими переходами у контексті корельованих електронних систем розуміють зміни у стані матеріалу, пов'язані зі спільною взаємодією електронів, спінів, ґратки та орбіталей. Часто такі переходи виникають унаслідок сильних електронних кореляцій або складної конкуренції між різними типами впорядкування.

Метою цієї роботи є розкриття фізичної природи, механізмів та можливостей керування фазовими переходами у складних оксидних структурах, а також аналіз їх значення для перспективних функціональних застосувань.

Одним із найвідоміших прикладів фазового переходу у корельованих оксидах є метал-ізоляторний перехід у ванадієвмісних сполуках, таких як VO₂ та V₂O₃. Сполука VO₂ зазнає різкого переходу поблизу 340 К (рис. 1), що супроводжується зміною електропровідності на кілька порядків [1]. Важливо, що електронний перехід тісно пов'язаний зі структурною модифікацією ґратки, що підкреслює взаємодію між електронними й фононними ступенями свободи.

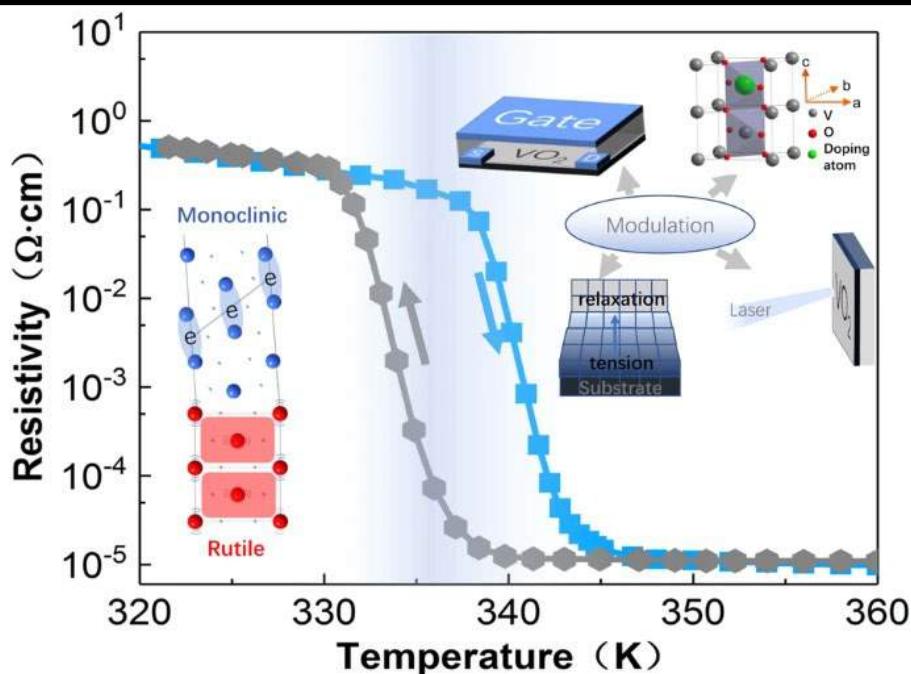


Рис. 1: Фазовий перехід VO₂ з моноклінної фази до фази рутилу.

У манганітах спостерігаються магнітні переходи від антиферомагнітного до феромагнітного стану, що виникають завдяки механізму подвійного обміну між іонами Mn³⁺ та Mn⁴⁺ [2]. Цей перехід часто супроводжується ефектом колосального магніторезистору, що є характерною ознакою взаємодії між магнітним упорядкуванням і транспортними властивостями.

Сегнетоелектричні та мультифероїчні переходи, притаманні оксидам BiFeO₃ та YMnO₃, демонструють одночасне існування електричної та магнітної впорядкованості [3]. Взаємодія між поляризацією та спіновим станом відкриває нові можливості для керування доменними структурами електричним або магнітним полем.

У низці оксидів важливими є структурні переходи, зумовлені зміною симетрії кристалічної ґратки або явищами типу спотворень Янга-Теллера, що впливають на орбітальну виродженість та електронні стани. Крім того, у деяких матеріалах спостерігаються орбітальні та зарядові впорядкування, що суттєво впливають на фізичні властивості та можуть призводити до нових типів фазових діаграм [4].

Загалом, фазові переходи у складних оксидах визначаються взаємодією електронних кореляцій, спин-орбітальної взаємодії та електрон-фононного зв'язку, що робить ці системи надзвичайно складними, проте цікавими для фундаментальних досліджень.

Одним із ключових внутрішніх параметрів, що визначає фазові переходи, є хімічний склад матеріалу. Легування змінює електронну концентрацію та може як стабілізувати певну фазу, так і зумовити появу нових станів, наприклад, у манганітах зміна концентрації іонів стронцію (Sr) здатна переводити систему між металевим, напівпровідниковим та магнітно впорядкованим режимами [2]. Дефекти та оксигенові вакансії також відіграють суттєву роль, оскільки вони

впливають на локальну симетрію, електронну локалізацію та транспортні параметри матеріалу.

Зовнішні впливи, такі як температура та тиск, традиційно використовуються для дослідження фазових діаграм. Можливість керування оксидними системами електричним або магнітним полем відкриває шлях до створення новітніх перемикальних пристроїв [1]. Разом з тим, оптичне збудження, зокрема ультрашвидкі лазерні імпульси, здатні індукувати фазові переходи на фемтосекундних масштабах, що дозволяє досліджувати кінетику неврівноважених станів.

Наноструктурування істотно змінює фазові властивості. Епітаксіальні плівки складних оксидів демонструють напруження, викликані підкладкою, що може стабілізувати фази, відсутні у масивних кристалах [5]. Гетероструктури, такі як $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$, показують формування двовимірного електронного газу на межі розділу, а штучні надгратки дозволяють інженерно керувати взаємодією шарів і виникненням нових функціональних ефектів.

Розуміння фазових переходів у складних оксидах потребує широкого спектра експериментальних методів. Рентгенівська та нейтронна дифракція дозволяють визначати структурні зміни та простежувати еволюцію симетрії ґратки під час переходів [4]. Методи скануючої тунельної та атомно-силової мікроскопії дають змогу візуалізувати доменні структури та наномасштабні неоднорідності.

Спектроскопічні методи, зокрема Раман-спектроскопія, XPS та ARPES, застосовуються для аналізу змін у локальних електронних та фононних станах. Електротранспортні та магнітні вимірювання допомагають фіксувати критичні точки переходів та вивчати поведінку матеріалу у різних фазових областях.

Теоретичні методи, такі як DFT+U, DMFT та модель Габбарда, дозволяють досліджувати роль електронних кореляцій та будувати фазові діаграми, які узгоджуються з експериментами. Ці підходи є критично необхідними для опису матеріалів зі сильно взаємодіючими електронами.

Однією з найбільш досліджених систем є VO_2 , у якому метал-ізоляторний перехід супроводжується структурною перебудовою. Виявлено, що зміна симетрії ґратки відіграє таку ж важливу роль, як і електронні кореляції, що робить VO_2 зручним об'єктом для комбінованих структурно-електронних досліджень [1].

У манганітах $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ спостерігається колосальний магнітний опір, що пояснюється взаємодією між подвійним обміном та спіновими флуктуаціями. Це відкриває можливість керування магнітними станами за допомогою зовнішніх полів і створення новітніх магніторезистивних сенсорів [2].

У мультифероїку BiFeO_3 дослідження показали складну доменну структуру, де електричні та магнітні домени можуть бути керовані незалежно. Завдяки цьому такі матеріали розглядаються як основа для нових типів пам'яті, де інформація зберігається у двох каналах – електричному та магнітному [3].

Складні оксиди з керованими фазовими переходами є надзвичайно перспективними для розробки новітніх електронних пристроїв. На основі

матеріалів з різкими метал-ізоляторними переходами створюються мемристори та елементи нейроморфних обчислювальних систем. Перехід VO₂ розглядається як основа енергоефективних оптичних та електричних перемикачів.

Магнітні та мультифероїчні оксиди можуть стати основою нових пристроїв спінтроники, де обробка інформації здійснюється спіном, а не зарядом. Такі матеріали також перспективні для сенсорів та квантових технологій. Основними викликами залишаються стабільність фаз, масштабування технологічних процесів та сумісність оксидних матеріалів із кремнієвою платформою.

Отже, фазові переходи у складних оксидних структурах є результатом взаємодії багатьох ступенів свободи, включно з електронними, магнітними, орбітальними та структурними факторами. Їх детальне вивчення має ключове значення як для фундаментальної науки, так і для розвитку сучасних технологій, що ґрунтуються на функціональних властивостях корельованих матеріалів. Глибоке розуміння механізмів виникнення фазових переходів відкриває можливості для цілеспрямованого керування станами матеріалу та створення інноваційних пристроїв нового покоління. Подальші дослідження, зокрема в напрямках ультрашвидкої динаміки, двовимірних оксидів та систем зі штучно інженерованими інтерфейсами, сприятимуть формуванню ще ширшої бази для практичних застосувань складних оксидних структур.

Список використаних джерел

1. M. Nakano та ін. Metal–insulator transition in VO₂: Mechanisms and applications, *Nature*, 2012. URL: <https://www.nature.com/articles/nature11296> (дата звернення: 17.12.2025)
2. Zhang R., Fu Q.S., Yin C.Y. та ін. Understanding of metal-insulator transition in VO₂ based on experimental and theoretical investigations of magnetic features. *Nature*, 2018. URL: <https://www.nature.com/articles/s41598-018-35490-5> nature11296 (дата звернення: 17.12.2025)
3. Huang C., Chen L. Effects of Interfaces on the Structure and Novel Physical Properties in Epitaxial Multiferroic BiFeO₃ Ultrathin Films. *Materials*, 2014. URL: <https://doi.org/10.3390/ma7075403> (дата звернення: 17.12.2025)
4. Kohji T., Katsuhiko K., Hiroko Y., та ін. Hybridization of Wide-Angle X-ray and Neutron Diffraction Techniques in the Crystal Structure Analyses of Synthetic Polymers. *MDPI*, 2023. URL: <https://www.mdpi.com/2073-4360/15/2/465> (дата звернення: 19.12.2025)
5. Zafar S., A.K. Pandey, Arun K. T., та ін. Nano-enhanced phase change materials: Fundamentals and applications. *ScienceDirect* 2024. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360128524000200> (дата звернення: 17.12.2025)