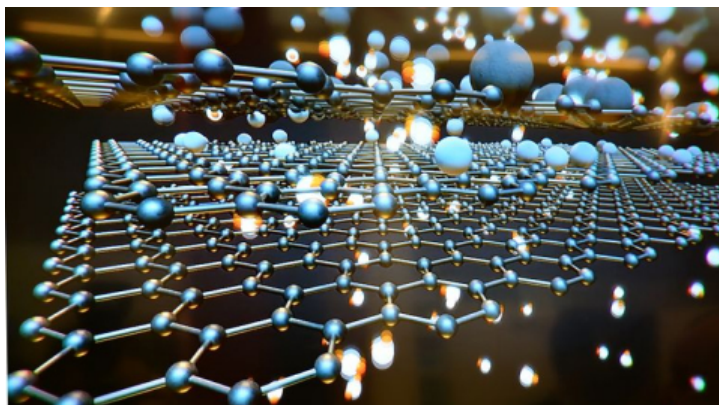


Контролируемый дефект: учёные рассказали о появлении магнетизма в двумерных немагнитных материалах

Учёные Сибирского федерального университета [приняли участие](#) в международном исследовании, посвящённом влиянию дефектов, возникающих в диселениде палладия (PdSe_2), на свойства этого материала.



Учёные Сибирского федерального университета приняли участие в международном исследовании, посвящённом влиянию дефектов, возникающих в диселениде палладия (PdSe_2), на свойства этого материала. Получена характеристика электронных и магнитных свойств материала, вызванных дефектами. Отмечается, что контролируемое введение подобных дефектов поможет адаптировать электромагнитные свойства новых материалов и расширить семейство двумерных магнитов.

«Мы обнаружили, что некоторые дефекты в структуре PdSe_2 могут индуцировать локальный магнетизм. Также была показана склонность материала к образованию отрицательно заряженных дефектов, что совпадает с результатами известных экспериментов. Кроме того, удалось показать, какие точечные дефекты более стабильны и какие менее, а также рассчитать энергию, необходимую для контролируемого создания точечных дефектов», — рассказал старший научный сотрудник международного научно-исследовательского центра спектроскопии и квантовой химии СФУ **Артём Куклин**. 

Слоистые дихалькогениды переходных металлов представляют собой новый класс материалов для проведения фундаментальных исследований и разработки перспективных оптоэлектронных устройств. Производительность устройств часто зависит от дефектов, образующихся при синтезе материала, из которого эти устройства изготовлены. Диселенид палладия — это материал, свойства которого до сих пор не изучены в полном объёме. Поэтому было важно исследовать, как дефекты влияют на его электронные свойства. Ранее уже было показано, что материал демонстрирует высокие показатели конвертации солнечной энергии в электрическую и может быть использован, к примеру, в многослойных солнечных батареях.

«Ещё одним результатом работы стали расчёты того, как, скорее всего, выглядят эти дефекты — мы сделали своего рода „руководство“ для экспериментаторов, смоделировав и подготовив описание изображений. Некоторые из них хорошо согласуются с известными экспериментальными изображениями, другие типы дефектов могут быть вскоре получены и охарактеризованы при помощи наших изображений. Мы полагаем, что в целом диселенид палладия — очень удачный модельный образец для изучения фундаментальной природы дефектов в двумерных материалах и способов управлять ими», — заключил **Артём Куклин**.

© Сибирский федеральный университет. Редакция сайта: +7 (391) 246-98-60, info@sfu-kras.ru.

Адрес страницы: <https://news.sfu-kras.ru/node/25756>