

Научная статья

2.6.1. Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов (технические науки)

УДК 544.03

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.01.013

МАГНЕТИЗМ БЕРИЛЛИЕВОЙ КЕРАМИКИ СО СТРУКТУРОЙ ПЕРОВСКИТА BeTiO_3

Александр Викторович Павлов¹, Людмила Иосифовна Квеглис^{2†},
Алексей Владимирович Джес³, Дмитрий Николаевич Сапрыкин⁴,
Ринат Талгатович Насибуллин⁵, Дмитрий Анатольевич Великанов⁶,
Иван Васильевич Немцев⁷, Павел Олегович Шалаев⁸

^{1, 2, 6, 7, 8} Сибирский федеральный университет, пр. Свободный, 79, 660041, Красноярск, Россия

^{1, 2, 4} Восточно-Казахстанский университет им. С. Аманжолова, ул. 30-ой Гвардейской дивизии, 34, 070002, Усть-Каменогорск, Республика Казахстан

³ Восточно-Казахстанский технический университет им. Д. Серикбаева, ул. Протозанова, 69, 070004, Усть-Каменогорск, Республика Казахстан

⁵ Национальный исследовательский Томский государственный университет, пр. Ленина, 36, 634050, Томск, Россия

^{6, 7} Институт физики им. Л.В. Киренского, Академгородок, 50, стр. 38, 660036, Красноярск, Россия

¹ alexandr_pavlov_1988@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3514-9476>

² kveglis@list.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-6850-354X>

³ alexdzhes@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-8172-8073>

⁴ saprykin-dmitry@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3796-057X>

⁵ nasibullin.rt@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2218-1944>

⁶ dponal@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-2662-0470>

⁷ ivan_nemtsev@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4222-3099>

⁸ pshalaev@sfu-kras.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0552-9715>

Аннотация. Известно, что введение в BeO -керамику добавки TiO_2 после термообработки в восстановительной атмосфере сопровождается значительным увеличением электропроводности и способностью поглощать электромагнитное излучение в широком диапазоне частот. До сих пор механизм этого влияния до конца не установлен. С использованием методов Лоренцевой электронной микроскопии в сканирующем электронном микроскопе, а также вибрационного магнитометра, установлено проявление ферромагнетизма. Такая особенность бериллиевой керамики способствует поглощению электромагнитной энергии в объемных образцах, содержащих наночастицы TiO_2 . Установлено, что присутствие наночастиц способствует формированию структуры перовскита в зонах спекания $\text{BeO} + \text{TiO}_2$. В структуре перовскита возможна поляризация молекул за счет формирования поляронов, что приводит к деформации решетки и смещению атомов. В результате такого смещения происходит изменение ближнего порядка в структуре перовскита и к образованию икосаэдрической фазы из исходной фазы со структурой кубоктаэдра. Малый размер атома бериллия позволяет организоваться тетраэдрической плотной упаковке в форме икосаэдра из атомов кислорода вокруг центрального атома бериллия. В результате повышается атомная плотность и плотность электронных состояний на уровне Ферми. Предлагаются модели для объяснения причины появления ферромагнетизма и электропроводности, которые обнаружены в бериллиевой керамике. С помощью метода спин-поляризованных электронов проведены расчеты электронной структуры нанокластеров с различным ближним порядком.

Ключевые слова: бериллиевая керамика, магнитный гистерезис, электронная структура, икосаэдрические кластеры.

Благодарности: Авторы выражают благодарность коллегам за помощь, благодарность за финансовую поддержку исследования.

Для цитирования: Павлов А.В., Квеглис Л.И., Джес А.В., Сапрыкин Д.Н., Насибуллин Р.Т., Великанов Д.А., Немцев И.В., Шалаев П.О. Магнетизм бериллиевой керамики со структурой перовскита BeTiO_3 // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2022. Т. 19, № 1. С. 115–124. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.01.013.

Original article

MAGNETISM OF BERYLLIUM CERAMICS WITH THE PEROVSKITE STRUCTURE BeTiO₃Alexander V. Pavlov¹, Lyudmila I. Kveglis^{2†}, Alexey V. Jess³, Dmitry N. Saprykin⁴,
Rinat T. Nasibullin⁵, Dmitry A. Velikanov⁶, Ivan V. Nemtsev⁷, Pavel O. Shalaev⁸^{1, 2, 6, 7, 8} Siberian Federal University, Svobodny Pr., 79, Krasnoyarsk, 660041, Russia^{1, 2, 4} East Kazakhstan University named after S. Amanzholov, 30th Guards division Str., 34, Ust-Kamenogorsk, 070002, Republic of Kazakhstan³ East Kazakhstan Technical University named after D. Serikbayev, Protozanova Str., 69, Ust-Kamenogorsk, 070004, Republic of Kazakhstan⁵ National Research Tomsk State University, Lenin Pr., 36, Tomsk, 634050, Russia^{6, 7} Institute of Physics named after L.V. Kirensky, Akademgorodok, 50, building No. 38, Krasnoyarsk, 660036, Russia¹ alexandr_pavlov_1988@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3514-9476>² kveglis@list.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-6850-354X>³ alexdzhes@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-8172-8073>⁴ saprykin-dmitry@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3796-057X>⁵ nasibullin.rt@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2218-1944>⁶ dponal@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-2662-0470>⁷ ivan_nemtsev@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4222-3099>⁸ pshalaev@sfu-kras.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0552-9715>

Abstract. It is known that the introduction of TiO₂ additives into BeO ceramics after heat treatment in a reducing atmosphere is accompanied by a significant increase in electrical conductivity and the ability to absorb electromagnetic radiation in a wide frequency range. Until now, the mechanism of this influence has not been fully established. Using the methods of Lorentzian electron microscopy in a scanning electron microscope, as well as a vibration magnetometer, the manifestation of ferromagnetism was established. This feature of beryllium ceramics promotes the absorption of electromagnetic energy in bulk samples containing TiO₂ nanoparticles. It was found that the presence of nanoparticles promotes the formation of the perovskite structure in the BeO + TiO₂ sintering zones. In the structure of perovskite, polarization of molecules is possible due to the formation of polarons, which leads to deformation of the lattice and displacement of atoms. As a result of this displacement, a change in the short-range order in the perovskite structure occurs and to the formation of an icosahedral phase from the initial phase with a cuboctahedral structure. The small size of the beryllium atom makes it possible to organize a tetrahedral close packing in the form of an icosahedron of oxygen atoms around the central beryllium atom. As a result, the atomic density and the density of electronic states at the Fermi level increase. Models are proposed to explain the reasons for the appearance of ferromagnetism and electrical conductivity found in beryllium ceramics. Using the spin-polarized electron method, the electronic structure of nanoclusters with different short-range orders has been calculated.

Keywords: martensitic transformations, orientation relations, Pitch deformation, polar decomposition of the tensor, martensite nanocrystals.

Acknowledgements: Authors are grateful to colleagues for their help, gratitude for the financial support of the study.

For citation: Pavlov, A. V., Kveglis, L. I., Jess, A. V., Saprykin, D. N., Nasibullin, R. T., Velikanov, D. A., Nemtsev, I. V. & Shalaev, P. O. (2022). Magnetism of beryllium ceramics with the perovskite structure BeTiO₃. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 1(19), 115–124. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.01.013.

Введение

Mg, Ba, Sr, Ca; Ln: La, Sm, Nd привлекают внимание многих исследователей, благодаря регулируемой структуре перовскита и превосходящими диэлектрическими свойствами [1, 2].

Сегнетоэлектрический порядок возникает из гетероструктур, состоящих из оксидных компонентов с номинально противоречивым поведением [3]. Следует особо выделить BeO-

керамику, которая имеет в 3 раза большую теплопроводность, чем MgO, и в 4-6 раз большую, чем Al₂O₃-керамика. BeO-керамика в настоящее время широко применяется в электронной промышленности для диссипации тепла, выделяемого при работе радиоэлементов функциональной электроники, а также в высокочастотных электронных схемах [4]. Одной из добавок, способной существенно менять проводящие и другие свойства BeO-керамики, является диок-

сид титана TiO_2 . Известно, что введение в BeO -керамику TiO_2 после термообработки в восстановительной атмосфере сопровождается значительным увеличением плотности, механической прочности, электропроводности и способностью поглощать электромагнитное излучение в СВЧ-диапазоне спектра [5, 6].

До сих пор механизм этого влияния до конца не установлен. Увеличение значений механической прочности, плотности, электропроводности и теплопроводности при условии сохранения поглощающих характеристик представляет большой интерес для СВЧ и электронной промышленности [7-9]. В нашей предыдущей работе [10] было обнаружено появление ферромагнетизма в образцах бериллиевой керамики, содержащей после спекания порошков оксида бериллия и диоксида титана с добавлением наночастиц, области со структурой перовскита BeTiO_3 .

Цель данной работы: попытаться объяснить природу возникновения ферромагнетизма

в бериллиевой керамике, не содержащей ферромагнитных добавок и содержащей икосаэдрическую фазу в структуре перовскита BeTiO .

Материалы и методы исследования

Чтобы иметь возможность проследить эволюцию структурных превращений и других свойств образцов оксидно-бериллиевой керамики модифицированной нанопорошком TiO_2 получали образцы, в которых содержание ферромагнитных примесей не превышало 0,007 вес. %.

Структуру поверхности образцов исследовали с помощью растрового микроскопа с микроанализом SEMHitachi T3000. Схема наблюдения контраста, в том числе магнитного, представлена на рис.1. Здесь видно, что магнитный контраст формировался только за счет спин-поляризованного состояния электронов в магнитном поле самого образца, содержащего области с ненулевой намагниченностью.

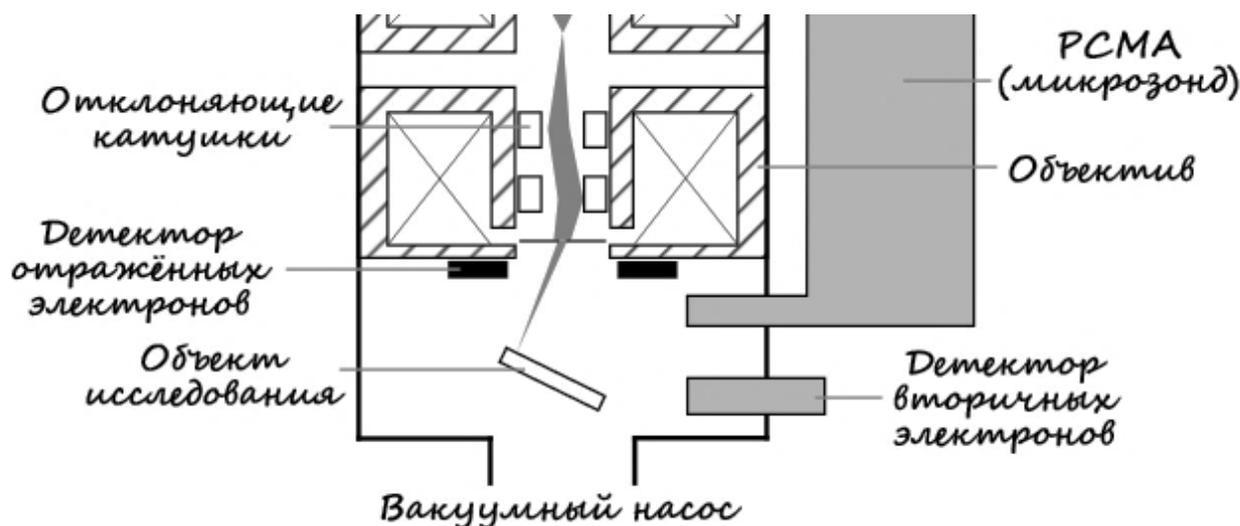


Рис.1. Схема получения изображения в РЭМ при наблюдении магнитного контраста

Fig.1. Scheme of obtaining an image in an SEM when observing magnetic contrast

При этом длины волн ускоренных электронов зависят от разности потенциалов между катодом и анодом, которая составляла 15 кВ. Электроны, подобно рентгеновским лучам и нейтронам, характеризуются длиной волны, которая в данном случае равна $\lambda = h/mv_e$. Падающие на образец керамики электроны рассеиваются электронными облаками атомов, находящихся в кристаллографических плоскостях. Однако, в случае бериллиевой керамики, содержащей структуру перовскита, электроны в ней могут быть поляризованы по направлению

спина, как это показано в [10-11]. В таком случае сам образец взаимодействует с падающими на него электронами таким образом, что происходит квантование орбит электронов в магнитном поле самого образца и затем рассеяние этих электронов по тем же законам, как и от атомных плоскостей.

Известен способ визуализации полей рассеяния магнитных микрообъектов, заключающийся в формировании изображения при нормальном падении электронного пучка на поверхность образца при энергии первичных

электронов порядка нескольких кВ. Проблемой этого способа является малый контраст получаемых изображений и значительный уровень шумовой неинформативной составляющей [12].

Результаты исследования и их обсуждения

Микроструктура

На рис.2а приведена микрофотография, полученная в сканирующем электронном микроскопе от спеченной смеси микро и нанопорошков TiO_2 с двуокисью бериллия. На рис.2б при-

веден увеличенный фрагмент этого изображения, где видны четкие кольца магнитного контраста от участка, показанного на рис.2а, где приведен магнитный контраст, полученный при небольшом увеличении электронного микроскопа для сравнения с контрастом от держателя объектов в верхнем правом углу. На рис.2в приведено изображение того же участка в точном фокусе. На рис.3 приведена петля магнитного гистерезиса, полученная в вибрационном магнитометре при комнатной температуре.

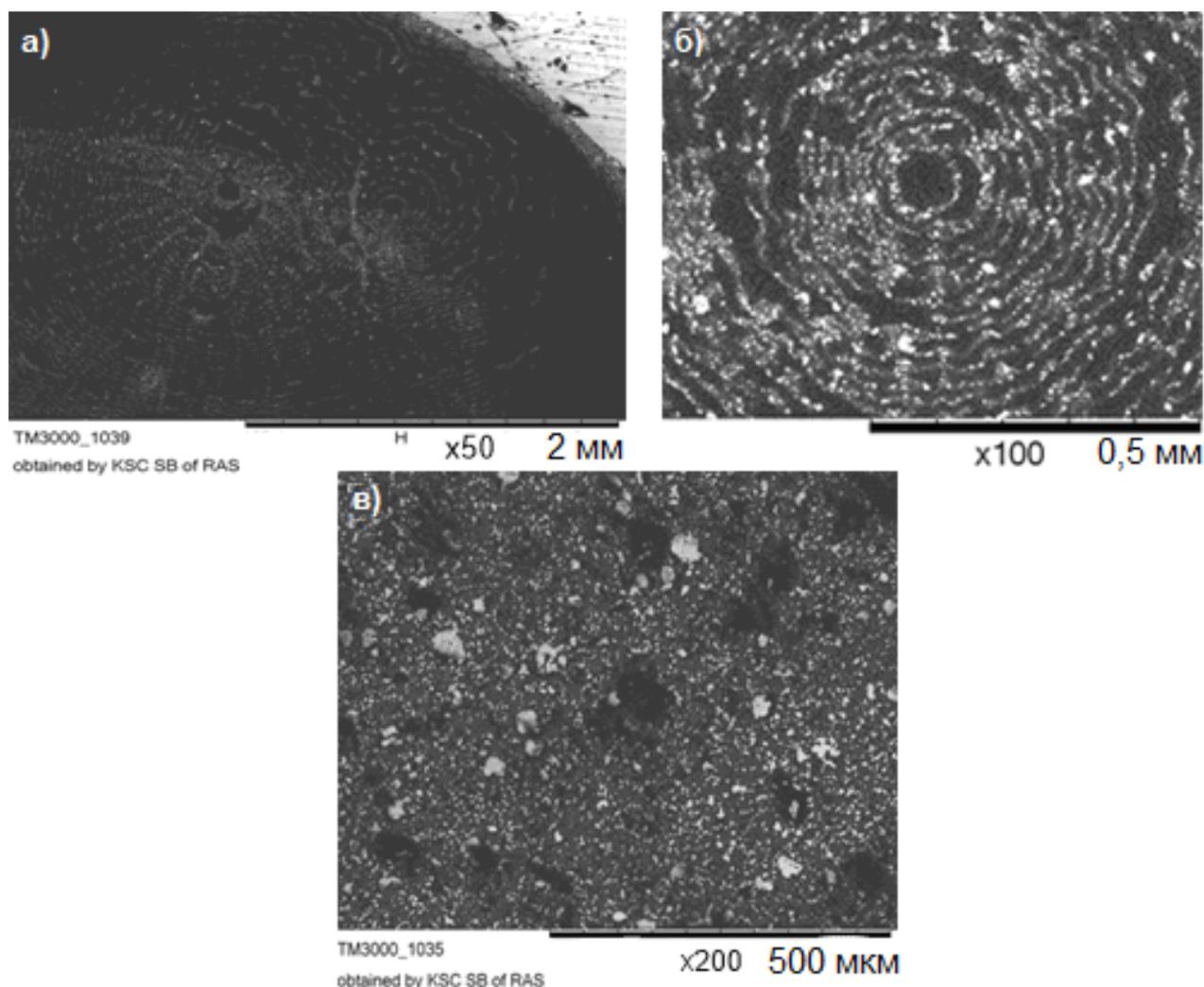


Рис.2. Изображения в SEM образца бериллиевой керамики: а) край образца на медном столике-держателе, б) магнитный контраст при большем увеличении и в) тот же участок в точном фокусе

Fig.2. SEM images of a beryllium ceramic sample: a) the edge of the sample on a copper stage, b) the magnetic contrast at higher magnification, and c) the same area in exact focus

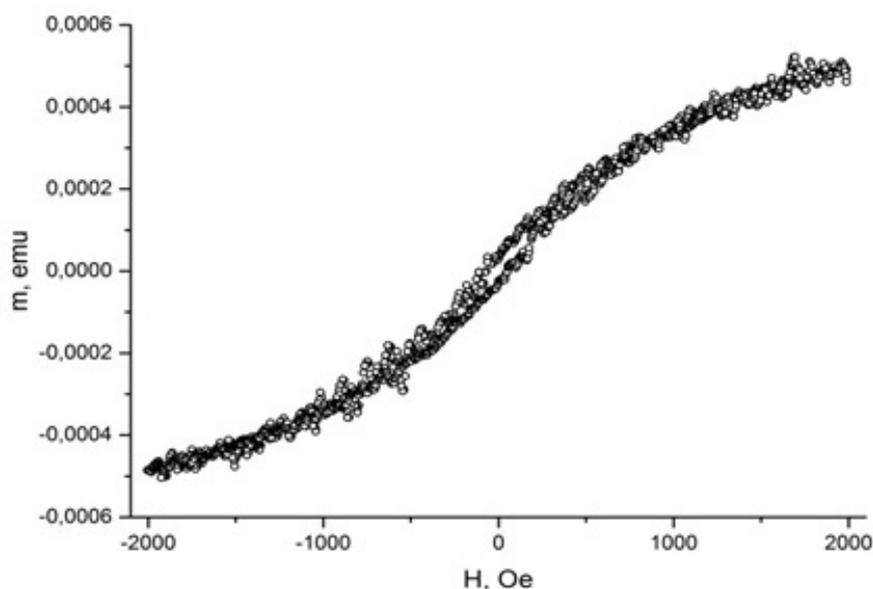


Рис.3. Петли магнитного гистерезиса, полученная в вибрационном магнитометре, при комнатной температуре и значении магнитного поля $H=2\text{кЭ}$

Fig.3. Magnetic hysteresis loops obtained in a vibrating magnetometer at room temperature and a magnetic field value $H = 2 \text{ kOe}$

Рентгеноструктурный анализ

В результате расшифровки рентгенограмм удалось определить кристаллогеометрические схемы ориентированного срастания кристаллитов TiO_2 и BeO , приводящих к формированию промежуточного слоя со структурой перовскита.

Атомные плоскости $(210)\text{TiO}_2$ близки к атомным плоскостям $(101)\text{BeO}$; плоскости $(301)\text{TiO}_2$ близки к плоскостям $(110)\text{BeO}$; плоскости $(112)\text{TiO}_2$ близки к плоскостям $(103)\text{BeO}$; плоскости $(321)\text{TiO}_2$ близки к плоскостям $(200)\text{BeO}$; плоскости $(400)\text{TiO}_2$ близки к плоскостям $(201)\text{BeO}$, см. Табл.1.

Таблица 1. Расшифровка некоторых линий спектра рентгеновской дифракции

Table 1. Deciphering some lines of the X-ray diffraction spectrum

№	2θ	θ	d	d TiO_2		d BeO		Структура
1	43,92	21,96	2,06	2,05	210	2,076	101	BeTiO_3
2	69,3	34,9	1,35	1,34	301	1,36	110	BeTiO_3
3	77,07	38,54	1,24	1,23	112	1,22	103	BeTiO_3
4	82,5	41,25	1,17	1,169	321	1,18	200	BeTiO_3
5	84,38	42,19	1,15	1,147	400	1,14	201	BeTiO_3

Многочисленные исследования соединений типа перовскита состава ABO_3 показывают, что формирование такой структуры можно объяснить при некотором отступлении от стандартных представлений. Например, перовскитоподобная структура БЛТ-керамики, на основе оксида бария, лития и оксида титана с ромбическим искажением, описанная в [13], содержит элементы, характерные для кристаллической решетки тетрагональных вольфрамовых бронз, и характеризуется наличием пустот –

структурных вакансий в подрешетке бария. В нашем случае, при взаимодействии между двумя кристаллитами, – двуокисью титана и окисью бериллия возникает кооперативное смещение атомов кислорода и их перераспределение, в результате которого возникают новые кластеры бериллия, окруженные кислородными тетраэдрами [9]. Такие кластеры имеют форму икосаэдра или тетраэдрически плотно упакованный многогранник типа Франка-Каспера.

Сопоставляя ориентационные соотношения, приведенные выше, можно утверждать, что эпитаксиальный рост создает промежуточный слой между TiO_2 и BeO , таким образом, что структура промежуточного слоя соответст-

вует структуре типа перовскит, которая приведена на рис.4. Структура BeO существует в форме гранцентрированного куба, где темными атомами показан кислородный октаэдр.

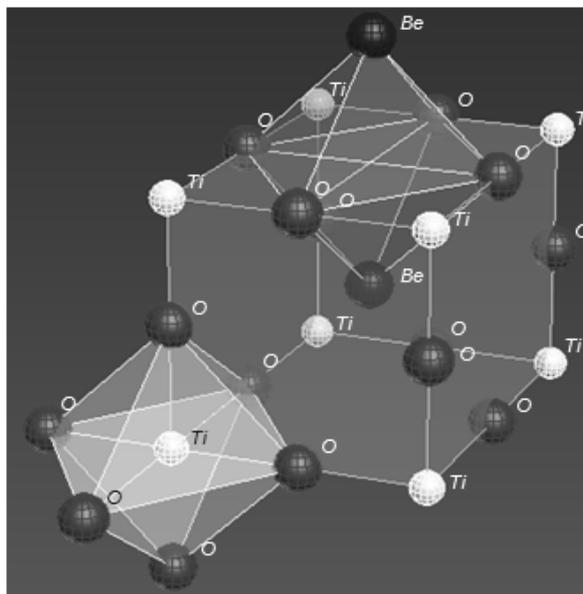


Рис.4. Кристаллическая структура диэлектрической фазы перовскита BeTiO_3 : в центре – атом бериллия, окруженный 12-ю атомами кислорода. Титан обозначен атомами белого цвета

Fig.4. The crystal structure of the dielectric phase of the BeTiO_3 perovskite: in the center is a beryllium atom surrounded by 12 oxygen atoms. Titanium is marked with white atoms

Наночастица TiO_2 , соединяясь с кластерами BeO , создает кристаллическую структуру перовскита, отличную от классической структуры. В работе [10] приведены структурные модели бериллиевой керамики – два типа 12-ти вершинников: кубооктаэдр и икосаэдр из атомов кислорода, окружающих атом бериллия в первой координационной сфере. Икосаэдрическая фаза определена из расшифровки спектров рентгеновской дифракции и дифракции электронов в просвечивающем электронном микроскопе. Возможность подобных структурных превращений описана в работах В.С. Крапошина [14]. При переходе от октаэдрической к тетраэдрической атомной упаковке существенно уменьшается объем на атом. Октаэдр трансформируется в 3 тетраэдра, при этом объем всего кластера уменьшается на объем одного тетраэдра. Формируется структура с минимальной свободной энергией – это структура с проводящей фазой, в виде 12-ти вершинника – икосаэдра, в котором электронная плотность значительно выше за счет уменьшения объема на атом. В икосаэдрической фазе плотность электронов на уровне Ферми выше, чем у фазы,

содержащей 12-вершинник классического перовскита.

Методом импедансной спектроскопии впервые исследованы электрические и диэлектрические характеристики данной керамики в диапазоне частот от 100 Hz до 100 MHz в зависимости от присутствия в составе керамики BeO микро- и наноразмерной фазы TiO_2 . Установлено, что электросопротивление керамики с добавкой нанопорошка оксида титана существенно уменьшается по сравнению с сопротивлением исходной керамики с микропорошком TiO_2 [15]. В работе [16] природу ферромагнетизма в наночастицах перовскита BaTiO_3 связана с высокой плотностью структурных дефектов. В этом случае икосаэдрические кластеры на атомном уровне могут рассматриваться как структурные дефекты. В работе [17] исследованы пространственные группы, отношения параметров порядка и деформации (отношения параметров порядка в структурах перовскита ABX_3). Приводятся параметрические связи и возможные фазовые переходы с использованием разложений свободной энергии Ландау.

Расчет электронной структуры

Исследования магнитных свойств кластеров, формируемых в структурах на основе BeTiO_3 , проводились в рамках теории функционала электронной плотности (DFT) [18] с использованием базиса плоских волн и ультрамягких псевдопотенциалов [19]. Для расчетов применяли пакет программ Quantum Espresso [20]. Обменно-корреляционный функционал в приближении обобщенной градиентной поправки (GGA) был взят в форме Perdew-Burk-Ernzerhof (PBE) [21, 22]. Энергию отсечки базиса плоских волн полагали равной 60 Ry. Расчеты электронной структуры осуществляли интегрированием в зоне Бриллюэна с использованием k-сетки $4 \times 4 \times 4$, построенной по методу Монкхорста-Пака [23]. Выбранные параметры расчета определялись из исследования сходимости полной энергии и величины магнитного

момента кластера от величины базиса плоских волн и разбиения зоны Бриллюэна.

Для исследования магнитных свойств октаэдрических и икосаэдрических фаз BeTiO_3 был проведен спин-поляризованный расчет для изолированных кластеров BeO_6 и BeO_{12} , которые представляют из себя октаэдр и икосаэдр, соответственно. В центре каждого кластера был помещен атом Be и атомы O располагались по вершинам. Длины сторон для каждого кластера равны 3,24 Å. В результате расчета, магнитный момент для икосаэдрического кластера (BeO_6) получился равным $8\mu_B$. Также, из анализа плотностей электронных состояний для каждого из рассматриваемых кластеров, изображенных на рис.5, видно, что появление магнитного момента объясняется различным распределением плотности электронных состояний с противоположными спинами.

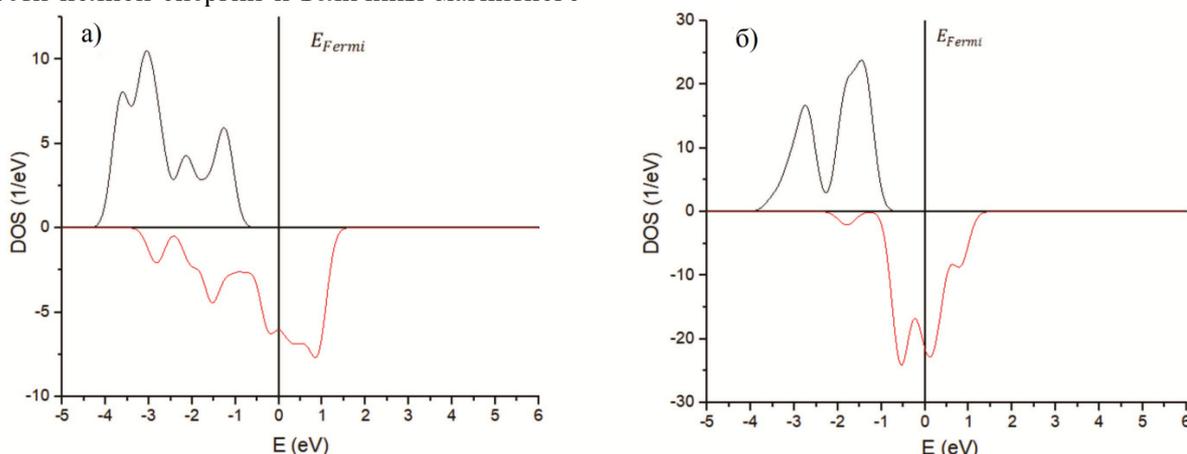


Рис.5. Плотности электронных состояний для: а) октаэдрического кластера, б) икосаэдрического кластера

Fig.5. Densities of electronic states for: a) octahedral cluster, b) icosahedral cluster

Таким образом, результат расчета объясняет наблюдаемый в эксперименте рост намагниченности для порошков BeTiO_3 при переходе из октаэдрической в икосаэдрическую фазу. Такой результат согласуется с работой [24], где показан высокий рост электронных состояний в икосаэдрической фазе.

Выводы

1. С помощью сканирующей электронной микроскопии обнаружен магнитный контраст в оксидно-бериллиевой керамике, модифицированной нанопорошком TiO_2 состава $\text{BeO}+\text{TiO}_2$.
2. Магнитные свойства, обнаруженные методом Лоренцевой электронной микроскопии в

сканирующем электронном микроскопе, подтверждены исследованиями в вибрационном магнитометре.

3. Особенности физических свойств бериллиевой керамики связаны со структурными превращениями.

4. Икосаэдрический ближний порядок создает высокую электронную плотность на уровне Ферми, что приводит к появлению и росту намагниченности материала.

Список литературы

1. Yang X., Wang X., Li L. Effect of MgO on microstructure and microwave dielectric properties

- of 0.84CaTiO₃-0.16Sm_{0.9}Nd_{0.1}AlO₃ ceramics // *Mater. Res. Bull.* 2015. V. 67. P. 226–229.
2. Chakhalian J., Freeland J.W., Millis A.J., Panagopoulos C., Rondinelli J.M. Colloquium: Emergent properties in plane view: Strong correlations at oxide interfaces // *Rev. Mod. Phys.* 2014. V. 86. P. 1189–1202.
3. Кийко В.С., Горбунова М.А., Макурин Ю.Н. и др. Микроструктура и электропроводность композиционной (ВеО+ТiО₂)-керамики // *Новые огнеупоры.* 2007. № 11. С. 68–74.
4. Кийко В.С., Дмитриев И.А., Макурин Ю.Н. и др. Получение и применение прозрачной бериллиевой керамики // *Физика и химия стекла.* 2004. Т. 30, №1. С. 149–151.
5. Kiiko V.S. Transparent beryllia ceramics for laser technology and ionizing radiation dosimetry // *Refractories and Industrial Ceramics.* 2004. V. 5, N 4. P. 266–272.
6. Кийко В.С., Павлов А.В. Композиционная (ВеО + ТiО₂)-керамика для электронной и других областей техники // *Новые огнеупоры.* 2017. № 12. С. 64–70.
7. Новиков А.Е., Кийко В.С., Кащеев И.Д., Зуев М.Г., Журавлева Е.Ю. Пат. 2248336 RU, С 2 С 04 В 35/00, 35/01, G 01 N33/20. Материал для изготовления пробирного камня. ГОУ ВПО УГТУ–УПИ. Зарегистрирован в Гос. реестре изобр. РФ 20.03.05.
8. Ивановский А.Л., Кийко В.С., Акишин Г.П., Макурин Ю.Н. Пат. 2326091 RU С2 С 04 В 35/08. Способ получения электропроводной керамики на основе оксида бериллия. ГОУ ВПО УГТУ–УПИ и ИХТТ УрО РАН; опубли. 10.06.2008.7.
9. Александров К.С., Безносиков Б.В. Иерархия перовскитоподобных кристаллов // *Физика твердого тела.* 1997. Т. 39, № 5. С. 785–808.
10. Pavlov A.V., Kveglis L.I., Saprykin D.N., Nasibullin R.T., Kalitova A.A., Velikanov D.A., Nemtsev I.V., Kantai N. Emergence of Ferromagnetism in Nanoparticles of BeTiO₃ Ceramic with the Perovskite Structure // *Inorganic Materials: Applied Research.* 2021. V. 12, Is. 1. P. 88–93.
11. Colin D., Sonnichsen D.P., Strandell P.J., Brosseau K., Patanjali K. Polaronic quantum confinement in bulk CsPbBr₃ perovskite crystals revealed by state-resolved pump/probe spectroscopy // *Phys. Rev. Res.* 2021. N 3. P. 1–11.
12. Hubert A., Schafer R. *Magnetic Domains. The Analysis of Magnetic Microstructures.* Springer, 2009. 696 p.
13. Ненашева Е.А., Трубицына О.Н., Картенко Н.Ф., Усов О.А. Керамические материалы для СВЧ-электроники // *Физика твердого тела.* 1999. Т. 41, В. 5. С. 882–884.
14. Kraposhin V.S., Talis A.L., Samoylovitch M.I. Axial (helical) substructures determined by the root lattice E₈ as generating clusters of the condensed phases // *Journal of Non-Crystalline Solids.* 2007. V. 353. P. 3279–3284.
15. Лепешев А.А., Павлов А.В., Дрокин Н.А. Импедансная спектроскопия (ВеО+ТiО₂)-керамики с добавкой наночастиц ТiО₂ // *Журнал СФУ “Техника и технологии”.* 2019. № 3. С. 366–380.
16. Phan T.-L., Zhang P., Yang D.S., Thanh T.D., Tuan D.A., Yu S.C. Origin of ferromagnetism in BaTiO₃ nanoparticles prepared by mechanical milling // *Journal of Applied Physics.* 2013. V. 117. P. 113–117.
17. Carpenter M.A., Howard C.J. Symmetry rules and strain/order-parameter relationships for coupling between octahedral tilting and cooperative Jahn-Teller transitions in ABX₃ perovskites // *Acta Crystallographica Section B: Structural Science.* 2009. P. 134–146.
18. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., Calandra M., Car R., Cavazzoni C., Wentzcovitch R.M. Quantum espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics: Condensed Matter.* 2009. V. 395502. P. 21–39.
19. Hohenberg P., Kohn W., Inhomogeneous Electron Gas. // *Phys. Rev.* 1964. V. 136. P. 864–871.
20. Vanderbilt D. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 41. P. 7892–7895.
21. John P. Perdew, Kieron Burke, Matthias Ernzerhof Generalized gradient approximation made simple // *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 77. P. 3865–3868.
22. John P. Perdew, Kieron Burke, Matthias Ernzerhof Generalized gradient approximation made simple // *Phys. Rev. Lett.* 1997. V. 78. P. 1396–1400.
23. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations // *Phys. Rev. B.* 1976. V. 13. P. 5188–5192.
24. Panova G.H., Chernoplekov N.A., Shikov A.A. Thermal capacity and resistance of icosahedron Zr₇₀Pd₃₀ alloy and its amorphous and crystal analogs // *Physics of the Solid State.* 2005. V. 47, Is. 7. P. 1165–1169.

Информация об авторах

А. В. Павлов – преподаватель кафедры физики и технологий Восточно-Казахстанского университета им. С. Аманжолова.

Л. И. Квеглис – доктор физико-математических наук, профессор Сибирского Федерального университета.

А. В. Джес – кандидат технических наук, научный сотрудник центра «VERITAS», Восточно-Казахстанский технический университет имени Д. Серикбаева.

Д. Н. Сапрыкин – студент кафедры физики Восточно-Казахстанского университета им. С. Аманжолова.

Р. Т. Насибуллин – сотрудник кафедры оптики Томского государственного университета.

Д. А. Великанов – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института физики им. Л.В. Киренского.

И. В. Немцев – научный сотрудник Центра коллективного пользования Красноярского Научного центра.

П. О. Шалаев – аспирант Сибирского Федерального университета.

References

1. Yang, X., Wang, X. & Li, L. (2015). Effect of MgO on microstructure and microwave dielectric properties of $0.84\text{CaTiO}_3\text{-}0.16\text{Sm}_2\text{O}_3\text{-}0.9\text{Nd}_2\text{O}_3\text{-}1\text{Al}_2\text{O}_3$ ceramics. *Mater. Res. Bull.*, (67), 226–229.
2. Chakhalian, J., Freeland, J. W., Millis, A. J., Panagopoulos, C. & Rondinelli, J. M. (2014). Colloquium: Emergent properties in plane view: Strong correlations at oxide interfaces. *Rev. Mod. Phys.*, (86), 1189–1202.
3. Kiyko, V. S., Gorbunova, M. A. & Makurin, Yu. N., et al. (2007). Microstructure and electrical conductivity of composite $(\text{BeO}+\text{TiO}_2)$ -ceramics. *Novyye ognepory*, 11, 68–74. (In Russ.).
4. Kiyko, V. S., Dmitriyev I. A. & Makurin, Yu. N., et al. (2004). Obtaining and application of transparent beryllium ceramics. *Fizika i khimiya stekla*, 1(30), 149–151. (In Russ.).
5. Kiiko, V. S. (2004). Transparent beryllia ceramics for laser technology and ionizing radiation dosimetry. *Refractories and Industrial Ceramics*, 4(5), 266–272.
6. Kiyko, V. S. & Pavlov, A. V. (2017). Composite $(\text{BeO} + \text{TiO}_2)$ -ceramics for electronic and

other areas of technology. *Novyye ognepory*, 12, 64–70. (In Russ.).

7. Novikov, A. E., Kiyko, V. S., Kashcheev, I. D., Zuev, M. G. & Zhuravleva, E. Yu. Pat. 2248336 RU, C 2 C 04 B 35/00, 35/01, G 01 N33/20. Material for making touchstone. GOU VPO USTU-UI. Registered in the State. pe-stre pic. RF 20.03.05. (In Russ.).

8. Ivanovsky, A. L., Kiyko, V. S., Akishin, G. P. & Makurin, Yu. N. Pat. 2326091 RU C2 C 04 B 35/08. Method for obtaining electrically conductive ceramics based on beryllium oxide. GOU VPO USTU-UI and IKhTT UB RAS; publ. 06/10/2008.7. (In Russ.).

9. Aleksandrov, K. S. & Beznosikov, B. V. (1997). Hierarchy of perovskite-like crystals. *Physics of the Solid State*, 5(39), 785–808. (In Russ.).

10. Pavlov, A. V., Kveglis, L. I., Saprykin, D. N., Nasibullin, R. T., Kalitova, A. A., Velikanov, D. A., Nemtsev, I. V. & Kantai, N. (2021). Emergence of Ferromagnetism in Nanoparticles of BeTiO_3 Ceramic with the Perovskite Structure. *Inorganic Materials: Applied Research*, 1(12), 88–93.

11. Colin, D., Sonnichsen, D. P., Strandell, P. J., Brosseau, K. & Patanjali, K. (2021). Polaronic quantum confinement in bulk CsPbBr_3 perovskite crystals revealed by state-resolved pump/probe spectroscopy. *Phys. Rev. Res.*, 3, 1–11.

12. Hubert, A. & Schafer, R. (2009). Magnetic Domains. The Analysis of Magnetic Microstructures. Springer. P. 696.

13. Nenasheva, E. A., Trubitsyna, O. N., Kartenko, N. F. & Usov, O. A. (1999). Ceramic materials for microwave electronics. *Physics of the Solid State*, 5(41), 882–884. (In Russ.).

14. Kraposhin, V. S., Talis, A. L. & Samoylovitch, M. I. (2007). Axial (helical) substructures determined by the root lattice E8 as generating clusters of the condensed phases. *Journal of Non-Crystalline Solids*, (353), 3279–3284.

15. Lepeshev, A. A., Pavlov, A. V. & Drokin, N. A. (2019). Impedance spectroscopy of $(\text{BeO}+\text{TiO}_2)$ -ceramics with the addition of TiO_2 nanoparticles. *«Zhurnal SFU Tekhnika i tekhnologii»*, 3, 366–380. (In Russ.).

16. Phan, T.-L., Zhang, P., Yang, D. S., Thanh, T. D., Tuan, D. A. & Yu, S. C. (2013). Origin of ferromagnetism in BaTiO_3 nanoparticles prepared by mechanical milling. *Journal of Applied Physics*, (117), 113–117.

17. Carpenter, M. A. & Howard, C. J. (2009). Symmetry rules and strain/order-parameter relationships for coupling between octahedral tilting and cooperative Jahn-Teller transitions in ABX_3

perovskites. *Acta Crystallographica Section B: Structural Science*, 134–146.

18. Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C. & Wentzcovitch, R. M. (2009). Quantum espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, (395502), 21–39.

19. Hohenberg, P. & Kohn, W., (1964). Inhomogeneous Electron Gas. *Phys. Rev.*, (136), 864–871.

20. Vanderbilt, D. (1990). Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism. *Phys. Rev. B*, (41), 7892–7895.

21. John, P. Perdew, Kieron Burke & Matthias Ernzerhof (1996). Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.*, (77), 3865–3868.

22. John, P. Perdew, Kieron Burke & Matthias Ernzerhof (1997). Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.*, (78), 1396–1400.

23. Monkhorst, H. J. & Pack, J. D. (1976). Special points for Brillouin-zone integrations. *Phys. Rev. B*, (13), 5188–5192.

24. Panova, G. H., Chernoplekov, N. A. & Shikov, A. A. (2005). Thermal capacity and resistance of icosahedron $Zr_{70}Pd_{30}$ alloy and its amor-

phous and crystal analogs. *Physics of the Solid State*, 7(47), 1165–1169.

Information about the authors

A. V. Pavlov – Lecturer, Department of Physics and Technology of the East Kazakhstan University named after S. Amanzholova.

L. I. Kveglis – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Siberian Federal University.

A. V. Jess – Candidate of Technical Sciences, Researcher at the «VERITAS» Center, East Kazakhstan Technical University named after D. Serikbayev.

D. N. Saprykin – Student of the Department of Physics of the East Kazakhstan University named after S. Amanzholova.

R. T. Nasibullin – Staff member of the Department of Optics, Tomsk State University.

D. A. Velikanov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Leading Researcher at the L.V. Kirensky Institute of Physics.

I. V. Nemtsev – Researcher at the Shared Use Center of the Krasnoyarsk Scientific Center.

P. O. Shalaev – Postgraduate Student of the Siberian Federal University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 10.12.2021; одобрена после рецензирования 11.01.2022; принята к публикации 21.01.2022.

The article was received by the editorial board on 10 Dec. 21; approved after reviewing 11 Jan. 22; accepted for publication 21 Jan. 22.