

Изменение составов образцов в значительной степени влияет на межаподрешеточные (R-Bi)-O-(R-Bi) и внутриаподрешеточные Fe-O-Fe обменные взаимодействия. Это выражается в уменьшении угла наклона октаэдров и, как следствие, в изменении величины валентного угла Fe – O – Fe. Длины связей (R-Bi) – O и углы Fe – O – Fe увеличиваются с увеличением эффективного радиуса замещающего катиона. Наблюдаемое при этом снижение величины ширины запрещенной зоны обусловлено появлением новых электронных состояний как у потолка валентной зоны, так и в нижней части зоны проводимости. Изменения валентной зоны вызваны гибридизацией $4f$ -состояний редкоземельных элементов с p -состояниями кислорода и висмута. В формировании дна зоны проводимости определяющую роль играют обменные взаимодействия между $3d$ -состояниями железа и $2p$ -состояниями кислорода. Данный тип взаимодействий обладает выраженной структурной зависимостью и связан с изменением величин углов Fe-O-Fe.

Полученные результаты могут быть использованы как при исследованиях диэлектрических и оптических свойств катионзамещенного феррита висмута, так и при синтезе новых изоструктурных материалов с заданными физическими свойствами.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Толстик, А. М. Роль компьютерного эксперимента в физическом образовании / А. М. Толстик // Физ. образование в вузах. – 2002. – Т. 8, № 2. – С. 94–102.
- 2 Wu, L. Recent progress in multiferroic materials / L. Wu, Y. Gao, J. Ma // Sci. China Technol. Sci. – 2015. – Vol. 58 (12). – P. 2207–2209.
3. Kuzmenko, A. B. Kramers – Kronig constrained variational analysis of optical spectra / A. B. Kuzmenko // Rev. Sci. Instrum. – 2005. – Vol. 76. – P. 083108-1–083108-9.

УДК 537.312:538.245

И. И. МАКОЕД, Д. Н. ГОРБАЧИК, И. А. БАРТОШУК

Брест, БрГУ имени А. С. Пушкина

ОПТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ КОЛЕБАНИЙ РЕШЕТКИ ОРТОФЕРРИТОВ

Компьютерное моделирование как составная часть и инструмент компьютерного обучения содержит в себе потенциальные возможности повышения эффективности изучения физических основ оптических

явлений в курсах общей физики и специальных дисциплин вуза. Использование компьютерных моделей различных физических процессов и явлений способствует росту эффективности обучения, позволяет более глубоко понять механизмы физических явлений, в том числе и таких, непосредственное наблюдение которых оказывается невозможным по ряду объективных причин [1]. Ортоферриты $R\text{FeO}_3$ (R = катионы редкоземельных элементов), обладающие набором физических свойств, востребованных в устройствах современной электроники, используют для создания новых функциональных материалов [2]. Данные материалы нашли практическое применение в качестве компонент твердотопливных элементов, газовых сенсоров, каталитических нейтрализаторов, датчиков магнитного поля, устройств записи и хранения информации. В последнее время опубликованы данные, подтверждающие наличие у ортоферритов свойств магнитоэлектриков и мультиферроиков [3–5], в которых сосуществуют электрическая и магнитная упорядоченные структуры, что позволяет создавать на их основе многофункциональные элементы электронных схем. В данной работе вычислительный компьютерный эксперимент был использован для изучения и моделирования диэлектрических функций ортоферритов. Целью работы является установление закономерностей в изменении диэлектрических и оптических функций образцов ортоферритов в области решеточных резонансов на основании результатов экспериментального исследования и компьютерного моделирования.

Экспериментально исследованы диэлектрические и оптические свойства редкоземельных ортоферритов в области решеточных колебаний. Выполнено моделирование диэлектрических функций образцов. Дисперсионный анализ и осцилляторное моделирование с помощью программного обеспечения Reffit [6] были применены для изучения компонент комплексной диэлектрической проницаемости с целью нахождения резонансных частот, сил осцилляторов и коэффициентов затуханий. По методу Крамерса – Кронига восстановлены спектры компонент диэлектрической проницаемости. Исследованы зависимости спектров коэффициента отражения, мнимой и действительной компонент диэлектрической функции от типа и концентрации допирующих ионов. Выполнено моделирование диэлектрических функций образцов. Изучено поведение параметров модели в зависимости от типа R-катиона. На полученных спектральных зависимостях коэффициентов отражения и спектров действительных компонент комплексной диэлектрической проницаемости выражены решеточные резонансы. Рассчитанные спектры отличаются от экспериментальных на величины, меньшие погрешностей эксперимента во всем интервале частот. Проведено сопоставление полученных результатов с экспериментальными данными. Изучено поведение параметров модели в зависимости

от типа R-катиона. На полученных в инфракрасной области спектральных зависимостях коэффициентов отражения и спектров действительных компонент комплексной диэлектрической проницаемости выражены решеточные резонансы, характеризующие колебательные свойства кристаллических решеток. Результаты анализа оптических свойств образцов показали высокую чувствительность величин резонансных частот решеточных колебаний и их интенсивностей к малым изменениям состава изоструктурных соединений.

Полученные результаты могут быть использованы как при исследовании структурных и диэлектрических свойств ортоферритов, так и при синтезе новых материалов с заданными физическими свойствами.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Толстик, А. М. Роль компьютерного эксперимента в физическом образовании / А. М. Толстик // Физ. образование в вузах. – 2002. – Т. 8, № 2. – С. 94–102.
2. Суздалев, И. П. Многофункциональные наноматериалы / И. П. Суздалев // Успехи химии. – 2009. – Т. 78 (3). – С. 266–301.
3. Wu, L. Recent progress in multiferroic materials / L. Wu, Y. Gao, J. Ma // Sci. China Technol. Sci. – 2015. – Vol. 58 (12). – P. 2207–2209.
4. Room-temperature multiferroicity in CeFeO_3 ceramics / L. Hou [et al.] // J. All. Comp. – 2019. – Vol. 797. – P. 363–369.
5. A comparative study of ultra-low-temperature thermal conductivity of multiferroic orthoferrites RFeO_3 ($\text{R} = \text{Gd}$ and Dy) / J. Y. Zhao [et al.] // AIP Advances. – 2017. – Vol. 7. – P. 055806-1–055806-7.
6. Kuzmenko, A. B. Kramers – Kronig constrained variational analysis of optical spectra / A. B. Kuzmenko // Rev. Sci. Instrum. – 2005. – Vol. 76. – P. 083108-1–083108-9.

УДК 517.2

С. А. МАРЗАН

Брест, БрГУ имени А. С. Пушкина

СОПОСТАВЛЕНИЕ КЛАССИЧЕСКОГО И ДРОБНОГО АНАЛИЗА В ПРЕПОДАВАНИИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА СТУДЕНТАМ ФИЗИЧЕСКИХ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ

Классический анализ предполагает, что интегралы и производные имеют порядки, выражаемые натуральными числами. Между тем поведение целого ряда объектов и процессов, в том числе физических, приводит