

## НАНОРАЗМЕРНЫЕ НЕОДНОРОДНОСТИ В NiO

*Шулятев Д.А.,\*<sup>1</sup> Мухамедов Б.,<sup>1</sup> Пономарева А.В.,<sup>1</sup>  
Абрикосов И.А.,<sup>1</sup> Божко С.И.,<sup>2</sup> Ионов А.М.,<sup>2</sup> Мазилкин А.  
А.,<sup>2</sup> Смирнова А. И.,<sup>2</sup> Волс Б.,<sup>3</sup> Швец И. В.<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>*МИСиС, Москва, Россия, <sup>2</sup>ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия,*

<sup>3</sup>*CRANN, Дублин, Ирландия*

*\*shulyatev@mail.ru*

Целью данной работы было изучение неоднородности монокристаллов NiO (и Ni<sub>1-x</sub>Li<sub>x</sub>)O, выращенных методом бестигельной зонной плавки. Различные типы неоднородностей в диапазоне от миллиметровых размеров до наноразмерных наблюдались с использованием рентгеновской дифракции, электронной микроскопии, LEED, AFM и STM/STS. В частности, AFM/STM исследования выявили необычную гранулированную структуру на поверхности NiO (100) с типичным размером гранул в несколько нанометров. Наногранулированная структура была также изучена методами низкоэнергетической электронной дифракции (LEED) и просвечивающей электронной микроскопии (ТЕМ). Оценка размера когерентной области по ширине LEED-пятен и ТЕМ-изображений хорошо согласуется с данными AFM-STM. Первопринципные расчеты показали, что возможной причиной формирования наногранулированной структуры является искажения кристаллической решетки вокруг вакансии Ni. Согласно DFT расчетам, диаметр области атомных смещений вокруг вакансии Ni составляет 1,2 нм, что очень близко к размеру гранул, наблюдаемых в STM.