

Математическое и компьютерное моделирование как метод исследования прыжковой проводимости манганитов $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ ($x = 0.6; 0.7; 0.8; 0.9$)

В.С. Захвалинский, М.С. Козлова, Ю.С. Некрасова

Аннотация— В статье представлены результаты применения компьютерной программы, разработанной для выявления механизмов прыжковой проводимости в легированных материалах, к исследованию электронных свойств манганитов $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ ($x = 0.6; 0.7; 0.8; 0.9$). Программа апробирована на материалах $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{O}_3$ и $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{O}_3$. Результаты её работы хорошо согласуются с данными, полученными ранее. Согласно результатам работы программы, для образца $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.4}\text{Fe}_{0.6}\text{O}_3$ в нулевом магнитном поле имеет место прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка (ПППДП) Мотта при температурах 170 – 300 К. В образце $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.2}\text{Fe}_{0.8}\text{O}_3$ наблюдается ПППДП Шкловского-Эфроса при 70 – 295 К и ПППДП Мотта в диапазоне 230 – 300 К. В поле величиной 1 Тл образец $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.4}\text{Fe}_{0.6}\text{O}_3$ демонстрирует прыжковую проводимость по ближайшим соседям и в адиабатическом, и в не адиабатическом режимах в интервале температур 130 – 170 К, а также ПППДП Шкловского-Эфроса при $T=200 - 300$ К. В образцах $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.3}\text{Fe}_{0.7}\text{O}_3$ и $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.1}\text{Fe}_{0.9}\text{O}_3$ программа прыжковую проводимость не обнаружила.

Ключевые слова—манганиты, прыжковая проводимость, автоматизация процесса исследования.

Статья получена 12 июня 2025.

В.С. Захвалинский д. ф.-м. н. профессор, ведущий научный сотрудник лаборатории «Перспективных материалов и технологий» НИУ БелГУ, Россия, г. Белгород, ул. Победы, 85 (e-mail: v_zahval@mail.ru).

Некрасова Ю.С. – к. ф.-м. н., доцент кафедры высшей математики БГТУ им. В.Г. Шухова, Россия, Белгород, ул. Костюкова, 46 (e-mail: yulya_nekrasova@mail.ru).

Козлова М.С. – аспирант кафедры высшей математики БГТУ им. В.Г. Шухова, Россия, Белгород, ул. Костюкова, 46 (e-mail: margaret_36-37_@mail.ru).

Работа выполнена в рамках реализации федеральной программы поддержки университетов «Приоритет 2030» с использованием оборудования на базе центра высоких технологий БГТУ им. Шухова и лаборатории «Перспективных материалов и технологий» НИУ БелГУ.

1. ВВЕДЕНИЕ

Высокий ритм жизни и большие объёмы данных, получаемые при исследовании неупорядоченных систем, делают необходимым создание и применение различных компьютерных программ для расчёта физических величин, характеризующих свойства новых материалов.

Одними из ярчайших представителей таких материалов являются манганиты. Манганитам посвящено большое количество научных трудов, и интерес исследователей к этим материалам не угасает по сей день. Это связано с богатым набором физических и химических свойств, обуславливающих их широкое применение в науке и технике.

Сложность химического состава и микроструктуры функциональных материалов выдвигает на первый план проблему оптимизации их параметров для прикладных целей, которая отчасти связана с определением механизмов переноса носителей заряда. Поэтому исследование электрофизических свойств полупроводников и полупроводниковых структур с учетом их реальной микроструктуры является важной и актуальной задачей [1].

Одной из отличительных черт электронных свойств манганитов перовскитов является наличие прыжковой проводимости.

Прыжковая проводимость (прыжковый транспорт) — это способ переноса заряда в неупорядоченных твердотельных полупроводниках, происходящий за счёт перемещения носителей заряда между локализованными состояниями (энергетическими уровнями), которые пространственно разделены.

В процессе исследования электронных свойств манганитов лантана, легированных кальцием и железом, возникла идея создания программного кода для расчёта параметров, характеризующих тип прыжковой проводимости.

II. ОБЪЕКТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Исследуемые образцы $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ ($x = 0.6; 0.7; 0.8; 0.9$) получены методом стандартной твердофазной реакции. Для синтеза использовались исходные материалы La_2O_3 , MnO_2 , Fe_2O_3 и CaCO_3 . Порошок La_2O_3 гигроскопичен и подвергался предварительному отжигу. Смеси порошков исходных

материалов отжигались на воздухе при температуре 1360 °С в течение 40 часов с промежуточным измельчением. Полученный порошок прессовался в таблетки под давлением 2000 кг / см², затем таблетки отжигались на воздухе при температуре 1500 °С в течение 22 часов. Распределение элементов как по объёму образца, так и в пределах отдельных зёрен однородно и соответствует стехиометрии образцов.

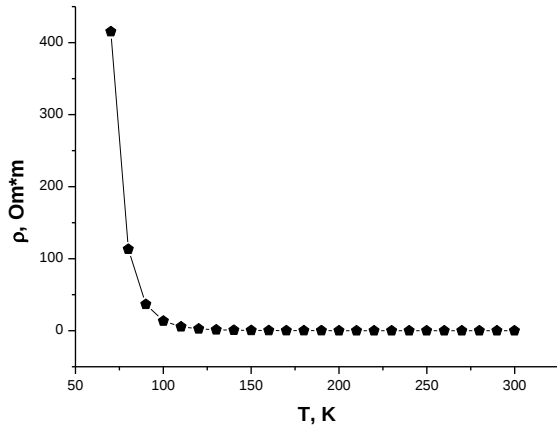


Рисунок 1. График температурной зависимости удельного сопротивления для образца $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.2}\text{Fe}_{0.8}\text{O}_3$ в нулевом магнитном поле

Исследования температурной зависимости удельного сопротивления проводились в диапазоне температур $T = 5 - 310$ К с использованием стандартной четырёхзондовой технологии в поперечном магнитном поле ($\vec{B} \perp \vec{j}$) величиной $B = 0$ и 1 Тл, при повышении и понижении температуры [2,3]. Пример графика полученной температурной зависимости удельного сопротивления исследуемых образцов в нулевом магнитном поле представлен на рисунке 1.

III. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Прыжковая проводимость твёрдых тел описывается универсальным выражением

$$\rho(T) = A \cdot T^m \cdot \exp\left(\left(\frac{T_0}{T}\right)^p\right), \quad (1)$$

где A — постоянная, T_0 — характеристическая температура. Температурная зависимость удельного сопротивления определяется степенью p в уравнении, значение которой, так же, как и значение степени m , связано с механизмом прыжковой проводимости.

Прологарифмируем обе части уравнения (1) и

выполним замену $z = \frac{1}{kT}$

$$\ln \rho = \ln A + m \cdot \ln T + \left(\frac{T_0}{T}\right)^p$$

$$z = \frac{1}{kT} \rightarrow T = \frac{1}{kz} \rightarrow \frac{1}{T} = kz$$

$$\ln \rho = \ln A + m \cdot \ln \frac{1}{kz} + (T_0 k z)^p$$

Продифференцируем по z обе части полученного выражения

$$\frac{d(\ln \rho)}{dz} = \frac{d}{dz} \left(\ln A + m \cdot \ln \frac{1}{kz} + (T_0 k z)^p \right)$$

$$\frac{d(\ln \rho)}{dz} = \frac{d}{dz} (-m \cdot \ln(kz)) + (T_0 k)^p \cdot p \cdot z^{p-1}$$

$$\frac{d(\ln \rho)}{dz} = -\frac{m \cdot k}{k \cdot z} + (T_0 k)^p \cdot p \cdot \frac{z^p}{z}$$

Выполним обратную замену

$$\frac{d(\ln \rho)}{d\left(\frac{1}{kT}\right)} = -m \cdot k \cdot T + (T_0 k)^p \cdot p \cdot \frac{\left(\frac{1}{kT}\right)^p}{\frac{1}{kT}}$$

$$\frac{d(\ln \rho)}{d\left(\frac{1}{kT}\right)} = -m \cdot k \cdot T + (T_0 k)^p \cdot p \cdot \left(\frac{1}{kT}\right)^p \cdot k \cdot T$$

Правая часть полученного уравнения представляет собой энергию локализации носителей заряда

$$E_{loc} = \frac{d(\ln \rho)}{d\left(\frac{1}{kT}\right)}. \quad (2)$$

$$E_{loc} = -m \cdot k \cdot T + (T_0 k)^p \cdot p \cdot \left(\frac{1}{kT}\right)^p \cdot k \cdot T$$

Разделим обе части уравнения на kT

$$\frac{E_{loc}}{k \cdot T} = -m + (T_0 k)^p \cdot p \cdot \left(\frac{1}{kT}\right)^p$$

$$\frac{E_{loc}}{k \cdot T} + m = (T_0 k)^p \cdot p \cdot (kT)^{-p}$$

$$\frac{E_{loc}}{k \cdot T} + m = p \cdot \left(\frac{T_0 k}{kT}\right)^p$$

Прологарифмировав обе части полученного уравнения, получим выражение, линейное относительно логарифма температуры

$$\ln\left(\frac{E_{loc}}{k \cdot T} + m\right) = \ln p + p \cdot \ln T_0 - p \cdot \ln T$$

$$\ln\left(\frac{E_{loc}}{k \cdot T} + m\right) = \ln p + p \cdot \ln T_0 + p \cdot \ln \frac{1}{T} \quad (3)$$

Таким образом, параметр p представляет собой угол наклона прямой, описываемой уравнением (3) [4].

IV. КОМПЬЮТЕРНАЯ ПРОГРАММА

Программа для расчёта параметров прыжковой проводимости [5] основана на математической модели, описанной выше. Она позволяет вычислить пары значений (m , p), характеризующих тип прыжковой проводимости, а также значение энергии локализации носителей заряда E_{loc} и характеристическую температуру T_0 в соответствующем температурном диапазоне. Вводными данными является измеренная температурная зависимость удельного сопротивления образца. При разработке программы производная в уравнении (2) была заменена разностным отношением. Программный код написан на языке на языке PascalABC.Net.

Авторы программы заведомо отказались от применения метода наименьших квадратов, чтобы избежать усреднения и учесть вклад каждой точки температурной зависимости удельного сопротивления для каждого образца.

Для апробации программы на способность выявлять механизмы прыжковой проводимости были взяты образцы манганитов $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{O}_3$ и $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{O}_3$ [3]. Результаты её работы хорошо согласуются с результатами, полученными ранее в работах [2, 7].

V. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Различают следующие типы прыжковой проводимости: прыжковая проводимость по ближайшим соседям (ППБС) и прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка (ПППДП). Оба типа могут протекать в двух режимах – в адиабатическом и не адиабатическом. Для ППБС $m=1$, $p=1$ в адиабатическом режиме и $m=\frac{3}{2}$, $p=1$ – в неадиабатическом.

ПППДП проходит по механизму Мотта ($m=\frac{25}{4}$, $p=\frac{1}{4}$ или $m=\frac{21}{4}$, $p=\frac{1}{4}$) и по механизму Шкловского-Эфроса ($m=\frac{9}{2}$, $p=\frac{1}{2}$ или $m=\frac{5}{2}$, $p=\frac{1}{2}$) [4,8]. Рассмотрим поведение температурной зависимости удельного сопротивления исследуемых образцов в нулевом магнитном поле.

Согласно результатам работы программы [5], для образца $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.4}\text{Fe}_{0.6}\text{O}_3$ имеет место ПППДП Мотта в температурном диапазоне 250 – 300 К со значениями параметров $m=-\frac{3}{4}$, $p=\frac{1}{4}$ и $m=\frac{1}{4}$, $p=\frac{1}{4}$ и при 170 – 250 К – со значениями $m=\frac{21}{4}$, $p=\frac{1}{4}$ и $m=\frac{25}{4}$, $p=\frac{1}{4}$ (рис. 2).

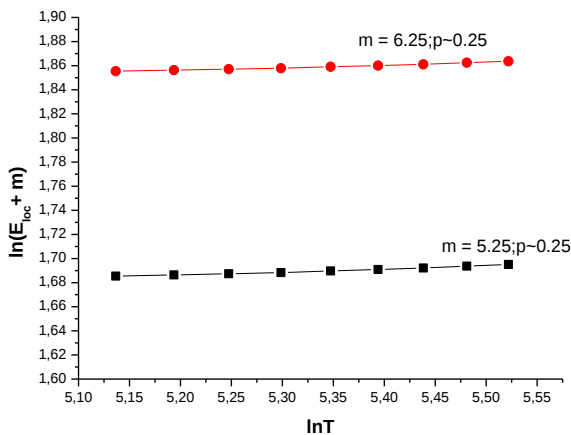


Рисунок 2. График температурной зависимости энергии локализации в логарифмических координатах для образца $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.4}\text{Fe}_{0.6}\text{O}_3$ в интервале температур 170 – 250 К.

В образце $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.2}\text{Fe}_{0.8}\text{O}_3$ наблюдается ПППДП Шкловского-Эфроса со значениями параметров

$m=\frac{1}{2}$, $p=\frac{1}{2}$ при температурах 85 – 295 К, а также

$m=\frac{5}{2}$, $p=\frac{1}{2}$ и $m=\frac{9}{2}$, $p=\frac{1}{2}$ в интервале 70 – 190 К.

Кроме того, в диапазоне 230 – 300 К наблюдается

ПППДП Мотта с параметрами $m=\frac{21}{4}$, $p=\frac{1}{4}$ и $m=\frac{25}{4}$,

$p=\frac{1}{4}$. В образцах $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.3}\text{Fe}_{0.7}\text{O}_3$ и

$\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.1}\text{Fe}_{0.9}\text{O}_3$ прыжковая проводимость программой не обнаружена. Значения характеристической температуры для соответствующих режимов приведены в таблице I (обозначение образцов в таблицах соответствует уровню легирования кальцием и железом, например, $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.3}\text{Fe}_{0.7}\text{O}_3$ – 0507 и т.д.).

Таблица I – Значения характеристической температуры для различных режимов прыжковой проводимости

№	Образец	B, Тл	T, К	m	T ₀ , К
1.	0506	0	250 – 300	-0.75	$4,03 \cdot 10^7$
				0.25	$3,27 \cdot 10^8$
			170 – 250	5.25	$2,87 \cdot 10^{10}$
				6.25	$2,06 \cdot 10^{11}$
		1	130 – 170	1	$2,49 \cdot 10^3$
				1.5	$3,01 \cdot 10^3$
2.	0508	0	245 – 295	0.5	$1,38 \cdot 10^5$
			200 – 300	4.5	$3,64 \cdot 10^6$
			85 – 295	0.5	$3,63 \cdot 10^4$
				2.5	$2,12 \cdot 10^5$
				4.5	$7,103 \cdot 10^6$
			230 – 300	5.25	$2,504 \cdot 10^7$
				6.25	$1,02 \cdot 10^8$

В поле величиной 1 Тл образец $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.4}\text{Fe}_{0.6}\text{O}_3$ демонстрирует ППБС и в адиабатическом, и в не адиабатическом режимах в интервале температур 130 – 170 К, а также ПППДП

Шкловского-Эфроса с параметрами $m=\frac{1}{2}$, $p=\frac{1}{2}$ при

$T=245 - 295$ К и $m=\frac{9}{2}$, $p=\frac{1}{2}$ при $T=200 - 300$ К.

Параметры p и m связаны выражением $m=8-p(7+q)$, где q – параметр, описывающий волновую функцию локализованных электронов. К примеру, в температурном интервале 70 – 190 К для значений $m=\frac{5}{2}$, $p=\frac{1}{2}$ параметр $q=4$, и волновая функция локализованных носителей заряда имеет форму

$\psi_1(r) \propto \frac{1}{r} e^{-\frac{r}{a}}$, а для значений $m=\frac{9}{2}$, $p=\frac{1}{2}$ параметр

$q = 0$, и имеет место волновая функция $\psi_2(r) \propto e^{-\frac{r}{a}}$ [8,9].

Наличие электронов, описываемых волновыми функциями двух типов, наводит на мысль о формировании двумных потенциалов внутри кристаллической решётки исследуемых образцов [10].

Средние значения энергии локализации носителей заряда в исследуемых образцах приведены в таблице II.

Таблица II – Значения энергии локализации носителей заряда в исследуемых образцах при различных внешних условиях

№	Образец	Температура, К	Поле, Тл	Энергия локализации, эВ
1.	0506	115 – 295	0	0,1702
			1	0,1940
2.	0507	35 – 295	0	0,1035
			1	0,1029
3.	0508	45 – 295	0	0,0954
		25 – 296	1	0,0895
4.	0509	95 – 295	0	0,0816
			1	0,0817
		10 – 95	0	- 0,0026
			1	-0,0034

Из таблицы II видно, что энергия локализации электронов уменьшается с увеличением концентрации железа, и при девятидесятипроцентном легировании в низкотемпературном диапазоне принимает отрицательные значения, что может быть связано с нарушением двойного обмена между ионами Mn^{3+} и Mn^{4+} , образованием бесконечного кластера и возникновением фазовых переходов второго рода.

VI. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На примере манганитов перовскитов $La_{0.5}Ca_{0.5}Mn_{1-x}Fe_xO_3$ ($x = 0.6; 0.7; 0.8; 0.9$) показана работа компьютерной программы для определения параметров прыжковой проводимости.

Данная программа позволяет определить температурные интервалы с прыжковой проводимостью, вычислить пары значений параметров (m , p), соответствующих тому или иному типу прыжковой проводимости, и значения энергии локализации носителей заряда и характеристической температуры.

Программный код выявил наличие конкурирующих механизмов в одном и том же температурном диапазоне, что даёт представление о качественном составе проводимости или свидетельствует о формировании двумных потенциалов внутри кристаллической решётки исследуемых образцов.

Описанная программа выявила уменьшение энергии локализации электронов с увеличением концентрации железа и наличие в образце $La_{0.5}Ca_{0.5}Mn_{0.1}Fe_{0.9}O_3$ отрицательных значений в диапазоне 10 – 95 К, что связано с нарушением двойного обмена между ионами Mn^{3+} и Mn^{4+} и может свидетельствовать об образовании бесконечного кластера и возникновении фазовых переходов второго рода.

БИБЛИОГРАФИЯ

- [1] Галеева А.В. Исследование проводимости полупроводниковых структур методом импедансной спектроскопии [Текст]: автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук : 01.04.10 / Галеева Александра Викторовна. – М., 2011. – 23 с. URL: <https://www.dissercat.com/content/issledovanie-provodimosti-poluprovodnikovyx-struktur-metodom-impedansnoi-spektroskopii/read>
- [2] Таран, С.В. Электропроводность и магнитные свойства манганитов перовскитов $La_{0.5}Ca_{0.5}Mn_{0.5}Fe_{0.5}O_3$ и $La_{0.7}Ca_{0.3}Mn_{0.5}Fe_{0.5}O_3$: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.07 / Таран Сергей Викторович. – Белгород, 2017. – 146 с.
- [3] Некрасова, Ю.С. Исследование магнитных свойств и механизмов электропроводности образцов $La_{1-x}Sr_xMn_{1-y}Fe_yO_3$ ($x = 0.3$; $y = 0.15, 0.20, 0.25$) // дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.07 / Некрасова Юлия Сергеевна. – Белгород, 2012. – 125 с.
- [4] Zakhvalinskii V.S. Variable-range Hopping Conductivity of $La_{1-x}Sr_xMn_{1-y}Fe_yO_3$ / Zakhvalinskii V.S., Lashkul A.V., Lisunov K.G., Lähderanta E., Nekrasova Yu.S., Laiho R., Stamov V.N., Petrenko P.A. // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2011. – Т. 23. – № 1. – С. 015802. URL: https://www.researchgate.net/publication/231102390_Variable-range_hopping_conductivity_of_La1_xSr_xMn1_yFe_yO3
- [5] «Программа расчёта параметров прыжковой проводимости»: свидетельство о государственной регистрации прог. для ЭВМ № 2024685520, Российская Федерация / М.С. Козлова, Ю.С. Некрасова, В.С. Захвалинский; правообладатель М.С. Козлова. – Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 30.10.2024. URL: <https://onlinepatent.ru/software/2024685520/>
- [6] Козлова, М.С. Автоматизация процесса выявления механизмов прыжковой проводимости в неупорядоченных системах / М.С. Козлова, Ю.С. Некрасова // Молодёжный вестник Новороссийского филиала Белгородского государственного технологического университета им. В. Г. Шухова. 2023. Т. 3. № 3 (11). С. 148-152. URL: <https://rio-nb-bstu.science/ojs/index.php/vestnik-molod/issue/view/12/14>
- [7] Dang N.T. Crystal Structure, Magnetic Properties and Conductivity Mechanisms of $La_{0.7}Ca_{0.3}Mn_{0.5}Fe_{0.5}O_3$ / Dang N.T., Zakhvalinskii V.S., Nekrasova Y.S., Taran S.V., Kozlenko D.P., Kichanov S.E., Savenko B.N., Phan T.L., Thang T.T., Thanh T.D., Khiem L.H., Jabarov S.G. // Ferroelectrics. – 2016. – Т. 501. – № 1. – С. 129-144.
- [8] Mott, N. F. Electron Processes in Non-Crystalline Materials / N.F. Mott and E.A. Davies. – Oxford: Clarendon, 1979;
- [9] Шкловский, Б.И. Теория протекания и проводимость сильно неоднородных сред [Текст] / Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос / УФН. – 1975. – Т. 117. – Вып. 3. URL: https://ufn.ru/ufn75/ufn75_11/Russian/t7511a.pdf
- [10] Выборнов Е.В. Математическое обоснование расщепления спектра и билакализации состояний при координатном и импульсном туннелировании в одномерных квантовых системах // дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.01.03 / Выборнов Евгений Викторович. – М., 2015. – 120 с. URL: <https://www.hse.ru/data/2015/02/17/1092168615/dis.pdf>

Mathematical and Computer Modeling as a Method for Studying the Hopping Conductivity of Manganites $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ ($x = 0.6; 0.7; 0.8; 0.9$)

V.S. Zakhvalinskii, M.S. Kozlova, Yu.S. Nekrasova

Abstract— The article presents the results of applying a computer program created to identify the mechanisms of hopping conductivity in the doped materials to the study of the electronic properties of manganites $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ ($x = 0.6; 0.7; 0.8; 0.9$). Previously, the program code was tested on the materials $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{O}_3$, $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{O}_3$. The results of its work are in good agreement with the data obtained earlier. According to the results of the program, for the sample $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.4}\text{Fe}_{0.6}\text{O}_3$ in a zero field the Mott variable range hopping conductivity (VRH) at temperatures of 170-300 K is observed. In the $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.2}\text{Fe}_{0.8}\text{O}_3$ sample, the Shklovsky-Efros VRH is observed at 70-295 K and the Mott VRH in the range of 230-300 K. In a field of 1 Tl, the $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.4}\text{Fe}_{0.6}\text{O}_3$ sample demonstrates the hopping conductivity over the nearest neighbors in both adiabatic and non-adiabatic regimes in the temperature range of 130-170 K, as well as the Shklovsky-Efros VRH at $T=200-300$ K. The program did not detect the hopping conductivity in the samples $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.3}\text{Fe}_{0.7}\text{O}_3$ and $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.1}\text{Fe}_{0.9}\text{O}_3$.

Keywords— manganites, hopping conductivity, automation of the research process.

REFERENCES

- [1] [1] Galeeva A.V. Investigation of the conductivity of semiconductor structures by the method of impedance spectroscopy [Text]: abstract of the dissertation. ... PhD in Physics.- Mathematical sciences : 04/01/10/ Galeeva Alexandra Viktorovna. – M., 2011. – 23 p. URL: <https://www.disscat.com/content/issledovanie-provodimosti-poluprovodnikov-struktur-metodom-impedansnoi-spektroskopii/read>
- [2] [2] Taran, S.V. Electrical conductivity and magnetic properties of manganites of perovskites $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{O}_3$ and $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{O}_3$: dis.... PhD in Physics.-math. Sciences : 04/01/07/ Taran Sergey Viktorovich. – Belgorod, 2017. – 146 P.
- [3] [3] Nekrasova, Yu.S. Investigation of the magnetic properties and mechanisms of electrical conductivity of $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Mn}_{1-y}\text{Fe}_y\text{O}_3$ ($x = 0.3; y = 0.15, 0.20, 0.25$) samples // dis.... PhD in Physics. - Math. sciences : 04/01/07/ Nekrasova Julia Sergeevna. – Belgorod, 2012. 125 p.
- [4] [4] Zakhvalinskii V.S. Variable-range Hopping Conductivity of $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Mn}_{1-y}\text{Fe}_y\text{O}_3$ / Zakhvalinskii V.S., Lashkul A.V., Lisunov K.G., Lähderanta E., Nekrasova Yu.S., Laiho R., Stamov V.N., Petrenko P.A. // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2011. – Vol. 23. – No. 1. – S. 015802. URL: https://www.researchgate.net/publication/231102390_Variable-range_hopping_conductivity_of_La1-xSr_xMn1-yFe_yO3
- [5] [5] "Program for calculation the hopping conductivity parameters": certificate of state registration of computer software No. 2024685520, Russian Federation / M.S. Kozlova, Yu.S. Nekrasova, V.S. Zakhvalinskii; copyright holder M.S. Kozlova. – Registered in the Register of Computer Programs on 10/30/2024. URL: <https://onlinepatent.ru/software/2024685520/>
- [6] [6] Kozlova, M.S. Automation of the process of detecting hopping conductivity mechanisms in disordered systems / M.S. Kozlova, Yu.S. Nekrasova // Youth Bulletin of the Novorossiysk branch of the Belgorod State Technological University named after V. G. Shukhov. 2023. Vol. 3. No. 3 (11). pp. 148-152. URL: <https://rio-nb-bstu.science/ojs/index.php/vestnik-molod/issue/view/12/14>
- [7] [7] Dang N.T. Crystal Structure, Magnetic Properties and Conductivity Mechanisms of $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{O}_3$ / Dang N.T., Zakhvalinskii V.S., Nekrasova Y.S., Taran S.V., Kozlenko D.P., Kichanov S.E., Savenko B.N., Phan T.L., Thang T.T., Thanh T.D., Khiem L.H., Jabarov S.G. // Ferroelectrics. – 2016. – Vol. 501. – No. 1. – pp. 129-144.
- [8] [8] Mott, N. F. Electron Processes in Non-Crystalline Materials / N.F. Mott and E.A. Davies. – Oxford: Clarendon, 1979.
- [9] [9] Shklovsky, B.I. The percolation theory and conductivity of strongly inhomogeneous media [Text] / B.I. Shklovsky, A.L. Efros // UFN. – 1975. – Vol. 117. – Issue 3. URL: https://ufn.ru/ufn75/ufn75_11/ufn7511a.pdf
- [10] [10] Vybornov E.V. Mathematical substantiation of spectrum splitting and bilocalization of states during coordinate and pulse tunneling in one-dimensional quantum systems.... PhD in Physics.- Mathematical sciences : 01.01.03 / Vybornov Evgeny Viktorovich. – M., 2015. – 120 p. URL: <https://www.hse.ru/data/2015/02/17/1092168615/dis.pdf>

Manuscript received on the 12-th of June 2025.

V.S. Zachvalinsky, Ph.D., Professor, Leading Researcher at the Laboratory of Advanced Materials and Technologies of the National Research University of Belarus, 85 Pobedy St., Belgorod, Russia (e-mail: v_zaxval@mail.ru)

Yu.S. Nekrasova, Ph.D., Associate Professor of the Department of Higher Mathematics at BSTU.46 Kostyukova St., Belgorod, Russia, Shukhov (e-mail: yulya_nekrasova@mail.ru).

M.S. Kozlova, a postgraduate student at the Department of Higher Mathematics of the BSTU named after V.G. Shukhov, 46 Kostyukova str., Belgorod, Russia (e-mail: margaret_36-37@mail.ru).

This work was realized in the framework of the Program "Priority 2030" on the base of the Belgorod State Technological University named after V.G. Shukhov High Technology Center.