МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
ДАГЕСТАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ИМ. Х.И. АМИРХАНОВА
ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ЧЕЛЯБИНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ, КРИТИЧЕСКИЕ И НЕЛИНЕЙНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

СБОРНИК ТРУДОВ

международной конференции
посвященной 90-летию Дагестанского
государственного университета

12-17 сентября 2021 г., Махачкала

Махачкала 2021

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ, КРИТИЧЕСКИЕ И НЕЛИНЕЙНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

Сборник трудов международной конференции 12-17 сентября 2021 г., Махачкала

В настоящий сборник включены материалы, представленные на международную конференцию "Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах".

Конференция проводится Министерством науки и высшего образования РФ, Институтом физики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, Дагестанским государственным университетом, Челябинским государственным университетом.

Материалы воспроизведены с авторских оригиналов, в связи с чем Оргкомитет конференции не несет ответственности за допущенные опечатки и стилистические погрешности**.**

© Институт физики Дагестанского ФИЦ РАН, 2021.

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Сопредседатели: чл.-корр. РАН Камилов И.К., Махачкала, Россия
чл.-корр. РАН Муртазаев А.К., Махачкала, Россия
Бучельников В.Д., Челябинск, Россия

Зам. председателя: Ашурбеков Н.А., Махачкала, Россия
Каллаев С.Н., Махачкала, Россия
Таскаев С.В., Челябинск, Россия

Секретарь: Абакарова Н.С., Махачкала, Россия

Члены оргкомитета

академик РАН Асхабов А.М., Сыктывкар, Россия
академик РАН Бражкин В.В., Троицк, Россия
академик РАН Кведер В.В., Черноголовка, Россия
академик РАН Садовский М.В., Екатеринбург, Россия
чл.-корр. РАН Арсеев П.И., Москва, Россия
чл.-корр. РАН Борисов А.Б., Екатеринбург, Россия
чл.-корр. РАН Хохлов Д.Р., Москва, Россия
Абдулагатов И.М., Махачкала, Россия
Батаев Д.К.-С., Грозный, Россия
Бычков И.В., Челябинск, Россия
Вахитов Р.М., Уфа, Россия
Воронцов-Вельяминов П.Н., Санкт-Петербург, Россия
Звездин А.К., Москва, Россия
Кугель К.И., Москва, Россия
Рабаданов М.Х., Махачкала, Россия
Рыжов В.Н.,Троицк, Россия
Шавров В.Г., Москва, Россия
Skokov K.P., Darmstadt, Germany
Yu S.-C., Cheongju, South Korea
Zhukov A.P., San Sebastian, Spain

ЛОКАЛЬНЫЙ И ПРОГРАММНЫЙ ОРГКОМИТЕТ

чл.-корр. РАН Муртазаев А.К. – председатель
Хизриев К.Ш. – зам. председателя
Абакарова Н.С. – секретарь
Алиев А.М.
Бабаев А.Б.
Бадиев М.К.
Ибаев Ж.Г.
Курбанова Д.Р.
Магомедов М.А.
Мутайламов В.А.
Муртазаев К.Ш.
Рамазанов М.-Ш.К.
Сайпулаева Л.А.

Содержание

Пленарные доклады..... 5

Секция А1. Моделирование фазовых переходов и критических явлений..... 31

Секция Б2. Общие вопросы физики фазовых переходов и критических явлений..... 110

Секция В2. Топологические материалы, магнитотранспорт и спинтроника..... 154

Секция А3. Материалы с памятью формы, магнитокалорические материалы, мультиферроики 205

Секция Б3. Нелинейные явления и хаос в конденсированных средах…… 255

Авторский список..... 299

Пленарные доклады

Статическое критическое поведение моделей Поттса с вмороженным беспорядком

А.К.Муртазаев [1, 2], А.Б.Бабаев [1, 3]
[1] *Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*
[2] *Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН, Махачкала, Россия*
[3] *Дагестанский государственный педагогический университет, Махачкала, Россия*
e-mail: b_albert78@mail.ru

Изучение статического критического поведения разбавленных спиновых систем с вмороженным беспорядком является одной из актуальных задач физики конденсированных сред. Такие системы интенсивно исследуются экспериментально, теоретически, и в последнее время методами вычислительной физики [1]. Исследования [2] показали, что присутствие замороженных примесей изменяет критические свойства системы, если критический показатель теплоемкости α однородной системы положителен, т.е. теплоёмкость в критической точке расходится. Это утверждение известно, как критерий Харриса. Данному критерию удовлетворяют только системы, эффективный гамильтониан которых вблизи критической точки подобен модели Изинга. Отметим, что модель Изинга соответствует модели Поттса с числом состояний спина q=2. Критерий Харриса неприменим к двумерной модели Изинга в силу того, что α=0. Детальное рассмотрение этого случая [3] позволило прийти к выводу, что влияние примеси затрагивает только поведение теплоемкости, в то время как остальные термодинамические и корреляционные функции не изменяют своего критического поведения. В тоже время в случае двумерных моделей Поттса с q=3 и q=4 примеси должны быть существенными для критического поведения, так как их критический индекс α>0. Выяснение этого вопроса является главной целью этой работы.

В работе рассматриваются двумерные модели Поттса с числом состоянии спина q=4 на квадратной решетке. При построении такой модели необходимо иметь в виду следующие особенности: в узлах кубической решётки расположены спины S_i, которые могут находиться в одном из $q \geq 2$ состояний и немагнитные примеси (вакансии); немагнитные примеси распределены случайно и фиксированы (канонический способ) на различных узлах решетки (quenched disorder); энергия связи между двумя узлами равна нулю, если они находятся в разных состояниях (безразлично, в каких именно) или же, если хотя бы в одном узле находится немагнитный атом, и равна $|J|$, если взаимодействующие узлы находятся в одинаковых состояниях (опять же, все равно в каких именно). С учетом этих особенностей микроскопический гамильтониан такой системы может быть, представлен в виде [4]

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j), \quad S_i = 1, 2, 3, 4 \qquad (1)$$

где $\delta(S_i, S_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j, \\ 0, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases}$ и $\rho_i = \begin{cases} 1, & \text{если в узле расположен спин} \\ 0, & \text{если в узле расположена немагнитная примесь} \end{cases}$.

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями при концентрациях спинов p=1.00; 0.90; 0.8. Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины находились в одном состоянии.

Для определения критических температур и анализа характера фазового перехода использовался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [5, 6]. Определенные методом кумулянтов Биндера температуры фазовых переходов $T_l(p)$ в единицах $|J|/k_B$ для модели Поттса с q=4 равны: $T_l(1.00)=0.910(1)$, $T_l(0.90)=0.77(1)$, $T_l(0.80)=0.62(2)$. Для определения статических критических индексов (КИ) теплоемкости α, восприимчивости γ и намагниченности β использовалась теория конечно-размерного скейлинга [7]. Для расчета критических индексов α, β, γ и ν строились зависимости C, m, χ, и параметра V_n от L. Анализ данных, выполненный с использованием нелинейного метода наименьших квадратов, позволил определить значения α/ν, β/ν, γ/ν и 1/ν. Затем, используя значения ν, полученные в рамках данного исследования, определялись α, β и γ. Следует отметить, что во многих численных исследованиях неупорядоченных систем, в отличие от наших, эти индексы в основном определялись, используя критический индекс ν полученный на основе различных скейлинговых соотношений. Анализ данных, выполненный с использованием нелинейного метода наименьших квадратов, позволил определить значения α=0.665(1), β=0.083(1), γ=1.165(1), ν=0.664(1) для однородной системы (p=1.0) и α=0.67(1), β=0.09(1), γ=1.17(1), ν=0.67(1) для слабо разбавленной системы. Полученные критические индексы в пределах погрешности удовлетворяют соотношениям теории конечно-размерного скейлинга и внесение небольшого беспорядка в виде немагнитных примесей приводит к незначительному их изменению.

Таким образом, полученные данные в результате наших исследований свидетельствуют о том, что критическое поведение примесной модели Поттса с q=4 описывается новым набором критических индексов.

[1] M. Henkel, M. Pleimling, Nonequilibtium phase transitions, Springer (2010).
[2] A.B. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
[3] Vik. Dotsenko, Vl. Dotsenko, Adv. Phys. **32**, 129 (1983).
[4] F.Y. Wu, Exactly Solved Models, World Scientific, London (2009).
[5] K. Eichhorn, K. Binder. J. Phys.: Cond. Matter **8**, 5209 (1996).
[6] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, ЖЭТФ **159**, 1041 (2021).
[7] D. Loison, Physics Letters A **257**, 83 (1999).

Необычные полуметаллические состояния в системах с волнами спиновой и зарядовой плотности

К.И.Кугель [1,2], А.Л.Рахманов [1,3,4], А.В.Рожков [1,3], А.О.Сбойчаков [1]
[1] *Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, Москва, Россия*
e-mail: klimkugel@gmail.com
[2] *Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики", Москва, Россия*
[3] *Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Россия*
[4] *Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова, Москва, Россия*

Полуметалл (по-английски, half-metal) представляет собой систему с полной спиновой поляризацией носителей заряда на поверхности Ферми. Такая поляризация обычно возникает из-за сильных электрон-электронных корреляций. Как следствие, известные на сегодняшний день полуметаллы содержат атомы переходных металлов [1]. Переходные металлы могут, однако, представлять проблемы для биосовместимых приложений: многие переходные металлы токсичны или алергенны. В связи с этим представляется актуальным вопрос о возможности создания полуметаллических систем на основе лёгких атомов. При этом, конечно же, придётся пожертвовать сильными корреляциями, т. к. взаимодействие между электронами в материалах из лёгких атомов не слишком велико.

Недавно нами было продемонстрировано [2], что легирование материала, у которого поверхность Ферми обладает выраженным свойством нестинга, также стабилизирует полуметаллические состояния. Данный механизм не требует сильного взаимодействия, поэтому наличие атомов переходных металлов не обязательно. В изучаемых нами моделях в отсутствие легирования наблюдается волна плотности (спиновой или зарядовой). Волна плотности формируется носителями из четырёх зон. Каждая зона характеризуется двумя индексами: зарядовым (электронная/дырочная зона) и спиновым (спин вверх или вниз). Зоны вырождены по спину. Кроме этого, электронная и дырочная поверхности Ферми должны обладать хорошим нестингом. Однако, несмотря на высокую симметрию исходной системы, при легировании дополнительные заряды распределяются по имеющимся зонам неравномерно: только две зоны из четырёх накапливают заряд. В результате такого нарушения симметрии образуется полуметаллическая двухдолинная поверхность Ферми.

Можно показать, что допустимы два типа такого полуметаллического состояния. Первый тип соответствует полной спиновой поляризации электронов и дырок на поверхности Ферми. Второй тип соответствует полной поляризации по отношению к спин-долинному оператору.

В данном докладе будут проанализированы спиновые и спин-долинные токи в исследуемой системе. Из-за нетривиальной поляризации поверхности Ферми перенос заряда должен демонстрировать новые свойства. А именно, нами показано, что электрический ток будет сопровождаться переносом спина или спин-долинного заряда. Иными словами, электрический ток приводит к возникновению спинового или спин-долинного тока. Такое свойство может быть интересно для спинтроники и для спин-долинной электроники [3].

Также нами обсуждаются особенности сверхпроводящего состояния в полуметаллической системе нового типа. Мы покажем, что сверхпроводящий параметр порядка является двухкомпонентным (одна компонента определена в дырочной зоне, а другая – в электронной). Допустимая симметрия параметра порядка – *p*-волна.

Отметим также, что в графене и других двумерных кристаллах с гексагональной решёткой имеются две долины, переходящие друг в друга при некоторых операциях симметрии (долины в графене переходят друг в друга при обращении времени или при отражении относительно определённых кристаллографических осей и др. преобразований). В равновесии при достаточно больших температурах обе долины заполнены электронами одинаковым образом, что гарантирует высокую симметричность равновесного многоэлектронного ансамбля. В частности, у любого электрона в таком ансамбле есть три симметрийных "партнёра": ещё три электрона с той же энергией, но с противоположными значениями спиновой проекции и/или "долинного" квантового числа.

Мы обсуждаем возможность спонтанного нарушения "долинной" и спиновой симметрий в двуслойном AA графене при низких температурах. Используется развитый нами ранее в работах [4, 5] подход к описанию к электронной жидкости в AA графене. При низкой температуре нелегированный AA графен испытывает переход в антиферромагнитное состояние. В докладе будет продемонстрировано, что при легировании данная антиферромагнитная фаза может приобрести новые свойства. А именно, проведённые расчёты указывают, что при некоторых естественных ограничениях, наложенных на межэлектронное взаимодействие, все внесённые в образец при легировании электроны сконцентрируются в одной долине, оставляя вторую свободной от "лишних" носителей. Иными словами, фаза со спонтанно нарушенной междолинной симметрией более выгодна термодинамически, чем высокосимметричное состояние с равномерным распределением электронов по долинам.

В отличие от родительской антиферромагнитной фазы, которая является диэлектриком, легированный AA графен становится проводником. Однако, из-за несимметричного распределения внесённых электронов между долинами поверхность Ферми оказывается "поляризованной" по долинному индексу. Детальный анализ демонстрирует наличие

дополнительной поляризации поверхности Ферми по ещё одному квантовому числу, связанному со спином носителей. Из-за такой двойной поляризации лишь четвёртая часть всей исходной поверхности Ферми оказывается доступной для переноса электрического тока. Поэтому данную фазу естественно называть четверть-металлом по аналогии с полуметаллом, в котором доступна половина состояний высокотемпературной поверхности Ферми [6].

В докладе будут кратко обсуждаться условия стабильности четверть-металлического состояния, а также свойства новой фазы в контексте современных исследований в области спинтроники.

Наши рассуждения показывают, что материал, в котором можно было бы реализовать спин-долинный полуметалл, должен удовлетворять ряду условий: достаточно сильное кулоновское взаимодействие, наличие нестинга, а также возможность контроля качества нестинга с помощью внешнего воздействия. В наших моделях качество нестинга управлялось легированием. В экспериментах для этого часто используется также давление или магнитное поле. Поиск подходящих веществ потребует согласованных усилий как теоретиков, так и экспериментаторов. Но даже в том случае, когда вещество-кандидат идентифицировано, исчерпывающе продемонстрировать полуметалличность электронного состояния может оказаться не так уж и просто. В качестве возможного косвенного диагностического инструмента для идентификации полуметалличности мы предложили использовать неупругое нейтронное рассеяние [7].

[1] А.О.Сбойчаков, А.В.Рожков, А.Д.Хохлов, К.И.Кугель, А.Л.Рахманов, Письма в ЖЭТФ **112**, 764 (2020).
[2] A.V.Rozhkov, A.L.Rakhmanov, A.O.Sboychakov, K.I. Kugel, F. Nori, Phys. Rev. Lett. **119**, 107601 (2017).
[3] A.L.Rakhmanov, A.O.Sboychakov, K.I.Kugel, A.V.Rozhkov, F.Nori, Phys. Rev. B 98, 155141 (2018).
[4] A.L.Rakhmanov, A.V.Rozhkov, A.O.Sboychakov, F.Nori, Phys. Rev. Lett. **109**, 206801 (2012).
[5] A.O. Sboychakov, A.L.Rakhmanov, A.V.Rozhkov, F.Nori, Phys. Rev. B **87**, 121401 (2013).
[6] A.O.Sboychakov, A.L.Rakhmanov, A.V.Rozhkov, F.Nori, Phys. Rev. B **103**, L081106 (2021).
[7] D.A.Khokhlov, A.L.Rakhmanov, A.V.Rozhkov, A.O.Sboychakov, Phys. Rev. B **101**, 235141 (2020).

Особенности неравновесного критического поведения систем, описываемых трехмерной моделью Гейзенберга

В.В.Прудников, П.В.Прудников, А.С. Лях
Омский государственный университет им.Ф.М.Достоевского, Омск, Россия
e-mail: prudnikv@univer.omsk.ru

Системы, демонстрирующие фазовые переходы второго рода, относятся к системам с медленной динамикой из-за аномально больших времен релаксации вблизи критической температуры. В результате, их неравновесное поведение на временах меньших времени релаксации демонстрирует свойства старения для двухвременных характеристических функций, нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ), зависимость от типа начальных состояний [1]. Трехмерная классическая модель Гейзенберга является одной из традиционных статистических моделей, используемых для описания фазовых переходов в самых различных спиновых системах, в частности, в таких переходных металлах как Fe, Co, Ni и их сплавах. Статическое критическое поведение систем, описываемое данной моделью, исследовалось самыми различными методами и в различных приближениях (см. обзор [2]). Значительно меньшее число работ посвящено исследованию критической динамики (см. монографию [3]) и изучению неравновесного критического поведения модели [4].

Мы представляем результаты Монте-Карло исследования особенностей неравновесного критического поведения спиновых систем, описываемых трехмерной моделью Гейзенберга. Осуществлено изучение влияния различных начальных состояний, магнитной анизотропии и дефектов структуры на неравновесное критическое поведение классической трехмерной модели Гейзенберга.

Гамильтониан ферромагнитной модели Гейзенберга с анизотропией типа «легкая ось» задается выражением

$$H = -J \sum_{<i,j>} [(1-\Delta)(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z], \qquad (1)$$

где $J > 0$ характеризует короткодействующее обменное взаимодействие между спинами $\vec{S}_i$, зафиксированными в узлах простой кубической решетки, Δ - параметр анизотропии. Спин $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ задается как классический единичный вектор. При $\Delta = 0$ реализуется изотропная модель Гейзенберга, а при $\Delta \neq 0$ – анизотропная модель. В данной работе применялось значение $\Delta = 0{,}63$. Для трехмерной изотропной модели использовалось определенное в работе [5] значение критической температуры T_c= 1.44292(8), а для трехмерной анизотропной модели с Δ =

0,63 нами была рассчитана критическая температура T_c = 1.64497(45) методом кумулянта Биндера.

В качестве вычисляемых характеристик неравновесного процесса выступают такие величины как намагниченность

$$\overrightarrow{M}(t)=\frac{1}{V}\int d^d x\left\langle \vec{S}(x,t)\right\rangle =\left\langle \frac{1}{N_s}\sum_{i=1}^{N_s}\vec{S}_i(t)\right\rangle , \qquad (2)$$

($N_s = L^3$ характеризует число спинов в решетке с линейным размером L) двухвременная корреляционная функция

$$C(t,t_w)=\left\langle \frac{1}{N_s}\sum_{i=1}^{N_s}\vec{S}_i(t)\vec{S}_i(t_w)\right\rangle -\overrightarrow{M}(t)\overrightarrow{M}(t_w), \qquad (3)$$

и динамическая восприимчивость:

$$\chi(t,t_w)=\frac{1}{TN_s}\sum_{i=1}^{N_s}\left\langle \vec{S}_i(t)\Delta\vec{S}_i(t_w)\right\rangle , \quad \Delta\vec{S}_i(t_w)=\sum_{s=1}^{t_w}\left[\overrightarrow{S_i^{\parallel}}(s)-\vec{S}_i^{W}(s)\right], \qquad (4)$$

где $\vec{S}_i^{W}=\vec{S}_i^{\parallel}th(\frac{\Delta H_i}{2T})$. Угловые скобки в (2)-(4) обозначают статистическое усреднение по реализациям начального состояния.

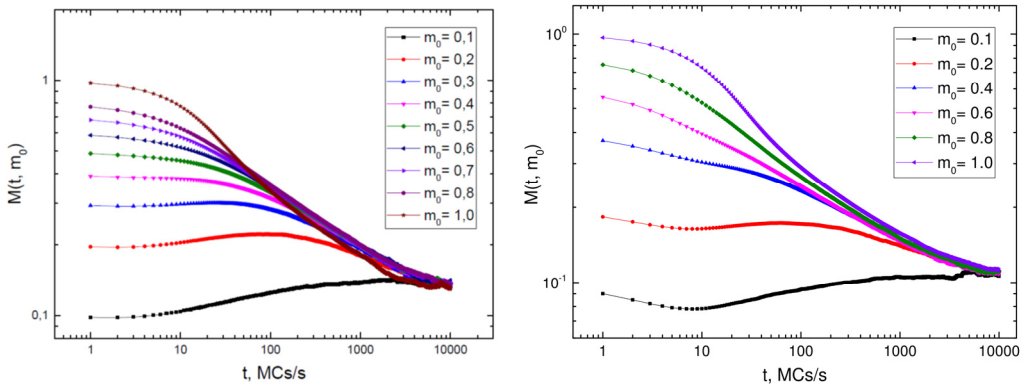


Рис. 1. Графики критической релаксации намагниченности M(t) с различными значениями начальной намагниченности m_0 для изотропной (слева) и анизотропной (справа) моделей Гейзенберга.

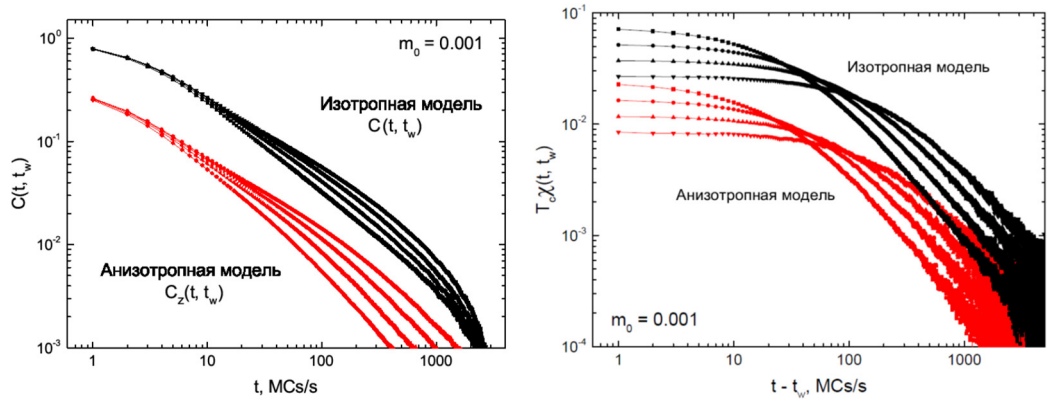


Рис. 2. Сопоставление двухвременных зависимостей автокорреляционной функции $C(t,t_w)$ (слева) и динамической восприимчивости $T_c\chi(t,t_w)$ (справа) для изотропной и анизотропной моделей Гейзенберга при их эволюции из высокотемпературного (m_0=0,001) начального состояния для различных времен ожидания t_w.

Анализ временной зависимости намагниченности $M(t,m_0)$, автокорреляционной функции $C(t,t_w)$ и динамической восприимчивости $T_c\chi(t,t_w)$ (рис.1,2) для изотропной модели Гейзенберга показал существенное влияние начальных состояний m_0 на релаксацию намагниченности и эффекты старения в поведении автокорреляционной функции и восприимчивости, характеризующиеся аномальным замедлением релаксации и корреляции в системе с ростом времени ожидания t_w.

Исследование анизотропной модели Гейзенберга показало (рис. 1, 2), что в долговременном режиме поведение намагниченности, автокорреляционной функции и восприимчивости характеризуется критическими показателями трехмерной модели Изинга с более быстрым временным спаданием автокорреляционной функции и восприимчивости, чем для изотропной модели.

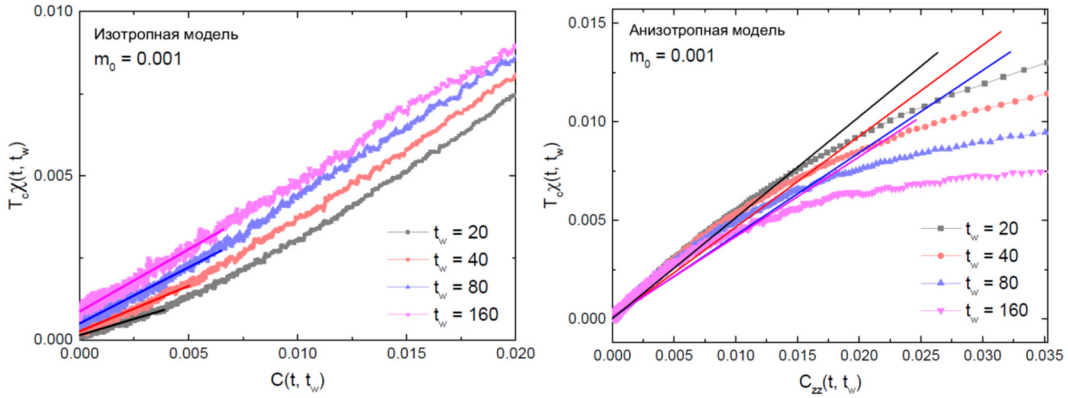


Рис. 3. Графики параметрической зависимости динамической восприимчивости от автокорреляционной функции для изотропной (слева) и анизотропной (справа) моделей Гейзенберга, позволяющие определить значения ФДО $X(t_w)$ при $C \to 0$.

Наряду с критическими показателями новой универсальной характеристикой неравновесного критического поведения систем является предельное флуктуационно-диссипативное отношение (ФДО) X^∞. Для расчета ФДО для изотропной и анизотропной моделей Гейзенберга при их эволюции из высокотемпературного начального состояния была построена (рис.3) параметрическая зависимость $T_c\chi(t,t_w)$ от автокорреляционной функции $C(t,t_w)$ и ФДО как функция времени ожидания $X(t_w) = \lim_{t\to\infty} X(t,t_w)$ может быть определено на основе соотношения $X(t_w) = \lim_{C\to 0} \frac{T_c \partial\chi(t,t_w)}{\partial C(t,t_w)}$.

Применение к значениям ФДО $X(t_w)$ процедуры линейной аппроксимации, а затем экстраполяции $X(t_w \to \infty)$ позволило определить предельные значения ФДО $X^\infty = 0.383(6)$ для изотропной и $X^\infty = 0.392(7)$ анизотропной моделей Гейзенберга. Полученное значение предельного ФДО для анизотропной модели хорошо согласуется со значением $X^\infty = 0.391(12)$ для трехмерной модели Изинга, рассчитанным в статье [6] тем же методом, что и в данной работе.

Осуществлено также исследование влияния точечных дефектов структуры при спиновых концентрациях p=0.8 и p=0.6 на неравновесное критическое поведение трехмерной изотропной и анизотропной моделей Гейзенберга при их эволюции из различных начальных состояний. Показано, что для изотропной модели присутствие дефектов структуры сказывается на характеристиках неравновесного критического поведения лишь при эволюции из низкотемпературного начального состояния, приводя к аномально сильному замедлению автокорреляционной функции. Данные особенности в поведении автокорреляционной функции характеризуются эффектами "сверхстарения" с показателем "сверхстарения" μ=2.6(1) для системы с p=0.8 и μ = 2.9(1) для системы с p=0.6 и связаны с пиннингом доменных стенок на дефектах структуры в процессе неравновесного изменения доменной структуры системы. При эволюции из высокотемпературного начального состояния дефекты структуры приводят к усилению эффектов старения в режиме старения, а в долговременном режиме их влияние оказывается несущественным.

При исследовании неравновесного критического поведения структурно неупорядоченной анизотропной модели Гейзенберга с анизотропией типа "легкая ось" выявлено, что присутствие дефектов изменяет характеристики этой модели при эволюции как из высокотемпературного, так и низкотемпературного начальных состояний. При эволюции из высокотемпературного начального состояния дефекты структуры в режиме старения приводят к усилению эффектов старения, а в долговременном режиме их влияние характеризуется изменением критических показателей неравновесного поведения со значениями, соответствующими структурно неупорядоченной трехмерной модели Изинга. При эволюции анизотропной модели из низкотемпературного начального состояния выявлено аномально сильное замедление автокорреляционной функции, обусловленное эффектами "сверхстарения".

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ.

[1] В.В. Прудников, П.В.Прудников, М.В. Мамонова, УФН **187**, 817 (2017).
[2] A. Pelissetto, E. Vicari, Phys. Reports **368**. 549 (2002).
[3] В.В. Прудников, П.В. Прудников, А.Н. Вакилов, Теоретические методы описания неравновесного критического поведения структурно неупорядоченных систем, Москва: ФИЗМАТЛИТ (2013).
[4] В.В. Прудников. П.В. Прудников, А.С. Лях. ФТТ **62**, 732 (2020).
[5] K. Chen, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau, Phys. Rev. B **48**, 3249 (1993).
[6] P.V. Prudnikov, V.V. Prudnikov, E.A. Pospelov, P.N. Malyarenko, A.N. Vakilov, Prog. Theor. Exp. Phys. **2015**, 053A01 (2015).

Эффект Холла в сплавах Гейслера с магнитной памятью формы при мартенситном переходе

А.Б.Грановский [1,2], М.И. Блинов [1], В.Н. Прудников [1]
[1] *Физический факультет Московского Государственного Университета им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2] *Институт Теоретической и Прикладной Электродинамики РАН, Москва, Россия*
e-mail: gran60@mail.ru

Сплавы Гейслера обладают многофункциональными и важными для разнообразных практических применений свойствами, что и определяет непрерывно возрастающий интерес к этим системам. Тройные сплавы семейства Ni-Mn-X, где X=Ga, In, Sb, и также четверные сплавы Ni-Mn-X-Z, где Z-легирующий элемент, определенного концентрационного состава испытывают мартенситный переход (МП) из высокотемпературной кубической фазы (аустенит) в низкотемпературную фазу с тетрагональными искажениями (мартенсит). Этот переход может быть магнитоиндуцированным, сопровождаться или не сопровождаться изменением магнитного порядка, и он ответственен за многие свойства, в частности за гигантские деформации, гигантский магнитокалорический эффект, гигантский аномальный эффект Холла (АЭХ), магнитный эффект памяти формы и др. Недавно, в сплавах семейства Ni-Mn-Ga и Ni-Mn-In обнаружены скирмионы и соответствующий им топологический эффект Холла.

Принято считать, что МП связан с действием коллективного эффекта Яна-Теллера, при котором выйгрыш в энергии за счет понижения симметрии решетки компенсируется проигрышем в энергии электронной подсистемы. Хотя ряд экспериментальных фактов и теоретические расчеты подтверждают эту концепцию, существуют данные ей противоречащие. Так, пропорциональный плотности состояний на уровне Ферми электронный вклад в теплоемкость в сплавах Ni-Mn-In незначительно меняется при МП, также малы изменения магнитооптического эффекта Керра, не найден электронный вклад в магнитокалорический эффект. Это указывает на достаточно сложный, и до конца непонятый, характер перестройки электронной структуры при МП. Одними из наиболее эффективными зондами-индикаторами фазовых переходов и изменений электронной и магнитной структуры являются магнитотранспортные эффекты, такие как магнитосопротивление и эффект Холла. Изучение аномального эффекта Холла (АЭХ), являющегося центральным в группе спонтанных гальваномагнитных явлений и ярким представителем спин-зависящих явлений переноса, имеет и самостоятельное значение, так как до сих пор продолжаются дискуссии о роли различных механизмов в

формировании этого эффекта, особенно в сплавах Гейслера ([1-4] и ссылки в этих работах).

В докладе анализируются экспериментальные данные о поведении коэффициентов нормального и аномального эффектов Холла сплавов $Ni_{48}Co_2Mn_{35}In_{15}$, $Ni_{50}Mn_{34.8}In_{15.2}$, $Ni_{50}Mn_{35}In_{15-x}Si_x$ (x = 1.0, 3.0, 4.0), $Ni_{50}Mn_{35}In_{15-x}B_x$ (x = 0, 0.5, 0.75), $Ni_{47.3}Mn_{0.6}Ga_{22.1}$, $Ni_{49.7}Fe_{17.4}Co_{4.2}Ga_{28.7}$, $Fe_{48}Mn_{24}Ga_{28}$, $Ni_{49}BiMn_{35}In_{15}B$. В аустенитной фазе температурная зависимость коэффициента АЭХ удовлетворительно описывается развитой теорией АЭХ и имеет место корреляция между температурными зависимостями коэффициента АЭХ и сопротивления. Поведение коэффициента АЭХ и коэффициента нормального эффекта Холла в мартенситной фазе и при МП не имеет универсального характера, сильно зависит от состава и микроструктуры сплавов, В частности, обсуждается изменение типа носителей тока при МП [1], перераспределение d-состояний со спином вдоль и против намагниченности [2], сильные антиферомагнитные корреляции, полевая зависимость коэффициента АЭХ [3].

[1] M. Blinov, A. Aryal, S. Pandey et al., Phys. Rev. B **101**, 094423 (2020).
[2] S. Pandey, M.l Blinov, A. Aryal et al., J. Magn. Magn. Mater. **481**, 25 (2019).
[3] M. I. Blinov, V. Chernenko, V. N. Prudnikov et al., Phys. Rev. B **102**, 064413 (2020).
[4] М. И. Блинов, В. А. Черненко, В. Н. Прудников и др., ЖЭТФ **159**, 546 (2021).

Зеемановское спин-орбитальное взаимодействие и эффективный g-фактор электронов наблюдаемый из квантовых осцилляций в антиферромагнитных металлах

П.Д. Григорьев[1,2], Р. Рамазашвили[3], М.В. Карцовник[4]
[1]*Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Черноголовка, Россия*
e-mail: grigorev@itp.ac.ru
[2] *НИТУ «МИСиС», Москва, Россия*
[3] *Laboratoire de Physique Theorique, Universite de Toulouse, CNRS, UPS, France*
[4] *Walther-Meißner-Institut, D-85748 Garching, Germany*

Используя симметрийные аргументы теоретически показано [1], что во многих металлах с антиферромагнитным упорядочением эффективный g-фактор носителей заряда, например, измеренный по магнитным квантовым осцилляциям, равен нулю. Этот эффект [1] обнуления эффективного g-фактора электронов происходит из-за его сильной зависимости от импульса и даже смены знака на границе магнитной зоны Брюллюэна, образованной антиферромагнитным упорядочением. Эту смену знака и зависимость от импульса g-фактора электронов из-за взаимодействия с соизмеримым антиферромагнитным порядком можно получить прямой диагонализацией электронного гамильтониана в магнитном поле $\boldsymbol{B}$ в антиферромагнетике, который распадается на сумму матриц 4x4:

$$\hat{H} = \sum_k \hat{H}_k,\ \hat{H}_k = \begin{pmatrix} \varepsilon_k - \mu_B(\boldsymbol{B}\cdot\hat{\sigma}) & (\Delta_Q\cdot\hat{\sigma}) \\ (\Delta_Q\cdot\hat{\sigma}) & \varepsilon_{k+Q} - \mu_B(\boldsymbol{B}\cdot\hat{\sigma}) \end{pmatrix}, \qquad (1)$$

где ε_k - исходный закон дисперсии электронов, μ_B - магнетон Бора, $\hat{\sigma}$ - вектор матриц Паули. Когда магнитное поле $\boldsymbol{B}\perp\boldsymbol{\Delta_Q}$, эта матрица 4x4 распадается на две матрицы 2x2, диагонализация которых дает необычную антисимметричную зависимость g-фактора $g(\boldsymbol{k})$ от импульса электронов, отсчитанного от границы магнитной зоны Бриллюэна.

В результате, если замкнутая циклотронная орбита электронов в магнитном поле состоит из двух симметричных половинок траектории (см. рис. 1), для которых g-фактор противоположен, то итоговый g-фактор в таком квантовом состоянии электронов будет

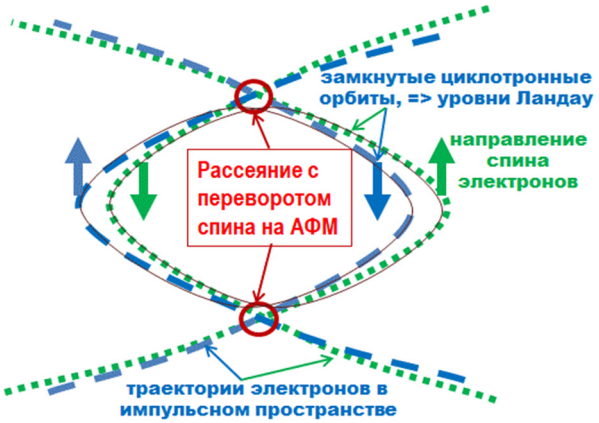


Рис.1 Иллюстрация движения электронов в импульсном пространстве в магнитном поле с рассеянием на спин-зависящем потенциале антиферромагнетика. Левые (или правые) части орбиты получаются смещением на АФМ вектор исходной поверхности Ферми.

равен нулю. Понимание этого эффекта важно для правильной интерпретации экспериментальных данных по магнитным квантовым осцилляциям.

Экспериментальное исследование этого эффекта проводится [1] нами в нескольких соединениях и сравнивается с предложенной теорией. Мы обнаружили, что антиферромагнитное состояние слоистого органического проводника κ-$(BETS)_2FeBr_4$ не проявляет спиновой модуляции осцилляций Шубникова-де Гааза, в отличие от парамагнитного состояния того же материала. Это свидетельствует о вырождении уровней Ландау по спину, предсказанное для антиферромагнитных проводников. Аналогично, мы не находим спиновой модуляции в угловой зависимости медленных осцилляций Шубникова-де Гааза в оптимально легированном электронами купрате $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$. Это указывает на наличие неелевского порядка в этом сверхпроводнике даже при оптимальном легировании.

Наблюдаемый эффект впервые экспериментально демонстрирует еще так называемое зеемановское спин-орбитальное взаимодействие – связь спина электронов с их орбитальным движением из-за зависимости $g(\boldsymbol{k})$. Вблизи границы магнитной зоны Брюллюэна оно оказывается намного сильнее обычного спин-орбитального взаимодействия, что может иметь потенциальные приложения в спинтронике.

[1] R. Ramazashvili, P.D. Grigoriev, T. Helm, F. Kollmannsberger, M. Kunz, W. Biberacher, E. Kampert, H. Fujiwara, A. Erb, J. Wosnitza, R. Gross, M.V. Kartsovnik, npj Quantum Materials **6**, 11 (2021).

Род равновесных фазовых переходов и эпсилон-разложение

В.Н.Удодов
Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова, Абакан, Россия
e-mail: udodov@khsu.ru

Эпсилон-разложение широко применяется в теории критических явлений [1-4] и позволяет вычислить критические индексы в лучшем согласии с экспериментальными и численными данными, чем приближение среднего поля [1-4]. В статье рассмотрен род равновесного фазового перехода (ФП) в рамках ε-разложения. Рассмотрены ФП как при изменении температуры (в нулевом поле), так и при изменении поля при критической температуре. Флуктуации считаются классическими (термодинамическими) [1].

Род равновесного ФП при изменении температуры в нулевом поле определяется формулой [5] (которая обобщает подход Р. Бэкстера [6])

$$r = 1 + S_I - \alpha \ (T \to T_C \ge 0,) \ , \qquad (1)$$

где α – критический индекс теплоемкости (определяется теоретически, экспериментально или в рамках компьютерного моделирования), S_I-функция [5] равна

$$S_I = (1 + A_1 |t|^m) \left(\frac{T_C}{T} \right)^n \quad (0 < T \approx T_C \ge 0, t = T - T_C), \qquad (2)$$

здесь T_C – критическая температура; A_1 – константа любого знака, m, n – положительные константы; T – абсолютная температура. В двух предельных случаях – 1) T_C>0, $T \to T_C$; 2) T_C=0 – S_I-функция постоянна. В первом случае получаются классические результаты (S_I-функция равна единице). Критический индекс теплоемкости для модели Изинга в рамках ε-разложения в первом порядке по ε определяется выражением [7]

$$\alpha \approx S_I - 1 + \varepsilon / 6 \ (T \to T_C \ge 0, \varepsilon = 4 - d) \ , \qquad (3)$$

где d – размерность пространства. Более общая формула для решеточных моделей имеет вид (ε-разложение берем из [4])

$$\alpha \approx S_I - 1 + \varepsilon * (4-n)/(2(n+8)) - \frac{\varepsilon^2 (n+28) * (n+2)^2}{4 * (n+8)^3} - \frac{\varepsilon^3 (n+2)}{8 * (n+8)^5} \left[\begin{matrix} n^4 + 50 * n^3 + 920 * n^2 + 3472 * n + 4800 - \\ -96 * (n+8) * (5n+22) * 1.2 \end{matrix} \right]$$

$$(T \to T_C \ge 0, \varepsilon = 4 - d)$$

, (4)

где n – число компонентов параметра порядка. n =0 – соответствует полимерам; n =1 – соответствует модели Изинга; n =2 – x-y модель; n =3 – модель Гейзенберга [4]. Легко убедиться, что (3) есть частный случай (4). Из (1) и (4) найдем род ФП

$$r \approx 2-\varepsilon*(4-n)/(2(n+8))+\frac{\varepsilon^2(n+28)*(n+2)^2}{4*(n+8)^3}+\frac{\varepsilon^3(n+2)}{8*(n+8)^5}\left[\begin{array}{l} n^4+50*n^3+920*n^2+3472*n+4800- \\ -96*(n+8)*(5n+22)*1.2 \end{array}\right]$$

$(T \to T_C \geq 0, \varepsilon = 4-d)$.

(5)

Для полимеров в трехмерном пространстве получим для рода ФП

$$r \approx 1.687\,(T \to T_C \geq 0,) \quad , \tag{6}$$

в случае пятимерного пространства $d=5, \varepsilon=-1$ и род ФП при изменении температуры для полимеров равен

$$r \approx 2.42 \quad . \tag{7}$$

Это значит, что для полимеров при $d=5$ в точке ФП теплоемкость является непрерывной функцией температуры (скачок теплоемкости равен нулю: переход не является ФП 2-го рода по Эренфесту). В трехмерном пространстве при положительной критической температуре ситуация иная: в точке ФП теплоемкость обращается в бесконечность. В обоих случаях двухфазных состояний нет.

Для **модели Изинга** в трехмерном пространстве получим род ФП

$$r \approx 1.804 \quad . \tag{8}$$

В пятимерном пространстве будет ФП выше 2-го рода

$$r \approx 2.375 \quad . \tag{9}$$

При этом скачок теплоемкости равен нулю (и двухфазных состояний нет).

Для **х-у модели** (n = 2), когда вектор намагниченности может вращаться в фиксированной плоскости, род ФП равен для трехмерного пространства

$$r \approx 1.915 \quad . \tag{10}$$

При этом, если критическая температура положительна, то теплоемкость расходится в точке ФП. Для пятимерного пространства род ФП снова выше второго (теплоемкость непрерывная функция температуры)

$$r \approx 2.33 \quad . \tag{11}$$

Для **модели Гейзенберга** [4] при изменении температуры в трехмерном пространстве род ФП будет равен

$$r \approx 2.015 \quad , \tag{12}$$

в пятимерном пространстве результат изменится

$$r \approx 2.276 \quad . \tag{13}$$

В обоих случаях в точке ФП скачок теплоемкости равен нулю (теплоемкость непрерывная функция температуры и двухфазных состояний нет).

Теперь рассмотрим равновесный ФП при критической температуре при изменении поля, когда род ФП определяется формулой [5]

$$r = 1+1/\delta\,(T = T_C, H \to 0) \quad , \tag{14}$$

здесь δ – критический индекс [1, 4, 5], H – напряженность внешнего поля. В рамках ε-разложения известна формула [4]

$$\delta = 3 + \varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2(n+8)^2}\left[n^2 + 14n + 60\right] + \frac{\varepsilon^3}{4(n+8)^4}\left[n^4 + 30n^3 + 276n^2 + 1376n + 3168\right] (T = T_C,\ H \to 0) \ . \quad (15)$$

Сначала рассмотрим **полимеры** (n = 0), тогда получим из (15)

$$\delta = 3 + \varepsilon + 0.469\varepsilon^2 + 0.193\varepsilon^3 \ (T = T_C,\ H \to 0) \ . \quad (16)$$

Для трехмерного пространства найдем индекс и род ФП

$$\delta = 4.66 \pm 0.2,\ r = 1.21 \ (T = T_C,\ H \to 0) \ . \quad (17)$$

Для пятимерного пространства индекс и род ФП равны для полимеров

$$\delta = 2.28,\ r = 1.44 \ (T = T_C,\ H \to 0) \ . \quad (18)$$

Для **модели Изинга** (n = 1) получим

$$\delta = 3 + \varepsilon + 0.463\varepsilon^2 + 0.185\varepsilon^3 \ (T = T_C,\ H \to 0) \ . \quad (19)$$

Для трехмерного пространства будем иметь

$$\delta = 4.648,\ r = 1.215 \ (T = T_C,\ H \to 0) \ . \quad (20)$$

Для пятимерного пространства

$$\delta = 2.278,\ r = 1.439 \ (T = T_C,\ H \to 0) \ , \quad (21)$$

что совпадает с результатами для полимеров в рамках погрешности расчета. Погрешность легко оценить для пятимерного пространства, когда (16) и (19) представляют собой знакочередующийся ряд. Абсолютная погрешность в определении индекса дельта составляет 0.2.

Обратим внимание на то, что род ФП в рамках ε-разложения не зависит от того, конечна критическая температура T_C или равна нулю (см. (5), (15)), чего нельзя сказать, например, о критическом индексе теплоемкости α (см. (2), (3)) [5]. Индекс α имеет различные значения при $T_C > 0$ ($T \to T_C$) и при $T_C = 0$. Дело в том, что S_I-функция (2) при $T_C \equiv 0$ также равна нулю, если же $T_C > 0$ ($T \to T_C$), то S_I-функция стремится к единице (тогда получатся классические результаты). То есть род ФП в рамках ε-разложения является более универсальной величиной, чем критический индекс теплоемкости.

Таким образом, для решеточных систем рассмотрен род равновесных ФП в рамках ε-разложения как при изменении температуры, так и при изменении поля (при критической температуре). Только в четырехмерном пространстве при изменении температуры в нулевом поле наблюдается ФП 2-го рода (см. (5) при ε = 0). Во всех остальных случаях наблюдаются ФП дробного рода при отсутствии двухфазных состояний, то есть непрерывного типа. Подобные ФП не предусмотрены классификацией П. Эренфеста.

ФП 1-го рода будут наблюдаться при изменении внешнего поля, если температура ниже критической.

Полученные результаты не охватывают одномерные и квазиодномерные системы. Также только качественно, возможно, эти результаты применимы к двумерным системам.

Поскольку экспериментально эти результаты проверить достаточно сложно (особенно в 4-х и 5-тимерных пространствах), то желательна

проверка полученных результатов путем компьютерного моделирования на известных и новых моделях. Для трехмерного пространства также желательно сопоставление полученных результатов с экспериментальными данными: для этого необходимо измерение критического индекса теплоемкости и индекса δ. Также желательна экспериментальная оценка параметров S_I-функции (2), что возможно, видимо, также сделать путем компьютерного моделирования при использовании экспериментальных данных.

[1] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Теоретическая физика, Т. 5. Статистическая физика. Ч. 1, Наука, Москва (1995).
[2] М.Гиттерман, В.Хэлперн, Фазовые превращения. Краткое изложение и современные приложения, Ижевск, Москва, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика» (2006).
[3] К.Дж.Вильсон, Ренормализационная группа и критические явления / // УФН **141**, 193 (1983).
[4] А.Н.Васильев, Квантовополевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике, ПИЯФ РАН, СПб. (1998).
[5] В.Н.Удодов, Новая модельная классификация равновесных фазовых переходов, Южно-сибирский научный вестник. №1(25), 131 (2019).
[6] Р.Бэкстер, Точно решаемые модели в статистической механике, Мир, Москва (1985).
[7] В.Н.Удодов, Эпсилон-разложение при критической температуре, равной нулю, Моделирование неравновесных систем// материалы 23 Всерос. семинара. Красноярск: ИВМ СО РАН. 111 (2020).

Симметрийный анализ магнитоэлектрических эффектов в мультиферроиках со структурой перовскита. $RCrO_3$

А.К. Звездин [1], З.В. Гареева [2], X.M. Chen [3]
[1] *Институт общей физики РАН им. Прохорова, 119991, г. Москва, Россия*
e-mail: zvezdin@gmail.com
[2] *Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, 450075, г. Уфа, Россия*
e-mail: zukhragzv@yandex.ru
[3]*Laboratory of Dielectric Materials, School of Materials Science and Engineering, Zhejiang University, 310027, Hangzhou, China*
e-mail: xmchen59@zju.edu.cn

В настоящее время активный интерес исследователей привлекают мультиферроики, материалы, в которых сосуществует несколько типов ориентационного упорядочения (ферромагнитного, сегнетоэлектрического, деформационного), что делает возможным реализацию перекрестных эффектов (управления магнитным упорядочением за счет электрического воздействия и наоборот), актуальных для использования в современных технологических приложениях: устройствах спинтроники, энергосберегающих технологиях, магнитоэлектрической памяти нового поколения (MERAM) [1, 2].

В докладе обсуждаются симметрийные аспекты магнитоэлектрических эффектов в мультиферроиках со структурой перовскита, типичными представителями которых являются феррит висмута ($BiFeO_3$) и редкоземельные ортоферриты / ортохромиты (RFe/CrO_3).

Основной акцент данного исследования связан с анализом кристаллографических дисторсий, приводящих к появлению сегнетоэлектрических и магнитоэлектрических свойств данных материалов. Несмотря на то, что прафазой $BiFeO_3$ и RFe/CrO_3 является структура ABO_3 перовскитов, феррит висмута и ортохромиты имеют принципиальные отличия в отношении магнитных и сегнетоэлектрических свойств, что в связано с симметрией кристаллов и кристаллографическими дисторсиями.

В то время как магнитоэлектрические эффекты в феррите висмута достаточно хорошо изучены [3], механизмы магнитоэлектрических эффектов в ортохромитах оставляют много вопросов.

В данной работе на основе использования теоретико - группового анализа проведено исследование электрических свойств редкоземельных ортохромитов. Показано, что в $RCrO_3$ в окрестности ионов Cr^{3+} возникают электрические дипольные моменты, упорядоченные по антисегнетоэлектрической моде (Рис.1).

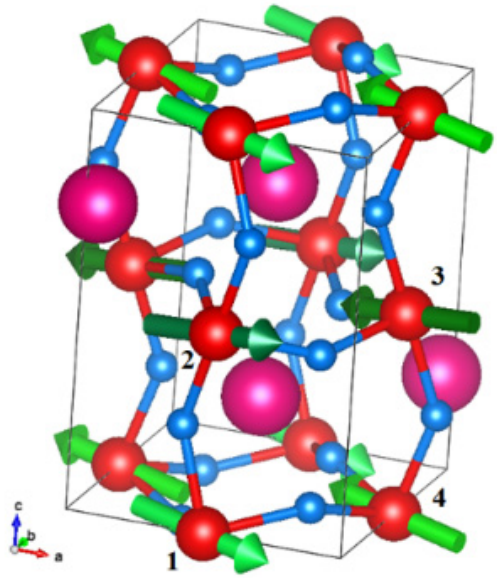


Рис 1. Структура антисегнетоэлектрически – упорядоченных электродипольных моментов в элементарной ячейке $RCrO_3$.

На основе проведенных расчетов введены структурные параметры порядка $RCrO_3$: полярные параметры (***D***, $\boldsymbol{Q}_2$, $\boldsymbol{Q}_3$, ***P***) и аксиальный параметр (**Ω**). Проведенная классификация структурных, магнитных и сегнетоэлектрических параметров порядка по неприводимым представлениям Pnma группы симметрии $RCrO_3$, проведен анализ магнитоэлектрических эффектов, определены возможные типы электростатически – связанных сегнетоэлектрических структур в $RCrO_3$ и фазовые переходы между ними, приведено объяснение наблюдаемых процессов спиновой переориентации $RCrO_3$, индуцированных действием электрического поля [4].

Работа поддержана грантом РФФИ No. 19-52-80024.

[1] N. Ortega, A. Kumar, J. F. Scott, and R. S. Katiyar, J. Phys. Condens. Matter **27**, 504002 (2015).
[2] K. Roy, Spin **10**, 2030001 (2020)
[3] A. F. Popkov, M. D. Davydova, K. A. Zvezdin, S. V. Solov'yov, and A. K. Zvezdin, Phys. Rev. B **93**, 094435 (2016).
[4] B. Rajeswaran, D. I. Khomskii, A. K. Zvezdin, C. N. R. Rao, and A. Sundaresan, Phys. Rev. B **86**, 214409 (2012).

Isochoric Heat Capacity and Phase Transition Properties Measurements of Biofuel Main Components

N.G. Polikhronidi [1], R.G. Batyrova [1], A. Aliev [1], I.M. Abdulagatov [2,3]
[1]*Institute of Physics of the DFRC of the RAS, Makhachkala, Dagestan, Russia*
[2]*Renewal and Geothermal Research Institute of the High Temperature Joint Institute of the Russian Academy of Sciences, Makhachkala, Dagestan, Russia*
[3]*Dagestan State University, Makhachkala, Dagestan, Russia*
E-mail: ilmutdina@gmail.com

The pollution of the atmosphere by numerous trace gases is great important due to its serious consequences to the human health and to the environment such as acid rain, photochemical smog and global climatic changes produced by the "greenhouse effect". The combustion of fossil fuels is the main source of many pollution gases (NO_x, SO_2, CO and CO_2). About 80 % of the global energy consumption is fossil fuels. With the coming exhaustion of fossil fuels increases the need for alternative fuel sources, particularly vegetable oils with their renewable organic availability and minimal pollutants. All carbon dioxide released during consumption is sequestered from the atmosphere for growth of vegetables oil crops. Other environmental advantages of the biodiesel use are: (1) it is simple to use; (2) biodegradable; (3) non-tocxic; (4) its emissions cause 50 % less ozone to form than conventional diesel fuel; (5) and it is essentially free of sulfur and aromatics. A promising area of studies to characterize biomaterial is the measurements of the thermophysical properties. The thermophyscial properties of reveal important information on the physicochemical processes in the material and certainly may be an additional route to characterize biodiesel oils. Biodiesel is a renewable alternative with the potential to replace some of the petrodiesel market. Biodiesel fuel is comprised of monoalkyl esters of long chain fatty acids. It can be produced from a variety of feedstocks including common vegetable oils (soybean, cottonseed, palm, peanut, canola, sunflower, safflower, coconut, algae, *etc*.), animal fats (tallow), and even waste cooking oil. In the most countries, for example in USA, the predominant feedstock is soybeans.

One- (C_V) and two-phase (C_{V2}) isochoric heat capacities, densities (ρ_S), and phase-transition temperatures (T_S) one of the main components of biofuel (methyl octanoate) have been measured. Measurements were made in the immediate vicinity of the liquid-gas phase transition points in order to accurately determine of the phase transition properties (T_S, ρ_S, C_{V1}, and C_{V2}). The measurements have been made over the temperature range from (298 to 460) K at pressures to 2 MPa for 15 quasi-isochores between (150 and 835) kg·m^{-3}. High-temperature, high-pressure, nearly constant-volume adiabatic piezo-calorimeter has been employed to the measurements. The combined expanded uncertainty of the density, temperature, and isochoric heat capacity, measurements at the 95 % confidence

level with a coverage factor of $k = 2$ is estimated to be 0.15 %, 15 mK, and 3 %, respectively. The measured values of two-phase C_{V2} as a function of the specific volume along various isotherms were used to calculate the second temperature derivatives of vapor-pressure and chemical potential. The contributions of the vapor-pressure, C_{VP} and the chemical potential, $C_{V\mu}$, to the measured total two-phase C_{V2} were estimated. The piezo-calorimeter was used to simultaneous measurements of thermal properties (*PVT*) and thermal pressure coefficient $\gamma_V = (\partial P/\partial T)_V$ for the same biofuel sample.

This work was supported by Russian Foundation of Basic Research (RFBR) grants № 19-08-00056.

PVT свойства и фазовое равновесие компоненты биотоплива метилкаприлата

С.М.Расулов, И.М.Абдулагатов, И.А.Исаев
Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского федерального исследовательского центра РАН
e-mail:suleimanr1@rambler.ru

Загрязнение окружающей среды нефтяным топливом постоянно увеличивается. С приближением исчерпания запасов нефтяного топлива возрастает потребность в альтернативных источниках топлива, в частности в растительных маслах с их возобновляемой органической доступностью и минимальными загрязнителями. Биодизель - это альтернативная возобновляемая энергия, компенсирующая растущий спрос на нефтяное топливо. Экологическими преимуществами использования биотоплива являются: (1) его простота в использовании; (2) биоразлагаемость; (3) нетоксичность; (4) его выбросы вызывают образование на 50% меньше озона, чем у обычного дизельного топлива; (5) и он практически не содержит серы и ароматических веществ. Биодизельное топливо может уменьшить длительный износ двигателя в дизельных двигателях. Кроме того, поскольку биодизельное топливо имеет температуру воспламенения (температуру вспышки) около 150 °C, он безопаснее нефтяного дизельного топлива для транспортировки, поскольку последнее имеет температуру вспышки около 50 ° C. При разработке моделей проектирования технологических процессов, энергоэффективности, при оценке возможных воздействий на окружающую среду, для транспортировки и хранения топлива необходимо знание теплофизических и термодинамических свойств.

Давление паров, плотность и критические свойства компонентов биотоплива были исследованы ранее многими авторами [1 – 10]. Однако эти исследования противоречивы и не охватывают широкую область температур, давлений и плотностей.

В этой связи проведено исследование PVT- свойств компоненты биотоплива - метилкаприлата. Измерения проведены на пьезометре постоянного объема [11] по 15 изохорам в температурной области 20 – 165°C, давлениях до 170 атм. и пределах плотности 44,7 – 829 кг/м^3. Ранее пьезометр использовался для измерения PVTx свойств чистого 1-бутанола, и бинарных смесей H_2O+н-C_5H_{12} и H_2O+н-C_6H_{14} в широком интервале температур и давлений, включающих критические и сверхкритические области. Пьезометр постоянного объема представляет собой трубка из нержавеющей стали 12Х18Н10Т с внутренним диаметром 8.721 мм, длиной 394 мм, толщиной стенки 2,7 мм. На одном торце трубки установлен датчик давления СДВ-А-16,00-4-20мА-0322С-0605-2-код с погрешностью

измерения ±0,15%, на другом запорный вентиль, который служит для откачки и заполнения пьезометра. Для выравнивания температуры вдоль пьезометра на трубку надет массивный медный блок посредством горячей прессовки. На торцах и в средней части медного блока просверлены отверстия для размещения контрольных и измерительных термопар и термосопротивления ПТС-10. Нагрев осуществляется трехсекционной печью высотой 500 мм. Температура регулировалась автоматически с помощью трех терморегуляторов ВРТ-3: один терморегулятор поддерживает общую температуру системы с погрешностью 0.01 К, два других контролируют нулевой градиент вдоль трубки. Погрешность измерения температуры составляет ±0.014 К. Давление в объеме пьезометра регистрируется и измеряется датчиком давления с точностью ± 0.15%. Объем пьезометра, определяемый калибровкой по воде, составлял 24.410 ± 0.025 см^3 при температуре ~20°С. Для учета изменения объема пьезометра в зависимости от температуры и давления вносились поправки. Для исследования использовался метил каприлат (CAS – 111-11-5) чистотой 99,5 вес. %.

Жидкость для измерения взвешивалась на аналитических весах с погрешностью не более 0.5 мг.

Результаты измерения представлены на Рисунке 1.

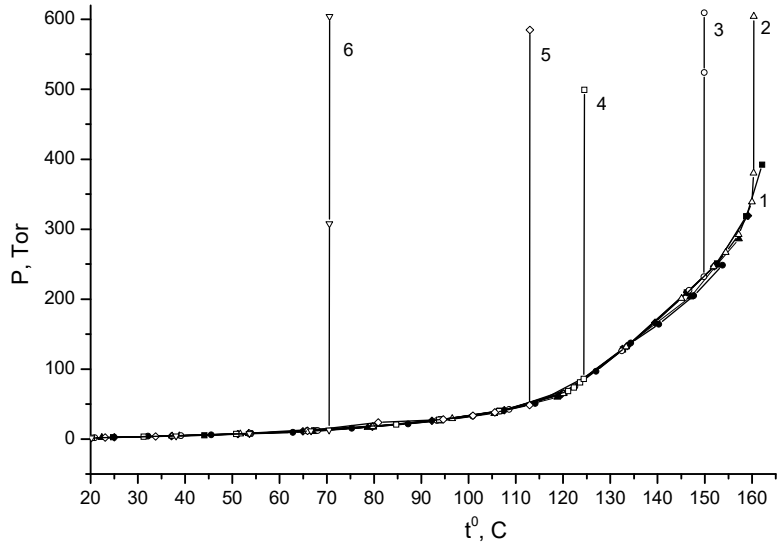


Рис. 1 PT данные метилкаприлата по изохорам: 1 – (ρ = 44,7 – 741 кг/м^3); 2 – ρ = 758 кг/м^3; 3 – ρ = 766 кг/м^3; 4 – ρ = 786 кг/м^3; 5 – ρ = 795 кг/м^3; 6 – ρ = 832 кг/м^3.

На Рисунке 1 на изохорах 2 – 6 происходит переход газ – жидкость, т.е. эти жидкостные изохоры.

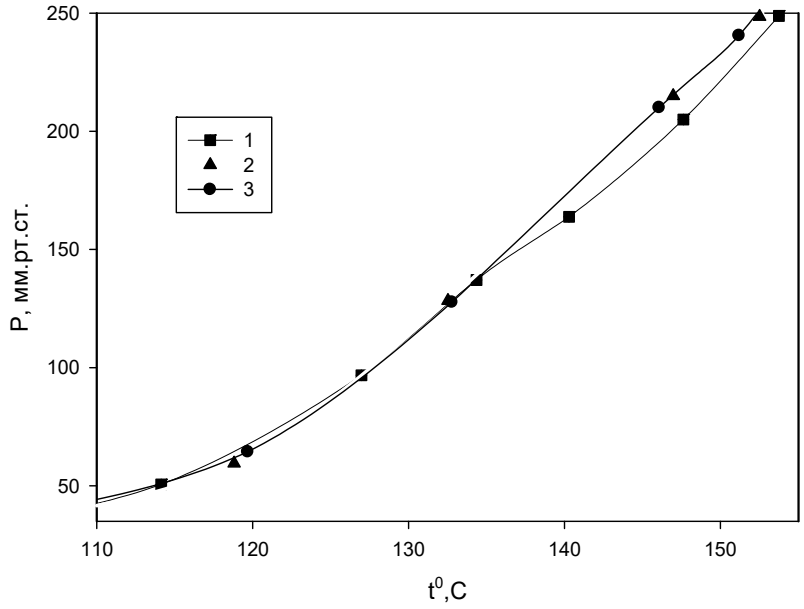


Рис. 2 PT данные метилкаприлата по изохорам: 1 – ρ = 44,7 кг/м^3; 2 – ρ = 228,1 кг/м^3 и 3 – ρ = 338 кг/м^3.

На рисунке 2 изохора 1 – паровая.

В таблице 2 приведены параметры фазовых переходов в метилкаприлате.

Таблица 2 Данные перехода газ-жидкость и жидкость-газ Метилкаприлата

ρ, кг/м^3	t, ^{o}C	P, мм.рт.ст.
44,7	133,5	138,0
758	160,3	345,0
766	149,8	230,0
786	124,4	86,0
795	112,9	48,4
832	70,48	13,2

Экспериментальные значения давления паров метилкаприлата описываются уравнением типа Антуана

$$\ln P_s/P_0 = 10{,}468526 - 4197{,}495369/(T - 65{,}0),$$

где P_0 = 101 кПа. Экспериментальные значения давления паров описываются также уравнением типа Вагнера [12] с незначительными изменениями в показателях.

$$\ln P_s/P_c = T_c/T(a_1\tau + a_2\tau^{1,5} + a_3\tau^{2,5} + a_4\tau^{3,5} + a_5\tau^{5,5}),$$

где $\tau = 1 - T/T_c$; T_c и P_c критические температура и давление; a_i – подгоночные параметры: a_1 = - 8.729498; a_2 = 2.623240; a_3 = -13.137455; a_4 = 21.104545; и a_5 = - 31.520199. Оптимальные величины критических параметров равны соответственно: T_C=640.5±5 K и P_C=2435.0±20 kПа. Это уравнение описывает экспериментальные данные в пределах 1,5%.

[1] Żarska M, Bartoszek K, Dzida M., Fuel. – 2014. – V.125. – P.144-51.

[2] Usmanov RA, Mazanov SV, Gabitova AR, MiftakhovaLKh, Gumerov FM, Musin RZ, Abdulagatov IM., J Chem Eng Data. - 2015. – V. 60. –P. 3404-3413.
[3] Dzida M, Prusakiewicz P., Fuel. – 2008. – V.87. – P.1941–1948.
[7] Dzida M, JS, Sumara J, Żarska M, Góralski P., J Chem Eng Data. – 2013. – V.58. – P.1955–1962
[4] Zhao G, Yuan Z, Yin J, Ma S., J. Chem. Thermodynamics. - 2019. – V.134. – P.195–212.
[5] Althouse PM,Triebold HO., Ind Eng Chem. – 1944. – V.16. – P.605-606.
[6] Rose A,Supina WR., J Chem Eng Data. - 1961. – V.6. – P.173-179.
[7] Scott TA, Macmillan D, Melvin EH., Ind Eng Chem. – 1952. – V.44. – P.172-175.
[8] van Genderen ACG, van Miltenburg JC, Blok JG, Van Bommel MJ, Van Ekeren PJ, Van Den Berg GJK,Oonk HAJ. Fluid Phase Equilib. – 2002. – V.202. – P.109-120.
[9] Расулов С.М., Исаев И.А., Оракова С.М., Теплофизика высоких температур. – 2019. – Т.57, №2. – С.298-300
[10] Расулов С.М., Хамидов М.М., Приборы и техника эксперимента. 1999. №1. С.148
[11] Wagner W, Ewers J, Pentermann W., J Chem Thermodyn. – 1976. – V. 8. – P.1049-1060.

Секция А1

Моделирование фазовых переходов и критических явлений

Особенности кристаллизации аморфного сплава $Ni_{62}Nb_{38}$ при экстремально высоких давлениях

Б.Н.Галимзянов[1,2], М.А.Доронина[1], А.В.Мокшин[1,2]
[1] *Институт физики Казанского федерального университета, Казань, Россия*
[2] *Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия*
e-mail: bulatgnmail@gmail.com

Исследование поведения материи в экстремальных условиях позволяет более лучше понять механизмы микроскопических структурных трансформаций и создавать материалы с совершенно новыми механическими свойствами [1]. Такое исследование востребовано в случае объемного металлического сплава (ОМС) $Ni_{62}Nb_{38}$, обладающего превосходной стеклообразующей способностью по сравнению с другими бинарными Ni-содержащих ОМС.

В настоящей работе, на основе результатов моделирования неравновесной молекулярной динамики исследуется микроскопическая структура металлического стекла $Ni_{62}Nb_{38}$, при комплексном воздействии однородного сдвига и различных давлений от 200 ГПа до 1000 ГПа. Отметим, что современные экспериментальные установки позволяют получить статические давления свыше 1000 ГПа в двухступенчатых устройствах высокого давления, где в качестве основного рабочего элемента выступают алмазные наковальни [2, 3].

Мы показали, что этот сплав кристаллизуется при одновременном воздействии фиксированного сверхвысокого давления и сдвиговой деформации. Выявлено наличие порогового давления, необходимого для инициализации процесса формирования стабильной кристаллической фазы, которое составляет 400 ГПа. Показано, что в результате сдвига происходит кристаллическое расслоение через сепарацию атомов Ni и Nb: формируются две высокоплотные кристаллические фазы, структура которых близка к гексагональной плотноупакованной. Мы установили, что кристаллизация ОМС проходит две стадии, что обусловлено существенной разницей в скорости роста кристаллических фаз Ni и Nb. Результаты настоящего исследования вносят ясность в понимание особенностей кристаллизации и аморфизации объемных металлических стекол на основе Ni и выявляют возможные механизмы управления этими фундаментальными процессами структурных трансформаций.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект #19-12-00022).

[1] B.N.Galimzyanov, A.V.Mokshin, Int. J. Solids Struc. **224**, 111047 (2021).
[2] L.Dubrovinsky et al., Nature **525**, 226 (2015).
[3] V.V.Brazhkin, Phys.-Usp. **63**, 523 (2020).

Влияние мартенситного перехода на скачкообразное поведение намагниченности в сплавах Гейслера

Л.С. Метлов [1,2], В.В. Коледов[3] , В.Г. Шавров[3] , Ю.В. Техтелев[1,4]
[1] *Донецкий Физико-техничекий Институт, Донецк, Украина*
[2] *Донецкий Национальный Университет, Донецк, Украина*
e-mail: lsmet@donfti.ru
[2] *Институт радиотехники и электроники РАН, Москва, Россия*
[4]*Луганский национальный университет им. Т.Г. Шевченко, г. Луганск*

Если температура структурного фазового перехода первого рода T_M лежит значительно ниже температуры магнитного фазового перехода второго рода T_c, то возникает вопрос, каким образом будет реагировать намагниченность при термоциклировании через область структурного фазового перехода. Для получения ответа на этот вопрос было проведено численное моделирование эволюции всех параметров задачи в этой области температур. Для расчета использовалось выражение свободной энергии для сплавов Гейслера в форме [1]

$$\Phi = \Phi_0 + I_2 + I_3 + I_4 + \dots , \tag{1}$$

где I_2, I_3, I_4 – инварианты второго, третьего и четвертого порядков

$$I_2 = \frac{1}{2} a\left(e_2^2 + e_3^2\right) + \frac{1}{2}\alpha\left(m_1^2 + m_2^2 + m_3^2\right), \tag{2а}$$

$$I_3 = \frac{1}{3} b e_3\left(e_3^2 - 3e_2^2\right) + B_2\left(\frac{1}{\sqrt{2}} e_2\left(m_1^2 - m_2^2\right) + \frac{1}{\sqrt{6}} e_3\left(3m_3^2 - m^2\right)\right), \tag{2б}$$

$$I_4 = \frac{1}{4} c\left(e_2^2 + e_3^2\right)^2 + \frac{1}{4}\delta\left(m_1^2 + m_2^2 + m_3^2\right)^2 + K\left(m_1^2 m_2^2 + m_2^2 m_3^2 + m_3^2 m_1^2\right), \tag{2в}$$

где в свою очередь e_2, e_3 – линейные комбинации компонент тензора деформации, ответственные за переход решетки от кубической фазы в тетрагональную, m_1, m_2, m_3 и m – компоненты и модуль вектора намагниченности.

Кроме того, для описания эволюции параметров порядка (ПП) использовались уравнения Ландау с учетом случайных источников $f_k(t)$ в форме “белого шума” [2-4]

$$\frac{\partial \eta_k}{\partial t} = \gamma_k \frac{\partial \Phi}{\partial \eta_k} + f_k(t) \tag{1-4}$$

для каждого вида ПП. Здесь γ_k – соответствующий кинетический коэффициент, в нашем случае $\eta_k = e_2,\ e_3,\ m_1\ ,\ m_2,\ m_3.$ – два компонента структурного ПП и три компонента магнитного ПП [1-4].

Компьютерный эксперимент проводился при следующих параметрах модели $T_M = 150$ K, $b = 0.3$, $a_0 = 0.005$, $c = 1$, $T_C = 250$ K, $B_2 = 0.02$ J/m^3, $\alpha_0 = 1$ J/(m^{3}K), $\delta = 1$ J/m^3, $K = -1$ J/m^3. Начальные значения магнитного момента были выбраны равными $m_1 = 0.6066$, $m_2 = -0.6066$ и $m_3 = -0.6066$. Изменение температуры осуществлялось с постоянной по абсолютной величине скоростью в условных единицах. Поэтому кинетические кривые ПП удобней строить не от времени, а от температуры, поскольку в таком представоении лучше видна связь характера эволюции ПП с прохождением критических точек.

Термоциклирование стартовало с температуры 158 K, которая снижалась с постоянной скоростью до значения 148 K, а затем снова повышалась с той же скоростью до начального значения (рис. 1). На этом интервале проявлялся гистерезис, как компонентов структурного, так и магнитного ПП. Причем, их изменения протекали абсолютно синхронно, и переходы осуществляются при одних и тех же температурах (прямые 5, 6).

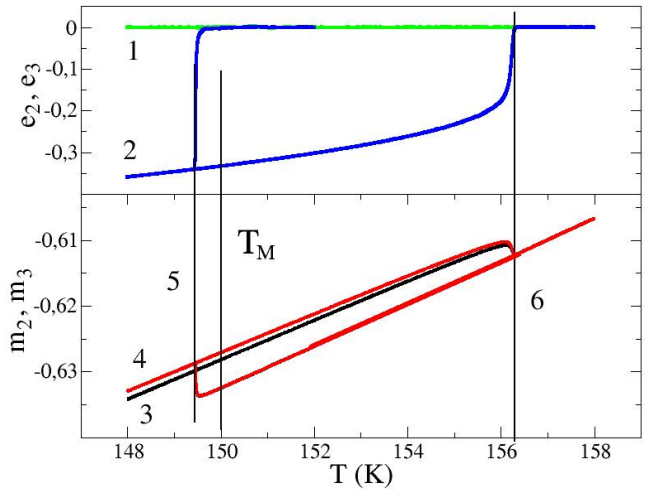


Рис.1 Температурные зависимости компонентов структурных ПП e_2 (1), e_3 (2) и магнитных m_2 (5) , m_3 (4) при циклическом охлаждении – нагреве. Прямые 5, 6 фиксируют температуру прямого и обратного мартенситного перехода

Отсюда видно, что магнитное состояние не обладает самостоятельностью и полностью следует в фарватере структурного перехода. Действительно, фазовый переход 1-го рода существует за счет влияния инвариантов третьего порядка (2,б). Однако, только структурная подсистема имеет собственные инварианты этого порядка, которые полностью выражаются через структурные ПП. Магнитная подсистема таких собственных инвариантов не имеет.

В то же время, можно утверждать, что структурная подсистема за счет смешанного инварианта третьего порядка изменяет свойства магнитной подсистемы, поскольку через взаимодействие (2,б) влияет на действие магнитной части инварианта второго порядка (2,а), что и влечет гистерезис спонтанного магнитного момента. Фактически, поскольку в высокосимметричной кубической фазе магнитный момент направлен вдоль главной диагонали куба элементарной кристаллической ячейки, то после перехода в низкосимметричную фазу он будет стремиться ориентироваться вдоль наиболее близкой к ней главной диагонали параллелепипеда, которая скачком меняет свое направление при структурном фазовом переходе.

При сближении критических температур T_c и T_M, качественная картина остается такой же вплоть до совпадения этих температур лишь с тем отличием, что величина спонтанного магнитного момента, а следовательно и ширина скачка по ПП (но не по температуре), в области критических температур структурного фазового перехода будет меньшей.

Интересным является то, что гистерезис магнитного момента сохраняется и в случае температур $T_c < T_M$ (рис. 2). Правда ширина этого гистерезиса по температуре значительно меньше, чем в предыдущем случае, и составляет доли градуса.

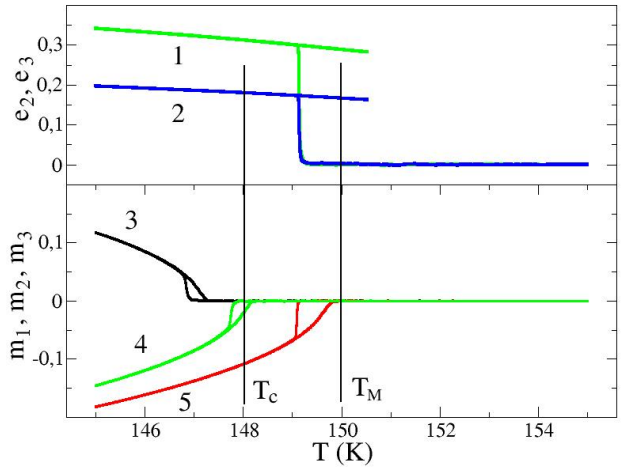


Рис.2 Температурные зависимости компонентов структурных e_2, e_3 и магнитных нагреве для случая $T_c < T_M$. Обозначения те же, что и на рис. 2

Сами критические точки разнесены по температуре и, казалось бы, структурный и магнитный фазовые переходы должны протекать независимо и не влиять друг на друга. Что касается влияния магнитного фазового перехода на структурный, то здесь это очевидно, поскольку в области структурного фазового перехода макроскопический магнитный момент равен “тождественно” нулю. В то же время обратное утверждение неверно, поскольку в области магнитного фазового перехода структурные параметры порядка имеют конечное значение и согласно (1) могут вносить вклад в его протекание. Каков характер этого влияния помогает ответить специальный компьютерный эксперимент, в котором значение температуры Кюри выбрано равным 148 К, что на 2 К меньше температуры мартенситного фазового перехода, в данных экспериментах равной 150 К (рис. 2).

Из рис. 2 видно, что каждая компонента магнитного момента имеет как бы свою эффективную температуру Кюри. Вначале в процессе охлаждения “фазовый переход” испытывает компонента m_3, затем компонента m_2 и, наконец, компонента m_1. Причем, компонента m_3 начинает фазовый переход раньше, чем его совершила бы чисто магнитная подсистема, а компонента m_1 позже. Таким образом, во время фазового мы имеем сложную картину вращения магнитного момента в пространстве. Вначале на некотором интервале температур он направлен вдоль оси z, потом в плоскости yz, а на последней стадии его ориентация выходит в пространственную область xyz.

В процессе нагрева картина разворачивается в обратном направлении, демонстрируя некоторый гистерезис по каждой компоненте. В последнем случае магнитный фазовый переход благодаря взаимодействию со структурной подсистемой, находящейся в одном из вариантов мартенситной фазы приобретает черты фазового перехода первого рода. В завершение отметим, что ширина температурного гистерезиса для случаев $T_c < T_M$ тем меньше, чем больше разница между T_M и T_c и в пределе, пожалуй, стремится к нулю.

Таким образом, в рамках феноменологической теории Ландау с привлечением и с учетом тепловых флуктуаций и шумов методом компьютерного эксперимента в случае $T_c > T_M$ в области температур структурного фазового перехода обнаружен наведенный структурной подсистемой гистерезис магнитного момента. Изменение рода фазового перехода связано с влиянием на магнитный фазовый переход структурной подсистемы. Если наличие гистерезиса компонент магнитного явления в случае $T_c > T_M$ вполне очевидно, то природу гистерезиса в остальных случаях еще предстоит выяснить.

Предстоит также еще выяснить и природу того факта, что различные компоненты магнитного момента имеют разные критические температуры, вследствие чего магнитный момент сложно меняет свою ориентацию в пространстве при магнитном фазовом переходе. Смещение начала магнитного фазового перехода для каждой компоненты магнитного момента в этом случае можно трактовать, как некоторое расщепление кинетических кривых. Полученные здесь закономерности для сплавов Гейслера имеют более общее значение и могут наблюдаться и для других типов сплавов, обладающих склонностью к магнитным и структурным иного типа фазовым переходам, например, сплавы полу-Гейслера или TiNi.

Работа частично профинансирована грантом РНФ № **10-17-00748**

[1] A.N. Vasil’ev, A.D. Bozhko, V.V. Khovailo, I.E. Dikshtein, V.G. Shavrov, V.D. Buchelnikov, M. Matsumoto, S. Suzuki, T. Takagi, J. Tani, Phys. Rev. B 59, 1113 (1999).
[2] Л.С. Метлов, В.В. Коледов, В.Г. Шавров, ФТВД, 28, 1, 46 (2018).
[3] L.M.A. Bettencourt, Phys. Rev. D 53, 045020 (2001).
[4] Л.С. Метлов, А.Г. Петренко, ФТВД, 28, 3, 46 (2018).
[5] Л.С. Метлов, В.В. Коледов, В.Г. Шавров, ФТВД, 31, 2, в печати (2021).

Структура бислойного графена при относительном вращении слоев

Е.А.Беленков [1], М.Е.Беленков [1], М.Бржезинская [2], В.А.Грешняков [1]
[1] *Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия*
e-mail: belenkov@csu.ru
[2] *Берлинский центр материалов и энергии имени Гельмгольца, Берлин, Германия*

Структура углеродных соединений может значительно варьироваться, в результате чего их свойства также значительно изменяются [1-3]. Свойства бислойного графена изменяются в зависимости от угла поворота соседних графеновых слоев [4-6]. При относительном развороте слоев в бислойном графене наблюдается формирование муаровых структур, периодическая структура которых возможна при фиксированных углах поворота называемых магическими. Насколько устойчивыми являются такие структуры остается неясным. В данной работе методом атом-атомного потенциала выполнены расчеты энергии межслоевых связей в бислойном графене в зависимости от относительного угла поворота графеновых слоев. Расчеты энергии межслоевых связей, как суммы энергии ван-дер-ваальсовых связей всех атомов одного слоя со всеми атомами другого слоя выполняли для слоев содержавших порядка 10 тысяч атомов. Для описания межатомных взаимодействий использовался потенциал Букингема. В качестве исходной структуры был взят бислой графена с АА упаковкой. Поворот слоев выполняли относительно центра, в качестве которого был выбран атом одного из слоев (рис. 1). Угол поворота изменялся в диапазоне от 0 до 60 градусов с шагом 0.1°. При относительном повороте слое на 60° их упаковка становилась АВ.

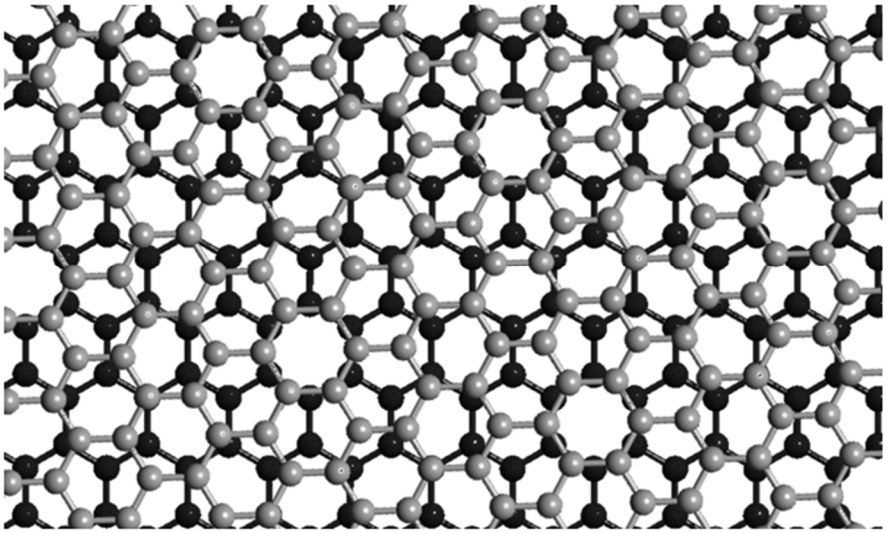


Рис.1 Муаровая структура бислоя гексагонального графена при относительном угле поворота 28 градусов.

Анализ муаровых структур в развернутых бислоях графена показал, что частота, с которой встречаются магические углы поворота, минимальна при больших значениях углов. С уменьшением относительного угла разворота графеновых слоев частота наблюдения магических углов быстро увеличивается, достигая наибольших значений при стремлении угла поворота к нулю.

В результате расчетов межслоевых взаимодействий было установлено, что в диапазоне углов поворота от 0 до 4° наблюдается быстрое уменьшение удельной энергии связи приходящейся на один атом слоя. Тогда как в интервале углов от 4 до 56° энергия меняется незначительно. В следующем диапазоне углов от 56 до 60 градусов энергия связи снова быстро уменьшается, достигая минимума при угле поворота 60°, что соответствует упаковке AB. Локальные минимумы энергии межслоевых связей наблюдаются во втором интервале углов поворота, при этом высота потенциальных барьеров между локальными минимумами сопоставима с энергией тепловых колебаний при нормальных условиях. Это ставит под сомнение возможность устойчивого существования структур бислойного графена с углом относительного поворота слоев, отличающимся от 60°. Также углы, при которых наблюдаются локальные минимумы энергии межслоевых связей слабо коррелируют с магическими углами, при которых должны формироваться периодические муаровые структуры.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Челябинской области в рамках научного проекта № 20-43-740015.

[1] E.A.Belenkov, V.A.Greshnyakov, New Carbon Materials **28**, 273 (2013).
[2] E.A.Belenkov, V.A. Greshnyakov, Physics of the Solid State **58**, 2145 (2016).
[3] M.E.Belenkov, A.E.Kochengin, V.M.Chernov, E.A.Belenkov, Journal of Physics: Conference Series **1399**, 022024 (2019).
[4] E.Belenkov, M.Brzhezinskaya, V.Mavrinskii, Graphynes: advanced carbon materials with layered structure // Handbook of graphene. Volume 3: Graphene-Like 2D Materials ed M Zhang (Tallahassee: Wiley) chapter 4. pp. 113-151 (2019).
[5] E.Suarez Morell, J.D.Correa, P.Vargas, M.Pacheco, Z.Barticevic, Phys. Rev. B **82**, 121407 (2010).
[6] Y.Cao, V.Fatemi, S.Fang, K.Watanabe, T.Taniguchi, E.Kaxiras, P.Jarillo-Herrero, Nature **556**, 43 (2018).
[7] Y.Cao, V.Fatemi, A.Demir, S.Fang, S.L.Tomarken, J.Y.Luo, J.D.Sanchez-Yamagishi, K.Watanabe, T.Taniguchi, E.Kaxiras, R.C.Ashoori, P.Jarillo-Herrero, Nature **556**, 80 (2018).

Ab initio расчеты графена функционализированного гидроксильными группами или атомами водорода

М.Е.Беленков, В.М.Чернов
Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
e-mail: me.belenkov@gmail.com

Функционализация графена неуглеродными атомами и молекулярными группами необходима для модифицирования его свойств для наноэлектронных устройств [1, 2]. К настоящему времени удалось экспериментально синтезировать окисленный графен, хлорографен, фторографен, графан (то есть графен, функционализированный водородом) и другие разновидности [3-7]. Теоретические расчеты показали, что возможно существование множества полиморфных разновидностей функционализированного графена, отличающихся порядком присоединения неуглеродных атомов и молекул на поверхности графеновых слоев [8-12]. Между полиморфными разновидностями функционализированного графена возможны фазовые переходы [13, 14]. Также, различные полиморфные разновидности, например фторографена, могут быть сформированы на основе не только гексагонального графена, но и на основе 5-7, 4-8, 3-12 или 4-6-12 графенов [9-12, 15]. Вероятно, возможно существование такого же разнообразия полиморфных разновидностей графана и графена, функционализированного водородными атомами и OH молекулярными группами. Поэтому необходимы теоретические исследования таких соединений. В данной работе выполнены расчеты полиморфных разновидностей графана и графена, функционализированного гидроксильными группами.

Ab initio моделирование структуры и электронных свойств функционализированного графена было выполнено методом теории функционала плотности (DFT) в обобщенном градиентном приближении (GGA). Расчеты проводили при температуре 0.01 К с использованием набора из k-точек 12×12×12 в программном пакете Quantum ESPRESSO. Размерность набора базисных функций была ограничена значением равным 70 Ридберг. Моделировалась структура трехмерных кристаллов функционализированного графена. Расстояние между соседними слоями в кристаллах являлось постоянным и равным 12 Å. При таком расстоянии, межслоевыми взаимодействиями между соседними слоями можно пренебречь и рассчитанные структуры соответствуют структуре изолированных монослоев.

Полиморфные разновидности были модельно построены на основе гексагональных слоев графена. Всего было исследовано 5 структурных разновидностей для графана и 5 структурных разновидностей для графена, функционализированного гидроксильными группами. Порядок

присоединения атомов водорода и гидроксогрупп к структурным типам T1-T5 был выбран аналогично описанному для слоев фторографена [9]. В результате расчетов методом DFT-GGA была найдена геометрически оптимизированная структура этих слоев. Оказалось, что все графановые полиморфы обладают устойчивой структурой, в то время как некоторые из структурных типов графена функционализированных OH-группами при оптимизации оказались неустойчивыми. Причиной неустойчивости графена, функционализированного гидроксогруппами является значительное превышение молекулярным радиусом OH-группы атомного радиуса водорода. Поэтому полная функционализация слоев гексагонального графена гидроксильными группами для некоторых структурных типов затруднена и для них возможна только частичная функционализация. Между различными полиморфными разновидностями графана и графена, функционализированного OH-группами возможны фазовые превращения при всестороннем растяжении слоев. Новые полиморфы функционализированного графена могут найти практическое применение в водородной энергетике и наноэлектронике [1, 2].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90002.

[1] K.I.Ho, C.H.Huang, J.H.Liao, et al., Scientific Reports **4**, 5893 (2014).
[2] K.P.Chang, K.I.Ho, M.Boutchich, et al., Semiconductor Science and Technology **35**, 015005 (2019).
[3] D.C.Elias, R.R.Nair, T.M.Mohiuddin, et al., Science **323**, 610 (2009).
[4] D.Chen, H.Feng, J.Li, Chemical Reviews **112**, 6027 (2012).
[5] B.Li, L.Zhou, D.Wu, et al., ACS Nano **5**, 5957 (2011).
[6] J.T.Robinson, J.S.Burgess, C.E.Junkermeier, et al., Nano Letters **10**, 3001(2010).
[7] R.R.Nair, I.Riaz, V.G.Kravets, et al., Small **6**, 2877 (2010).
[8] T.E.Belenkova, V.M.Chernov, E.A.Belenkov, RENSIT **8**, 49 (2016).
[9] M.E.Belenkov, V.M.Chernov, E.A.Belenkov, IOP Journal of Physics: Conference Series **1124**, 022010 (2018).
[10] M.E. Belenkov, V.M.Chernov, E.A.Belenkov, IOP Conference Series: Materials Science and Engineering **537**, 022058 (2019).
[11] M.E.Belenkov, V.M.Chernov, Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials **11**, 406 (2019).
[12] M.E.Belenkov, V.M.Chernov, Letters on Materials **10**, 254 (2020).
[13] K.S.Grishakov, K.P.Katin, M.M.Maslov, V.S.Prudkovskiy, Appl. Surf. Sci. **463**, 1051 (2019).
[14] M.E.Belenkov, V.M.Chernov, E.A.Belenkov, Materials Research Proceedings **9**, 148 (2018).
[15] M.E.Belenkov, V.M.Chernov, Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials **12**, 326 (2020).

Исследование влияния анизотропии на магнитные и энергетические характеристики трехпленочных структур на основе переходных металлов

М.В. Мамонова
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия
e-mail: mamonovamv@omsu.ru

Исследование магнитных свойств трехпленочных структур, состоящих из ферромагнитных слоев, разделенных немагнитным слоем является актуальной задачей из-за их широкого применения в качестве устройств спинтроники, свойства которых сильно зависят от величины магнитной анизотропии [1, 2]. Осциллирующее РККИ взаимодействие приводит к тому, что постоянная межслоевого обмена колеблется с изменением расстояния между ферромагнитными слоями. Регулируя толщину немагнитного материала между двумя магнитными слоями, можно изменить взаимодействие с ферромагнитного на антиферромагнитное. Поэтому важно теоретически предсказать, при какой толщине немагнитного слоя антиферромагнитная конфигурация будет более энергетически выгодной.

С недавнего времени тонкопленочные структуры с перпендикулярной магнитной анизотропией (PMA) привлекают большое внимание из-за их использования в перпендикулярной магнитооптической записи [3], для улучшения плотности, стабильности и надежности спиновых клапанов и магнитных туннельных переходов [4].

Данная работа посвящена исследованию МАЭ пленок Fe и Co с промежуточным слоем Cu и Pt с использованием формализма SDFT и расчета самосогласованной зонной структуры с помощью программного пакета VASP[5]. Отличие нашей работы от опубликованных в статьях [6,7] расчетов в рамках метода Кона-Корринги-Ростокера магнитных моментов и МАЭ для систем Co/Pt(111) и Fe/Pt(111) состоит в том, что проводились расчеты не только ферромагнитных, но и антиферромагнитных конфигураций в зависимости от ориентации поверхностных граней с полной релаксацией положений атомов всей системы. Кроме того в данной работе ставилась задача, исследовать первопринципными методами экспериментально наблюдаемое на примере структуры Co/Cu/Co явление переориентации намагниченности для пленок кобальта с анизотропии в плоскости на анизотропию перпендикулярно плоскости из-за напыления поверх структуры сверхтонкой пленки из платины.

Чтобы рассчитать энергию магнитной анизотропии (МАЭ), мы должны оценить разницу между полными энергиями магнитного материала для различных ориентаций намагниченности. Численно это очень сложная задача из-за более сильной зависимости от параметров расчета.

Сначала были проведены расчеты для монослойной ферромагнитной пленки на поверхности Pt(100) в зависимости от параметров сходимости и толщины немагнитной прослойки. Мы рассчитали величину $\Delta E = E_{АФМ} - E_{ФМ}$ - разность полной энергии для ферромагнитной (ФМ) и антиферромагнитной (АФМ) спиновых конфигураций, когда магнитные моменты атомов в пленках по обе стороны от пластины направлены противоположно (АФМ конфигурация) и сонаправленно (ФМ конфигурация).

Изучение сходимости по количеству точек разбиения сетки (Kp) при интегрировании в первой зоне Бриллюэна, показало, что при расчете полной энергии и магнитных моментов достаточно размера сетки около 15x15x1 (рис. 1а). В то время как при расчете ΔE для достижения сходимости (рис. 1б) мы должны использовать большие значения количества k-точек, размер сетки порядка 50x50x1. Однако такое значительное увеличение числа K-точек приводит к резкому увеличению ресурсов компьютера: времени вычислений и, самое главное, памяти.

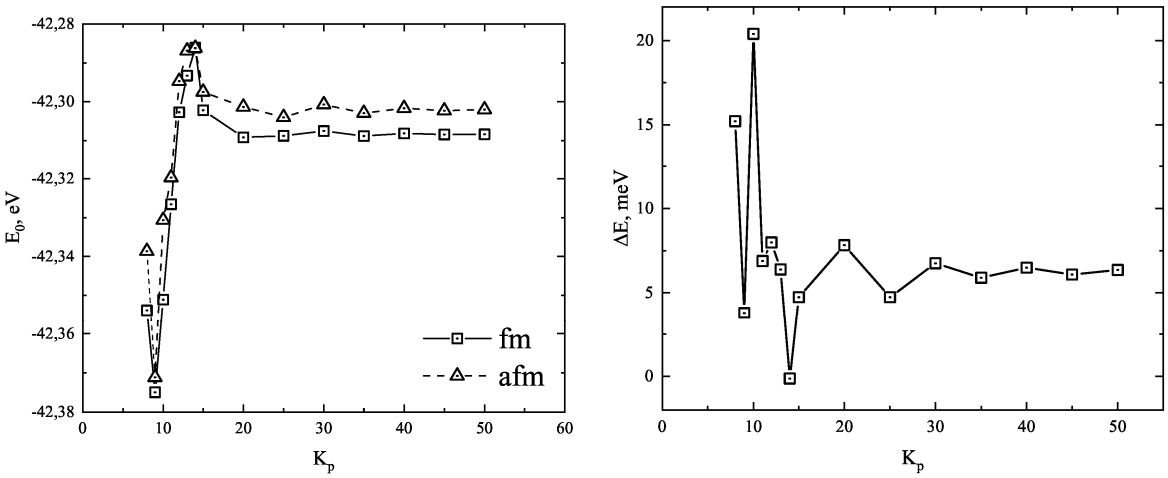


Рис. 1. Сходимость а) полной энергии и б) разности энергий АФМ и ФМ конфигураций от числа K-точек для Co/Pt(100)/Co.

Расчеты ΔE (рис. 2а) показали, что для пленки Co с толщиной в 1 и 2 монослоя ферромагнитная ориентация более энергетически выгодна для всех рассматриваемых толщин пластины Pt, и сменяется антиферромагнитной только для трехслойной пленки Co при толщине Pt большей 5 монослоев.

Энергия магнитной анизотропии (МАЭ) $E_{MA}=E_{\perp} - E_{\parallel}$ представляет собой разность полной энергии систем с намагниченностью, направленной перпендикулярно и параллельно плоскости поверхности. При $E_{MA}<0$ более энергетически выгодна ориентация магнитных моментов перпендикулярно поверхности, что соответствует анизотропии легкая ось, при $E_{MA}>0$ анизотропии легкая плоскость.

Можно увидеть (рис.2б), что перпендикулярная анизотропия для монослойных пленок железа с прослойкой платины возникает только для

грани (100) для всех толщин пластины Pt и для грани (110) для толщины пластины Pt в 5 монослоев. А для грани (111) для всех толщин немагнитной прослойки более энергетически выгодна анизотропия типа легкая плоскость, что подтверждается расчетами других авторов[8].

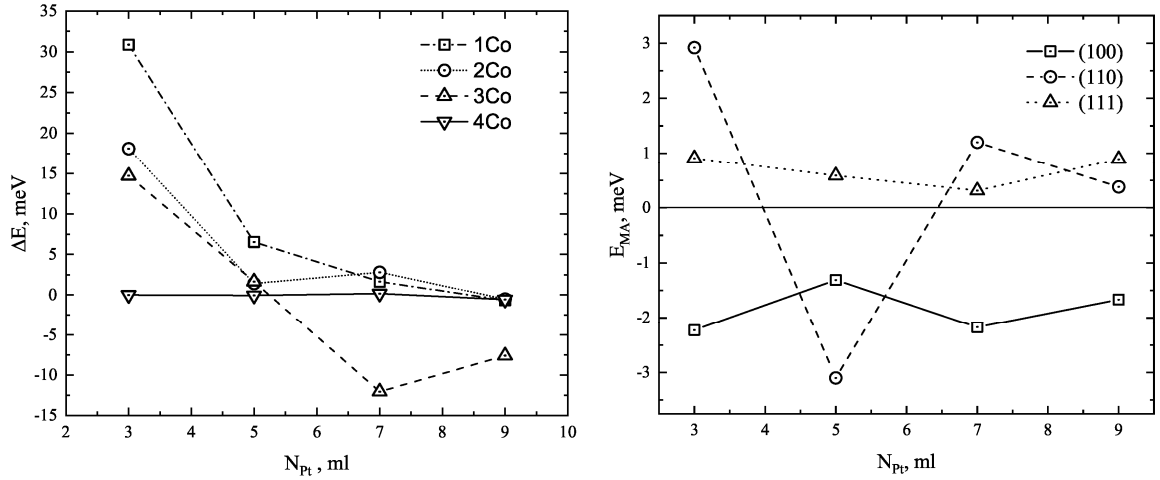


Рис. 2. Зависимость от толщины пластины Pt а) разности энергий АФМ и ФМ конфигураций Co/Pt/Co при толщине пленки Co от 1-4 монослоя б) энергии магнитной анизотропии Fe/Pt/Fe для различных ориентаций плоскости поверхности.

Далее мы исследовали трехпленочные структуры с толщиной каждого слоя 3 ml в зависимости от направления намагниченности и ориентации поверхностной грани. Результаты расчетов представлены в таблице.

Грань	Спин конфиг		E_{MA}, meV			ΔE, meV		
			Co/Pt/Co	Co/Cu/Co	Pt/Co/Cu /Co/Pt	Co/Pt/Co	Co/Cu/Co	Pt/Co/Cu /Co/Pt
100	ФМ	∥	0,965	3,204	1,961	12,344	9,466	16,000
		⊥				12,889	6,631	17,034
	АФМ	∥	1,510	0,369	2,995			
		⊥						
110	ФМ	∥	0,993	-0,050	-2,205	5,592	-31,784	-30,755
		⊥				8,426	-31,585	-28,443
	АФМ	∥	3,827	0,149	0,107			
		⊥						
111	ФМ	∥	0,463	-0,044	-0,034	4,965	-7,160	3,448
		⊥				-1,406	-6,854	3,077
	АФМ	∥	-5,908	0,262	0,405			
		⊥						

Анизотропия типа легкая ось с ориентацией намагниченности, перпендикулярной плоскости пленки возникает для структуры Pt/Co/Cu/Co/Pt для грани (111) и ФМ конфигурации грани (110), а для

структуры Co/Pt/Co для АФМ конфигурации грани (111), что подтверждается экспериментально[9]. Для ориентации поверхностной грани (100) все рассмотренные структуры на основе пленок кобальта, с немагнитной прослойкой платины и меди, а также с нанесенной поверх структуры Co/Cu/Co пленки из платины характеризуются магнитной анизотропией типа легкая плоскость с намагниченностью, ориентированной в плоскости пленки.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ. Были использованы вычислительные ресурсы Центра совместного пользования ДВО РАН (Хабаровск).

[1] V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov and M.V. Mamonova, Phys. Usp. **60**, 762-797 (2017).
[2] S. Mangin, D. Ravelosona, J. A. Katine, M. J. Carey, B. D. Terris, E. E. Fullerton, Nature Mater. **5**, 210 (2006).
[3] P. Gambardella, S. Rusponi, M. Veronese, S. S. Dhesi, C. Grazioli, A. Dallmeyer, I. Cabria, R. Zeller, P. H. Dederichs, K. Kern, C. Carbone, H. Brune, Science **300**, 1130 (2003)
[4] N. Nishimura, T. Hirai, A. Koganei, T. Ikeda, K. Okano, Y.Sekiguchi, Y. Osada, J. Appl. Phys. **91**, 5246 (2002)
[5] P. G. Kresse and J. Furthmuller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
[6] O. Sipr, S. Bornemann, J. Minar and H. Ebert, Phys. Rev. B. **82**, 174414 (2010).
[7] C. Etz, J. Zabloudil, P. Weinberger and E. Y. Vedmedenko, Phys. Rev. B. **77**. 184425 (2008).
[8] S. Bornemann, O. Sipr, S. Mankovsky, S. Polesya, J. B. Staunton, W. Wurth, H. Ebert, J. Minar, Phys. Rev. B **86**. 104436 (2012)
[9] M. T. Johnson, P. J. H. Bloemen, F. J. A. den Broeder and J. J. de Vries, Rep. Prog. Phys. **1409** (1996).

Фазовые переходы и термодинамические свойства четырехвершинной модели Поттса на треугольной решетке

Д.Р.Курбанова [1], А.К.Муртазаев [1,2], М.К.Рамазанов [1], М.А.Магомедов [1,2]
[1] *Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*
[2] *Дагестанский Государственный Университет, Махачкала, Россия*
e-mail: d_kurbanova1990@mail.ru

В настоящее время исследованию спиновых систем с фрустрациями уделяют большое внимание. Это связано с тем, что фрустрации играют важную роль в различных магнитных системах. Считается, что фрустрации, как результат конкурирующих взаимодействий, являются источником вырождения и беспорядка, которые приводят к появлению новых и интересных физических явлений [1].

В данной работе на основе алгоритма Ванга-Ландау метода Монте-Карло мы исследуем влияние конкуренции обменного взаимодействия на фазовые переходы (ФП), термодинамические свойства и магнитные структуры основного состояния двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ на треугольной решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей.

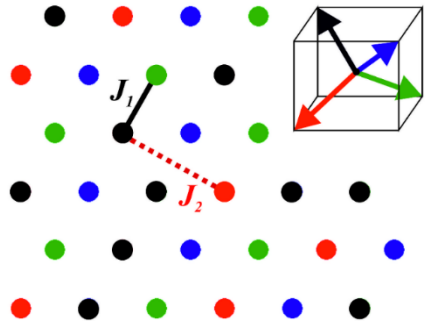


Рис.1 Четырехвершинная модель Поттса на треугольной решетке

Модель Поттса демонстрирует температурный ФП первого или второго порядка, в зависимости от числа состояний спина q и пространственной размерности. Данная модель интересна и тем, что значение $q=4$ является граничным значением интервала $2 \le q \le 4$, где наблюдается ФП второго рода и области значений $q>4$, в котором ФП происходит как переход первого рода [2].

Гамильтониан модели представлен в следующем виде:

$$H = -J_1 \sum_{i,j} \cos\theta_{i,j} - J_2 \sum_{i,k} \cos\theta_{i,k} \,, \qquad (1)$$

где J_1 и J_2 – параметры обменных ферро- ($J_1 > 0$) и антиферромагнитного ($J_2 < 0$) взаимодействия соответственно для первых и вторых ближайших соседей, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$.

Схематическое представление модели представлено на рисунке 1. На вставке приведены направления спинов для каждого из 4 значений спина и соответствующее цветовое представление. Также представлены взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими соседями. Как видно из рисунка, направления векторов заданы таким образом, что выполняется равенство:

$$\theta_{i,j}=\begin{cases}0, & если \quad S_i=S_j\\ 109.47°, & если \quad S_i\neq S_j\end{cases} \qquad Cos\,\theta_{i,j}=\begin{cases}1, & если \quad S_i=S_j\\ -1/3, & если \quad S_i\neq S_j\end{cases} \tag{2}$$

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $L\times L=N$, $L=12\div120$, где L измеряется в размерах элементарной ячейки.

В стандартный алгоритм Ванга-Ландау нами были внесены дополнения, которые позволяют выяснить магнитную структуру основного состояния системы. Данный алгоритм является реализацией метода энтропийного моделирования и позволяет вычислить функцию плотности состояний системы, зная которую можно вычислить значения необходимых термодинамических параметров при любой температуре.

Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Гистограммным методом и методом кумулянтов Биндера проведен анализ характера фазовых переходов. Показано, что для четырехвершинной модели Поттса на треугольной решетке переход из ферромагнитной фазы в парамагнитную является фазовым переходом первого рода.

Определены магнитные структуры основного состояния от величины второго обменного взаимодействия J_2:

при $J_2<-0.5$ система имеет ферромагнитно упорядоченное основное состояние. Все спины ориентированы вдоль одного из четырех направлений – система четырехкратно вырождена;

в интервале $-0.5\leq J_2<-1$ основное состояние имеет полосовую структуру, причем ширина, цвет и направление полос может быть произвольным. Количество состояний пропорционально $\ln(N_{GS})\propto L$;

при $J_2=-1$ учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей приводит к полному нарушению магнитного упорядочения. Степень вырождения основного состояния в данном случае $\ln(N_{GS})\propto L^2$.

Согласно результатам нашего исследования, учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей в интервале $-0.5\leq J_2\leq-1.2$ приводит к фрустрации и нарушению магнитного упорядочения [3].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №19-02-00153.

[1] D.P. Landau and K. Binder, Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Cambridge University Press, Cambridge (2000).
[2] R.J. Baxter, J. Phys. C 6, 445 (1973).
[3] Д.Р. Курбанова, А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов, Т.А. Тааев, ЖЭТФ 158, 1095 (2020).

Тубулярные алмазоподобные наноструктуры

В.А.Грешняков, Е.А.Беленков
Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
e-mail: greshnyakov@csu.ru

На основе углерода может происходить формирование неорганических наноструктур различной размерности [1], которые находят широкое применение в качестве конструкционных материалов, износоустойчивых покрытий, а также при изготовлении ионисторов, суперконденсаторов, молекулярных сенсоров и т.д. Практически все синтезированные углеродные наноструктуры состоят только из 3-координированных атомов или атомов в нескольких координированных состояниях (2 и 3 или 3 и 4). Однако алмазоподобные наноструктуры, состоящие из 4-координированных атомов, еще не были получены. Современные теоретические исследования показали возможность существования некоторых двумерных алмазоподобных наноструктур [2-5] и одномерных полипризманов [6]. Поэтому данная работа посвящена детальному теоретическому исследованию структуры, термической устойчивости и свойств ряда трубчатых алмазоподобных наноструктур.

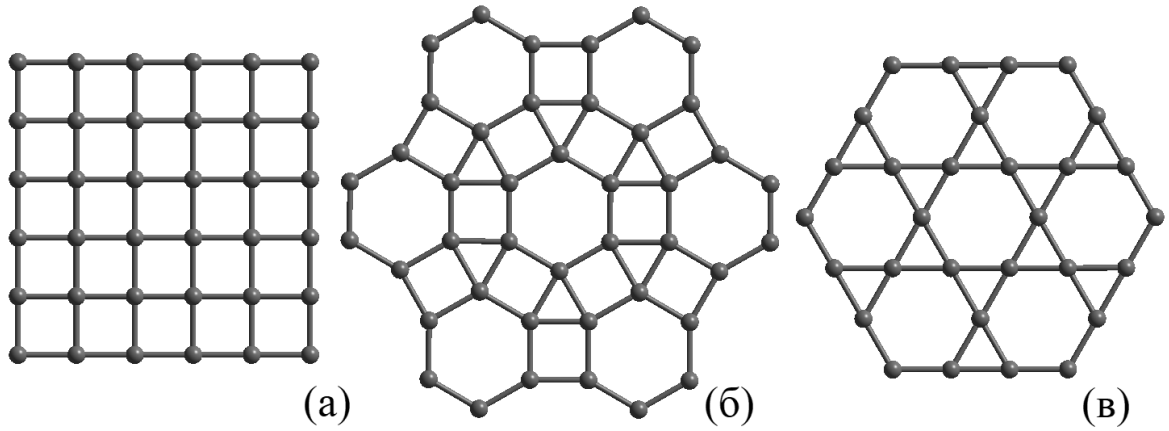
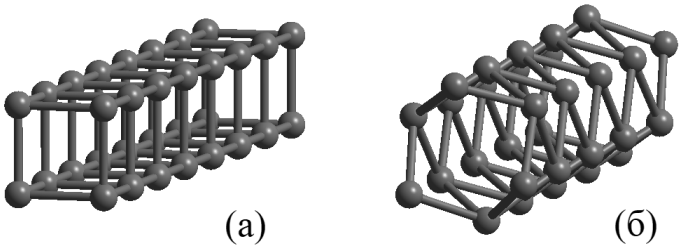


Рис.1 Структуры одноатомных алмазоподобных слоев L_4 (а), $L_{3\text{-}4\text{-}6}$ (б) и $L_{3\text{-}6}$ (в).

Согласно модельной методике из работы [1] структура любой алмазоподобной нанотрубки может быть получена в результате свертки ленты, вырезанной из одноатомного алмазоподобного слоя. В качестве алмазоподобных слоев могут быть использованы слои L_4, $L_{3\text{-}4\text{-}6}$ и $L_{3\text{-}6}$, в которых все атомные позиции являются кристаллографически эквивалентными (рис. 1). На рис. 2 приведены различные алмазоподобные нанотрубки, полученные на основе слоя L_4.

В результате расчетов методом теории функционала плотности в обобщенном градиентном приближении установлено, что структура алмазоподобных нанотрубок $(n, 0)_4$, сформированных из слоя L_4, является устойчивой при температуре 0 К, тогда как все остальные нанотрубки неустойчивы. Среди нанотрубок $(n, 0)_4$ наименьшие полные энергии имеют

нанотрубки $(5, 0)_4$ и $(6, 0)_4$ (рис. 3). Длины межатомных связей в этих нанотрубках изменяются от 0.1593 до 0.1628 нм, а углы между связями – от 90 до 120°, значения которых значительно отличаются от соответствующей величины для алмаза [3]. Нанотрубки $(5, 0)_4$ и $(6, 0)_4$ являются полупроводниками с шириной запрещенной зоны от 0.9 до 1 эВ.



(а) (б)

Рис.2 Алмазоподобные нанотрубки $(4, 0)_4$ (а) и $(3, 3)_4$ (б).

Далее было проведено моделирование термической обработки изолированной алмазоподобной нанотрубки $(5, 0)_6$, которая является наиболее устойчивой при 0 К. Установлено, что нанотрубка $(5, 0)_6$ должна быть устойчивой до 150 К. При температуре 150 К происходит деструкция нанотрубки, выражающаяся в разрыве наиболее напряженных С-С связей.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Челябинской области в рамках научного проекта № 20-43-740015. Грешняков В.А. благодарит Фонд поддержки молодых ученых Челябинского государственного университета за частичную финансовую поддержку проведенного исследования.

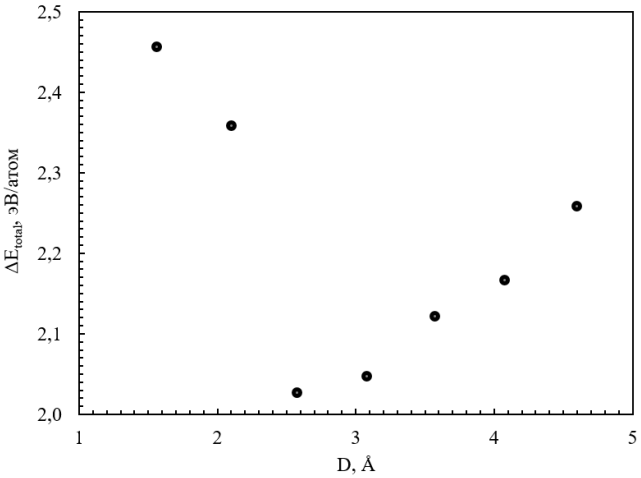


Рис.3 График зависимости разностной энергии от радиуса нанотрубки $(n, 0)_4$.

[1] Е.А.Беленков, В.А.Грешняков, ФТТ **55**, 1640 (2013).
[2] K. Ohno, H. Satoh, T. Iwamoto, H. Tokoyama, H. Yamakado, J. Comput. Chem. **40**, 14 (2018).
[3] В.А.Грешняков, Е.А.Беленков, ЖСХ **61**, 887 (2020).
[4] В.А.Грешняков, Е.А.Беленков, Письма о материалах **10**, 457 (2020).
[5] В.А.Грешняков, Е.А.Беленков, Челябинский физико-математический журнал **5**, 150 (2020).
[6] M.M.Maslov, K.S.Grishakov, M.A.Gimaldinova, K.P.Katin, Fullerenes Nanotubes and Carbon Nanostructures **28**, 97 (2020).

Исследование модулированных структур в двумерной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями

А.К.Муртазаев[1], Ж.Г.Ибаев [1,2]
[1] *Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*
e-mail: ibaev77@mail.ru
[2] *Дагестанский Государственный Университет, Махачкала, Россия*
e-mail: ibaev77@mail.ru

Для изучения квазиодномерных и квазидвумерных магнетиков применяют упрощенные многоэлектронные подходы с использованием моделей Гейзенберга и Изинга [1,2]. Полученные при этом результаты позволяют описать термодинамические и магнитные свойства реальных магнитных систем.

Модель Изинга с конкурирующими ферромагнитными и антиферромагнитными взаимодействиями на кубической решетке (так называемая ANNNI-модель) применяется для описания модулированного магнитного упорядочения возникающего в магнитных материалах. [8]. Аналогичная модель успешно используется для описания термодинамики масляных микроэмульсий и носит название модели Видома [9]. В данной работе приведены результаты по исследованию двумерного аналога такой модели (рис. 1).

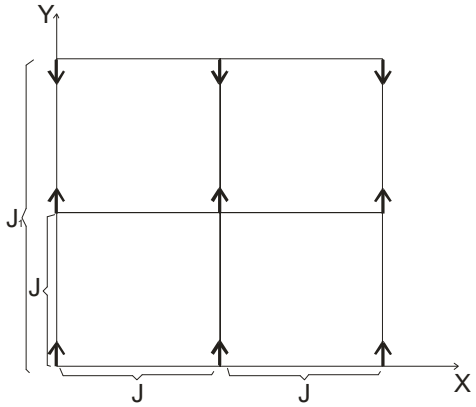


Рис.1 ANNNI-модель.

Гамильтониан модели:

$$H_{ANNNI} = -J\sum_{i,j} s_i s_j - J_1 \sum_i s_i s_{i+2}\,, \qquad (1)$$

где $s_i=\pm 1$, $J>0$ – параметр обменного взаимодействия соседних пар спинов, $J_1<0$ – параметр антиферромагнитного взаимодействия соседей, следующих за ближайшими вдоль оси Y.

Согласно литературным данным с понижением температуры ANNNI-модель испытывает фазовый переход второго рода из парамагнитного в ближайшее упорядоченное состояние, а переход «ферромагнетик – модулированная фаза» является переходом первого рода [10].

Для исследования термодинамических и магнитных явлений использовались системы квадратной формы с периодическими граничными условиями и размерами $L\times L$; $L=32$. Число спинов в моделируемой системе $N_{эф}$=1024. На ЭВМ генерировались Марковские цепи длиной $\tau=1000\tau_0$ ($\tau_0=10^4$ МК-шагов/спин – длина неравновесного участка). Усреднением вдоль этой цепи вычислялись термодинамические параметры системы. Кроме того, выполнялось усреднение по тысячи различным начальным

конфигурациям. При этом погрешность полученных результатов не превышает размеры используемых на рисунках символов.

Для исследования магнитных свойств модулированной области мы использовали величину:

$$M_Z = \frac{1}{L}\sum_{x}^{L} S_{x,y}, \qquad (2)$$

представляющую собой усредненную намагниченность цепочки спинов, расположенных перпендикулярно оси Y. В качестве параметра порядка использовано усредненное значение амплитуды модулированной структуры.

Параметры модулированных структур и температуры переходов между ними определялись с помощью математического аппарата спектрального анализа, основанного на преобразованиях Фурье

$$M_Z = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{N}[a_k \cos(2\pi kz/L) + b_k \sin(2\pi kz/L)], \qquad (3)$$

где

$$a_0 = \frac{1}{L}\sum_{z=1}^{L} M_Z, \qquad (4)$$

$$a_k = \frac{2}{L}\sum_{z=1}^{L} M_Z \cos(2\pi kz/L), \qquad (5)$$

$$b_k = \frac{2}{L}\sum_{z=1}^{L} M_Z \sin(2\pi kz/L), \qquad (6)$$

$$q = k/L, \qquad (7)$$

k – номер гармоники.

Поскольку модулированные структуры являются гармоническими, то волновое число q определяется значением k, при котором амплитудная функция $A_m = (a_k^2 + b_k^2)$ имеет максимум.

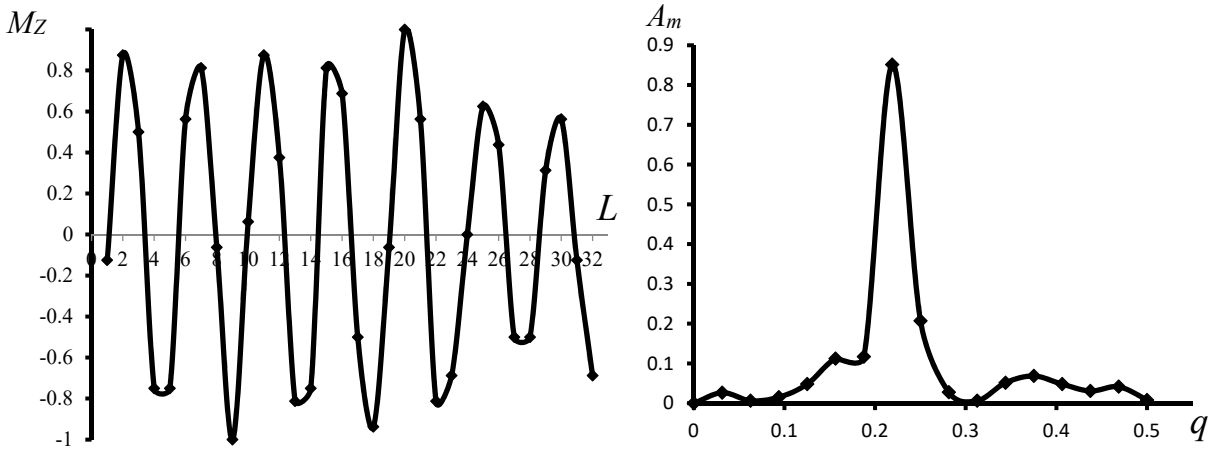


Рис. 2 Модулированная структура 2D ANNNI-модели при L=32, |J1/J|=1.0, t=1.95 и его спектр Фурье

На рис. 2. представлена характерное упорядочение возникающее в 2D ANNNI-модели при L=32, $|J_1/J|$=1.0, t=1.95 и соответствующий ему спектр Фурье. Как нетрудно увидеть по этому рисунку данная структура является

модулированной структурой которую можно приближенно описать с помощью гармонической функции:

$$M_z = A\cos(2\pi qz + \varphi) \qquad (8)$$

где A=0.749578 - амплитуда модулированной структуры, q=7/32 - волновое число, φ=3,14 - начальная фаза.

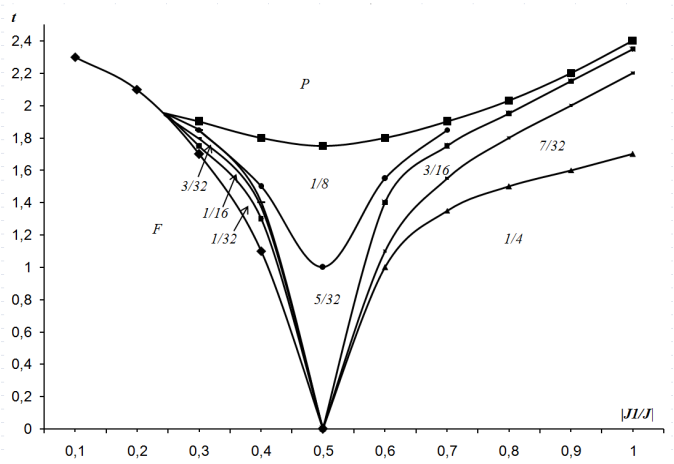


Рис.3 Фазовая диаграмма 2D ANNNI-модели

Используя результаты Фурье анализа модулированных структур возникающих в 2D ANNNI - модели при L=32 и различных температурах и значениях параметра конкурирующего взаимодействия нами была построена фазовая диаграмма двумерной анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями (рис. 3.)

Как видно по рис. 3 в двумерной анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями область с модулированным упорядочением локализована при значениях $0{,}2<|J_1/J|\leq 1{,}0$ и в температурном интервале $0{,}1<T<2{,}0$.

[1] А.А. Овчинников, И.И. Украинский, Г.Ф. Квенцель, УФН 108, 81 (1972).
[2] S.R. White, Phys. Reports **301**, 187 (1998).
[3] R.J. Elliott, Phys. Rev. 124, **346** (1961).
[4] B. Widom, J. Chem. Phys. **84**, 6943 (1986).
[5] A.K. Murtazaev, J.G. Ibaev, Solid State Communications **152**, 177 (2012).

Структурные фазовые переходы типа порядок-беспорядок в сплавах Fe-Ga

В.В. Соколовский, О.О. Павлухина, В.Д. Бучельников, М.А. Загребин, М.В. Матюнина, О.Н. Мирошкина, Д.Р. Байгутлин
Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
e-mail: vsokolovsky84@mail.ru

На сегодняшний день магнитострикционные материалы представляют собой вид функциональных материалов, основной особенностью которых является взаимодействие магнитной и механической энергии при приложении внешнего магнитного поля или напряжения. Открытие увеличения магнитострикции железа в десяти кратном размере за счет добавления галлия [1-3] привело к созданию новых конструктивных материалов на основе Fe-Ga. Сочетание высокой магнитострикции совместно с твердостью и обрабатываемостью делает гальфенолы перспективными сплавами для различных применений в микроэлектромеханических системах и сенсорных устройствах [3].

Функциональные свойства сплавов Fe-Ga чрезвычайно чувствительны к образованию различных кристаллических фаз [1-3] в зависимости от содержания галлия, способа литья сплава, размеров слитка, режима термообработки и т.д. Скорость охлаждения является одним из параметров, оказывающий очевидное влияние на фазовый переход от метастабильной фазы к равновесной фазе [3-5]. В работе [4] приведена экспериментальная термокинетическая диаграмма для сплава Fe-27%Ga. Согласно стабильной фазовой диаграмме этот состав характеризуется следующими последовательностями фаз: A2 (более 850°C) → B2 (850-680°C) → $D0_{19}$ (680-620°C) → $L1_2$ (620 - 0°C). Однако, в зависимости от скорости охлаждения может реализоваться разная последовательность фазовых превращений. Например, при скорости охлаждения 1 К/мин неупорядоченная фаза A2 переходит в частично беспорядочную фазу B2 между 760 и 720 ° C. Затем, возникает снова фаза A2, переходящая в фазу $D0_{19}$ в интервале температур от 660 до 600 ° C. Если скорость охлаждения выше 1 К/мин, фаза A2 превращается в более широком диапазоне температур (от 620 до 410 °C для скорости охлаждения 8 К/мин) одновременно в обе фазы $D0_{19}$ и $L1_2$.

Таким образом, интересным представляется исследование последовательности и температурные интервалы таких переходов в зависимости от скорости охлаждения образца в сплавах Fe-Ga. Данная работа посвящена моделированию методом Монте-Карло последовательности фазовых переходов и структуры в сплаве Fe-23ат%Ga и построению термокинетической диаграммы фазовых переходов в зависимости от различных скоростей охлаждения.

Согласно эксперименту в большом интервале температур присутствует смесь фаз D03+A2 с преобладающей долей фазы $D0_3$. В связи с этим, теоретическое исследование фазовых переходов в сплавах Fe-Ga выполнено с использованием кристаллической решетки со структурой $D0_3$. На основе данной структуры путем перестановки атомов можно описать все, наблюдаемые в эксперименте фазы кубической симметрии, а также их смесь. Исходную структуру $D0_3$ можно рассматривать в виде четырех, вложенных в друг друга, ГЦК подрешеток I-IV (Рис. 1).Сделать вывод о том, какая фаза наблюдается в сплаве при выбранной температуре можно по вероятности p^k_A размещения атомов Ga или Fe (индекс A) в определенном узле подрешеток (индекс k).

Фаза $D0_3$: $p^{I}_A = p^{II}_A = p^{III}_A \neq p^{IV}_A$

Фаза B2: $p^{I}_A = p^{II}_A \neq p^{III}_A = p^{IV}_A$

Фаза A2: $p^{I}_A = p^{II}_A = p^{III}_A = p^{IV}_A$.

Фаза $L1_2$: $p^{I}_{Ga} = p^{II}_{Ga}$, $p^{III}_{Ga} = p^{IV}_{Ga}=0$,

$p^{I}_{Fe} = p^{II}_{Fe} \neq p^{III}_{Fe} = p^{IV}_{Fe}$.

Параметры порядка, с помощью которых можно произвести идентификацию фаз, определяются следующим образом [6]

$$x_A=(p^{I}_A + p^{II}_A - p^{III}_A - p^{IV}_A)/4$$
$$y_A=(p^{I}_A - p^{II}_A)/2$$
$$z_A=(p^{III}_A - p^{IV}_A)/2$$

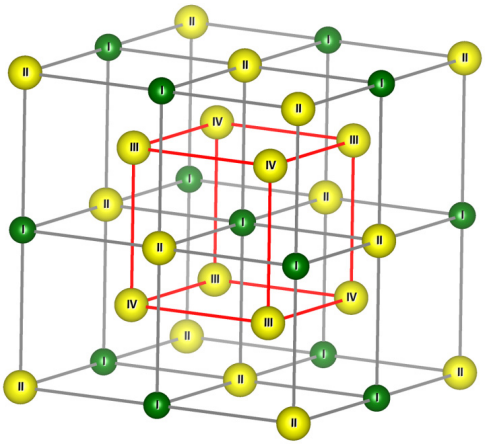


Рис. 1. Структура $D0_3$ -типа

Таким образом, соотношение параметров порядка для каждой из фаз характеризуются следующими выражениями: $x_A = y_A = z_A = 0$ (A2); $x_A \neq 0$, $y_A = z_A = 0$ (B2 и $L1_2$); $x_A \neq 0$, $y_A = 0$, $z_A \neq 0$ ($D0_3$).

Моделирование методом Монте-Карло выполнено в рамках гамильтониана Блюме-Эмери-Гриффитса (БЭГ) и алгоритма Метрополиса, используя модельную решетку $D0_3$-типа из 3925 атомов. Взаимодействие атомов учтено в рамках двух координационных сфер. Расчеты проведены как при понижении температуры из разупорядоченной высокотемпературной фазы A2, так и в зависимости от числа шагов Монте-Карло при постоянной температуре. Последнее позволяет исследовать протекание фазовых переходов в зависимости от времени. Гамильтониан БЭГ имеет вид [6]:

$$H = \sum_{<ij>}^{nn} \left(J_1 \sigma_i \sigma_j + K_1 \sigma_i^2 \sigma_j^2 \right) + \sum_{<ij>}^{nnn} \left(J_2 \sigma_i \sigma_j + K_2 \sigma_i^2 \sigma_j^2 \right),$$

где спиновая переменная σ принимает значения: -1 (атом Ga), +1 (атом Fe). Величины J_1, J_2, K_1, K_2 связаны с энергией связи W как $J_k = W_k/4$ и $K_k = -W_k/4$, где $k = 1, 2$ отвечает номеру координационной сферы.

Для моделирования кинетики протекания превращений в сплаве $Fe_{77}Ga_{23}$ рассматривалась энергия связи, зависящая от количества шагов

Монте-Карло (рис. 2). Максимальные значения энергий связи W_1 и W_2 выбраны из условия, что их среднее значение соответствует значению энергии формирования (E_{form}), полученной из *ab initio* расчетов (E_{form}=85.6 мэВ/атом или E_{form}=992 k_B).

Процесс охлаждения реализован при постоянных значениях энергий W_1 и W_2 в соответствии с фиксированным числом шагов Монте-Карло и изменении температуры с 1500 до 800 K, 700 K и 373 K, соответственно. Процесс изотермического отжига (т.е. учет зависимости энергий связи от числа шагов Монте-Карло) осуществлен при указанных температурах.

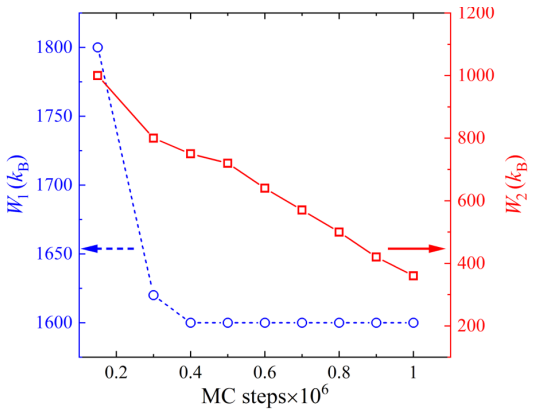


Рис. 2. Зависимости значений энергий связи W_1 и W_2 от числа шагов Монте-Карло

На рис. 3 приведены результаты расчета температурных зависимостей параметров порядка при различном количестве шагов Монте-Карло (разной скорости охлаждения) для сплава $Fe_{77}Ga_{23}$.

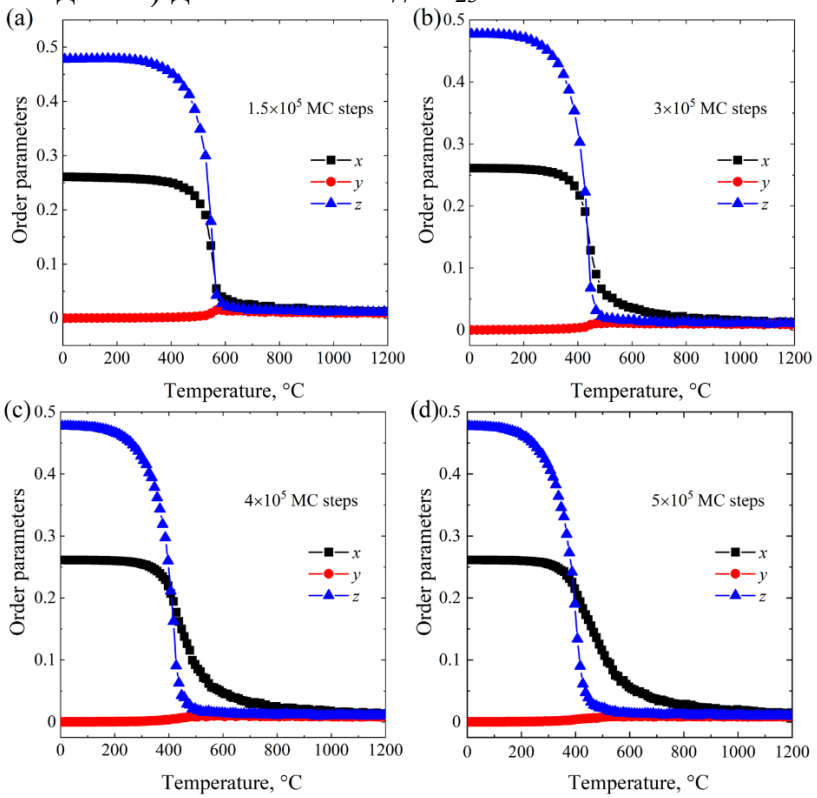


Рис. 3. Температурные зависимости параметров порядка при a) 1.5×10^5; b) 3×10^5; c) 4×10^5; d) 5×10^5 шагов Монте-Карло (аналог различной скорости охлаждения).

Из рис. 3 следует, что при высоких температурах наблюдается неупорядоченная фаза A2 (x=y=z=0). При высокой скорости охлаждения

(1.5×10^5) наблюдаются один фазовый переход из A2 фазы в смешанную фазу A2 и $D0_3$ с преобладанием $D0_3$ фазы. Уменьшение скорости охлаждения влечет к последовательности превращений A2→B2 ($L1_2$)→$D0_3$ или в состояния из смеси фаз, наблюдаемой экспериментально [4,5].

На рис. 4(a) представлена зависимость содержания фазы $L1_2$ от температуры для числа шагов Монте-Карло 5×10^5 (медленное охлаждение). Видно, что максимальное значение фазы $L1_2$ составляет порядка 11 %, тогда как содержание фазы $D0_3$ увеличивается с уменьшением температуры.

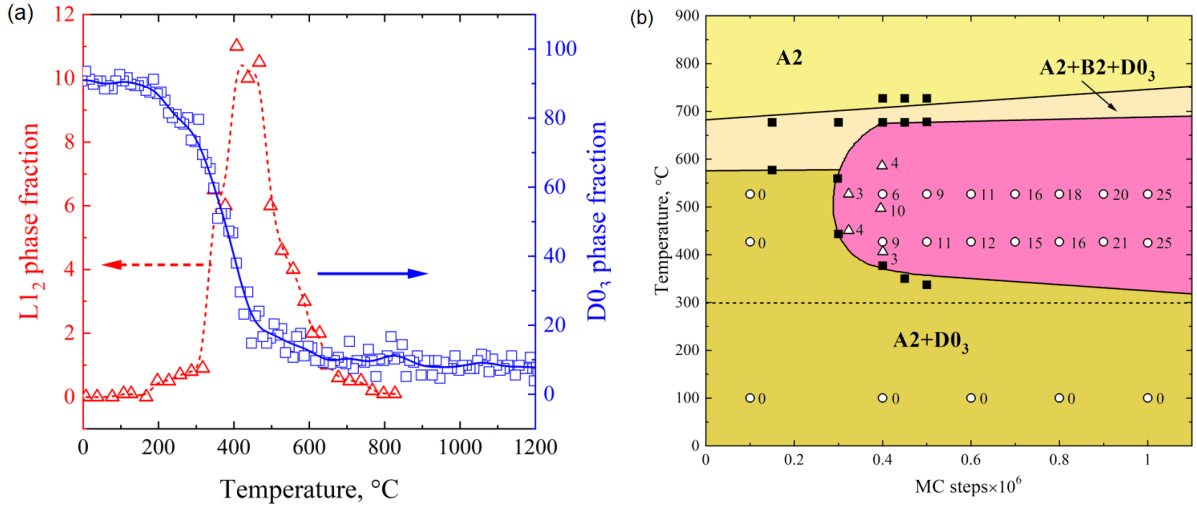


Рис. 4. (a) Зависимость содержания фаз $L1_2$ и $D0_3$ от температуры для 5×10^5 числа шагов Монте-Карло. Рис. 12. (b) термокинетическая фазовая диаграмма. Квадратные символы - охлаждение при постоянном числе шагов Монте-Карло. Круглые символы - изотермическая выдержка при изменении числа шагов Монте-Карло. Открытые символы соответствуют содержанию $L1_2$ фазы. Закрашенные символы отображают точки фазовых переходов.

На основании выполненных расчетов определены температуры фазовых переходов и построена фазовая диаграмма, представленная на рис. 4(b). Закрашенная темным тоном область соответствует смешанной фазе содержащей компоненты фаз A2, B2, $D0_3$ и $L1_2$. Уменьшение скорости охлаждения приводит к появлению фазы $L1_2$ и увеличению ее объемной доли (см. открытые квадратные символы). Однако при моделировании изотермической выдержки наблюдается существенное увеличение содержание фазы $L1_2$ (круглые символы), что соответствует эксперименту [4,5].

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 17-72-20022.

[1] A.E. Clark et al. IEEE Trans. Magn. 36, 3238 (2000).
[2] A.E. Clark et al. IEEE Trans. Magn. 37, 2678 (2001).
[3] I.S. Golovin et al., Phys. Met. Metallogr. 121, 937 (2020).
[4] I.S. Golovin et al., Intermetallics. 114, 106610 (2019).
[5] I.S. Golovin et al., Mater. Lett. 263, 127257 (2019).
[6] F. Lanzini et al., Phys. Rev. B **77**, 134207 (2008).

Исследование влияния магнитного поля на термодинамические и магнитные свойства модели Поттса с q=4 на гексагональной решетке методом Монте-Карло

А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева
Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
e-mail: mazagaeva86@mail.ru

В настоящее время в физике конденсированных состояний активно проводятся исследования магнитных структур, фазовых переходов, критических и термодинамических свойств спиновых систем с конкурирующим обменным взаимодействием.

Для изучения физических свойств магнитных материалов широко используют модели Изинга, Гейзенберга, Поттса и др. Эти модели также описывают большой класс реальных физических систем: слоистые магнетики, пленки жидкого гелия, сверхпроводящие пленки, адсорбированные пленки и др. [1-3].

Важную роль в поведении таких систем может играть влияние внешнего магнитного поля и величина взаимодействия вторых ближайших соседей [4–8].

В связи с этим в данной работе нами проводится исследование влияния внешнего магнитного поля на термодинамические и магнитные свойства двумерной модели Поттса с числом состояний спина q=4 на гексагональной решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей.

Гамильтониан модели Поттса с числом состояний q=4 с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей, а также внешнего магнитного поля имеет следующий вид:

$$H = -J_1 \sum_{i,j} \cos\theta_{i,j} - J_2 \sum_{i,k} \cos\theta_{i,k} - H \sum_{\langle i \rangle} S_i \qquad (1)$$

где J_1 и J_2 – параметры обменных ферро- ($J_1>0$) и антиферромагнитного ($J_2<0$) взаимодействия соответственно для первых и вторых ближайших соседей, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами S_i - S_j и S_i – S_k, H - величина магнитного поля (приводится в единицах J_1). Величина значений внешнего магнитного поля менялась в интервале $0.0 \le H \le 7$. Магнитное поле направлено вдоль

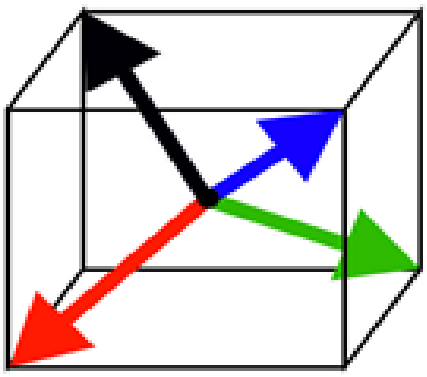


Рис. 1. Схематическое представление модели.

одного из направлений спина. Схематическое и цветовое представление модели представлено на рисунке 1. На этом рисунке приведены направления спинов для каждого из 4 значений спина и соответствующее цветовое представление. Как видно из рисунка, направления векторов заданы таким образом, что выполняется равенство:

$$Cos\,\theta_{i,j} = \begin{cases} 1, & если \quad S_i = S_j \\ -1/3, & если \quad S_i \neq S_j \end{cases} \qquad \theta_{i,j} = \begin{cases} 0, & если \quad S_i = S_j \\ 109.47°, & если \quad S_i \neq S_j \end{cases}$$

В настоящее время такие системы на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются методом Монте-Карло [9]. В данном исследовании нами был использован реплечный обменный алгоритм метода Монте-Карло [10]. На основе гистограммного метода анализа данных и метода кумулянтов Биндера четвертого порядка проведен анализ характера фазовых переходов.

Получены магнитные структуры основного состояния в широком интервале значений величины магнитного поля. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины магнитного поля. Установлено, что для значений поля в интервалах $0.0 \leq H \leq 1$ и $2.5 \leq H \leq 3.5$ наблюдается фазовый переход первого рода, а в интервале $1.5 \leq H \leq 1.7$ наблюдается фазовый переход второго рода. В интервале значений поля $4 \leq H \leq 7.0$ фазовый переход размывается.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научных проектов № 19-02-00153-а.

[1] H.T. Diep, Frustrated Spin Systems. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore (2004). P. 624.
[2] F.Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
[3] W. Zhang, Y. Deng, Phys. Rev. E **78**, 031103 (2008).
[4] А.З. Паташинский, В.Л. Покровский, Флуктуационная теория фазовых переходов. Наука, М. (1982).
[5] Ш. Ма, Современная теория критических явлений. Мир, М. (1980).
[6] Р.С. Гехт. УФН **159**, 261 (1989).
[7] K. Katsumata, H. Aruga Katori, S. Kimura, Y. Narumi, M. Hagiwara, K. Kindo, Phys. Rev. B **82**, 104402 (2010).
[8] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Д.Р. Курбанова, М.К. Бадиев, ФТТ **60**, 1162 (2018).
[9] A.K. Murtazaev, M.K. Badiev, M.K. Ramazanov, M.A. Magomedov, Physica A **555**, 124530 (2020).
[10] A. Mitsutake, Y. Sugita, Y. Okamoto, Biopolymers (Peptide Science) **60**, 96 (2001).

Структурная стабильность $CuAl_2O_4$ под давлением

П.А. Агзамова, С.В. Стрельцов
Институт физики металлов имени М. Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: polly@imp.uran.ru

Семейство оксидо AB_2O_4 (A – двухвалентный катион, B – трёхвалентный катион) известно своими уникальными физическими свойствами. Так, среди них есть мультиферроики, материалы с зарядовым и орбитальным упорядочениями. Также некоторые из этих шпинелей демонстрируют довольно необычные искажения кристаллической структуры, что может сопровождаться сильной модификацией их магнитных свойств. К числу таких соединений относится алюминат меди $CuAl_2O_4$, в котором ионы Cu^{2+} находятся в идеальном тетраэдрическом окружении атомов кислорода вплоть до самых низких температур. Известно, что оксиды меди обладают сильно искажёнными кристаллическими структурами, где появление искажений обусловлено эффектом Яна-Теллера. В $CuAl_2O_4$ 3d-ионы меди обладают конфигурацией $3d^9$, то есть 3d-уровень расщепляется на три высоколежащих по энергии t_{2g}-уровня и два низколежащих e_g-уровня. В таком сценарии снятие вырождения должно происходить вследствие эффекта Яна-Теллера, признаков которого в $CuAl_2O_4$, однако, обнаружено не было [1]. Теоретически [2,3] было показано, что отсутствие ян-теллеровских искажений может быть связано с образованием состояний j_{eff} = ½. Возможная стабилизация состояния j_{eff} = 1/2 делает $CuAl_2O_4$ уникальной системой, похожей на известные иридаты [4, 5], но основанной на 3d-переходном металле Cu. Первые теоретические расчеты продемонстрировали, что можно ожидать сильной анизотропии обменной связи, и подчеркнули важность эффектов фрустрации, поскольку магнитные ионы Cu^{2+} образуют сильно фрустрированную решетку алмаза [2].

Однако все эти результаты основаны: 1) на предположении, что существует идеальное упорядочение ионов Cu^{2+} и они занимают только тетраэдрические позиции, хотя имеются экспериментальные свидетельства наличия антиструктурных дефектов [1,6]; 2) всегда существует конкуренция между эффектом Яна-Теллера и спин-орбитальной связью, и, например, теоретические расчеты показывают, что приложение давления может изменить баланс между этими двумя факторами, и ожидается, что CuAl2O4 покажет искажения Яна-Теллера при приложении давления [3].

В данной работе основное внимание уделялось теоретическим исследованиям структурных свойств $CuAl_2O_4$ под высоким давлением. Был исследован вопрос устойчивости алюмината меди при давлениях от 0 до 10 Гпа путём проведения серии первопринципных расчётов зависимостей полной энергии от давления для реакции $CuAl_2O_4 \rightarrow CuO + Al_2O_3$.

Проведенные расчеты DFT + U + SOC показали, что при давлении порядка 8 ГПа $CuAl_2O_4$ сложным образом разлагается до конечной смеси исходных оксидов CuO и Al_2O_3, подтвердив экспериментальные исследования порошковой дифракции рентгеновских лучей *ex-situ* [7].

Анализ полученных в рамках данной работы результатов продемонстрировал, что одним из важных факторов, приводящих к разложению, является сжимаемость CuO. Также показано, что электронные корреляции работают в противоположном направлении, дополнительно стабилизируя CuO под давлением.

[1] R. Nirmala, K.-H. Jang, H. Sim, H. Cho, J. Lee, N.-G. Yang, S. Lee, R. M. Ibberson, K. Kakurai, M. Matsuda, S.-W. Cheong, V. V. Gapontsev, S. V. Streltsov and J.-G. Park, J. Phys.: Condens. Matter **29** 13LT01 (2017).
[2] S. A. Nikolaev, I. V. Solovyev, A. N. Ignatenko, V. Yu. Irkhin and S. V. Streltsov, Phys. Rev. B **98** 201106(R) (2018).
[3] C. H. Kim, S. Baidya, H. Cho, V. V. Gapontsev, S. V. Streltsov, D. I. Khomskii, J. Park, A. Go and H. Jin, Phys. Rev. B **100** 161104 (2019).
[4] H. Takagi, T. Takayama, G. Jackeli, G. Khaliullin and S. E. Nagler, Nat. Rev. Phys. **1** 264 (2019).
[5] S. M. Winter, A. A. Tsirlin, M. Daghofer, J. van den Brink, Y. Singh, P. Gegenwart and R. Valenti, J. Phys.: Cond. Matt. **29**, 493002 (2017).
[6] H. O'Neill, M. James, W. A. Dollase and S. A. T. Redfern, Eur. J. Miner. **17** 581 (2005).
[7] P. A. Agzamova, A. A. Belik, S. V. Streltsov, J. Phys.: Cond. Matt. **33**, 35403 (2020).

Кинетика нуклеации в геометрической финслер-лагранжевой модели фазовых переходов в ленгмюровских монослоях

Н.Г.Крылова[1], Г.В.Грушевская[2]
[1] *Белорусский государственный аграрный технический университет, Минск, Беларусь*
e-mail: nina-kr@tut.by
[2] *Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь*
e-mail: grushevskaja@bsu.by

Модификация поверхности тонкими наноструктурированными пленками востребована в наноэлектронике, нанофотонике и биосенсорике. Технология Ленгмюра-Блоджетт является одной из перспектиных технологий, позволяющих формировать высокоупорядоченные наноразмерные объекты на основе органических амфифильных соединений [1]. Формирование таких структур реализуется при сжатии ленгмюровского слоя толщиной в одну молекулу (монослоя) в процессе двумерных (2D) фазовых переходов 1-го рода из состояния растянутой жидкости в жидкокристаллическое, а затем − в 2D кристаллическое состояние [2]. После чего монослой может быть перенесен на твердую подложку. Так как структура доменов сжатых монослоев на поверхности жидкой субфазы сохраняется при их переносе, теоретическое моделирование фазовых переходов в ленгмюровских монослоях является актуальной задачей. В настоящее время, описание 2D фазовых переходов реализуется в рамках теории среднего поля Ландау, или с использованием методов молекулярной динамики с полуэмпирическими парными потенциалами [3−5]. Однако, экспериментально установлено, что протекание 2D фазовых переходов существенно зависит от параметров субфазы и скорости сжатия [6, 7]. Эти эффекты обусловлены электрокапиллярными явлениями: поворотом диполей на границе раздела фаз и перераспределением плотности заряда двойного слоя Гельмгольца. При построении моделей 2D фазовых переходов первого рода электрокапиллярные явления не учитывались. Ранее [8−10] нами была предложена финслер-лагражева геометрическая теория для описания динамики ленгмюровского монослоя.

Целью данной работы является исследование электрокапиллярных эффектов в кинетике нуклеации в ленгмюровском монослое в рамках финслер-лагранжевой геометрической теории.

Рассматривает модель нуклеации, когда каждый зародыш новой (2D кристаллической) фазы характеризуется своим временем релаксации τ_i; в пределе бесконечного числа времен релаксации возможен предельный переход:

$$\tau_i = \frac{\Delta t_i}{\Delta s} \quad \rightarrow \quad \tau \equiv \dot{\xi} = \frac{dt}{ds}, \tag{1}$$

где s − эволюционный параметр. Динамика такого метастабильного монослоя моделируется в расширенном конфигурационном пространстве $\left(\vec{r},\xi,\dot{\vec{r}}_{\xi},\dot{\xi}_{s},s\right)$. Здесь $\vec{r}$ – 2D радиус-вектор, ξ – временная координата, точками обозначены производные по эволюционному параметру s. Метрическая функция F пространства определяется из требования экстремальности геодезических в конфигурационном финслер-лагранжевом пространстве и задается в виде:

$$F^2 = A\frac{\dot{\xi}^3}{\dot{r}} + B\dot{\xi}^2 - C\frac{(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2)}{2}, \qquad (2)$$

где $C = ma_c^2 n_c$, $A(t,\, r)$ и $B(t,\, r)$ – функции, определяемые видом эффективного U потенциала электрокапиллярных сил, a_c и n_c − размер и плотность критического зародыша.

На основе анализа процесса переориентации диполей двойного слоя Гельмгольца при сжатии монослоя со скоростью V нами был построен эффективный потенциал U в точке с координатами (r,φ) в момент времени t в виде:

$$U_1(\dot{r},r,t;V) = -\tilde{k}\left[P_1 e^{\frac{2Vt}{r}} - \frac{2}{3}(Vt)^5\left(6-\frac{Vt}{r}\right)Ei\left[\frac{2Vt}{r}\right] - \frac{V}{\dot{r}}\left(P_2 e^{\frac{2Vt}{r}} - \frac{4}{3}(Vt)^5 Ei\left[\frac{2Vt}{r}\right]\right)\right], \qquad (3)$$

где

$$P_1 = -\frac{3}{4}r^5 + (Vt)r^4 + \frac{3}{4}(Vt)^2 r^3 + \frac{5}{6}(Vt)^3 r^2 + \frac{11}{6}(Vt)^4 r - \frac{1}{3}(Vt)^5,$$

$$P_2 = r^5 + \frac{1}{2}(Vt)r^4 + \frac{1}{3}(Vt)^2 r^3 + \frac{1}{3}(Vt)^3 r^2 + \frac{2}{3}(Vt)^4 r, \quad \tilde{k} = \frac{q^2 k}{5\varepsilon\varepsilon_0}\frac{n_0^2}{R_0^2},$$

и упрощенный потенциал

$$U_2(\dot{r},r,t;V) = -K\left[\left(P_3 - r^5\frac{V}{\dot{r}}\right)e^{\frac{2Vt}{r}} - \frac{4}{45}(Vt)^5\left(-1+\frac{Vt}{r}\right)Ei\left[\frac{2Vt}{r}\right]\right], \qquad (4)$$

$$P_3 = -\frac{4}{3}r^5 + \frac{16}{15}(Vt)r^4 + \frac{1}{30}(Vt)^2 r^3 + \frac{1}{45}(Vt)^3 r^2 + \frac{1}{45}(Vt)^4 r + \frac{2}{45}(Vt)^5.$$

Тогда явный вид метрических параметров A и B для случая потенциала U_1 (3) такой:

$$A = \tilde{p}V\left(P_2 e^{\frac{2Vt}{r}} - \frac{4}{3}(Vt)^5 Ei\left[\frac{2Vt}{r}\right]\right), \quad B = \Lambda^2 - \tilde{p}\left(P_1 e^{\frac{2Vt}{r'}} - \frac{2}{3}(Vt)^5\left(6-\frac{Vt}{r}\right)Ei\left[\frac{2Vt}{r}\right]\right),$$

для потенциала U_2:

$$A = \tilde{p}Vr^5 e^{\frac{2Vt}{r}}, \quad B = \Lambda^2 - \tilde{p}\left(P_3 e^{\frac{2|Vt}{r}} - \frac{4}{45}(Vt)^5\left(-1+\frac{Vt}{r}\right)\mathrm{Ei}\left[\frac{2Vt}{r}\right]\right),$$

$\tilde{p} = \dfrac{q^2 k}{5\varepsilon\varepsilon_0 n_c}\dfrac{n_0^2}{R_0^2}$, Λ, k – феноменологические постоянные, q – заряд молекулы, R_0, n_0 – радиус и концентрация молекул в монослое в начальный момент времени.

Динамика системы определяется уравнениями Лагранжа-Эйлера:

$$\frac{dy^i}{ds} + 2G^i = 0, \qquad G^i = \frac{1}{4} g^{il}\left\{2\frac{\partial g_{jl}}{\partial x^k} - \frac{\partial g_{jk}}{\partial x^l}\right\} y^j y^k . \qquad (5)$$

где $g_{ij}\left(x^k, y^k\right) = \dfrac{1}{2}\dfrac{\partial^2 F^2}{\partial y^i \partial y^j}$, $x^j = (t(s), r(s), \varphi(s))$ и $y^j \equiv (\dot{\xi} = \dfrac{dt}{ds}, \dot{r}(s), \dot{\varphi}(s))$.

Уравнения (5) решались численно. Результаты моделирования представлены на рис. 1.

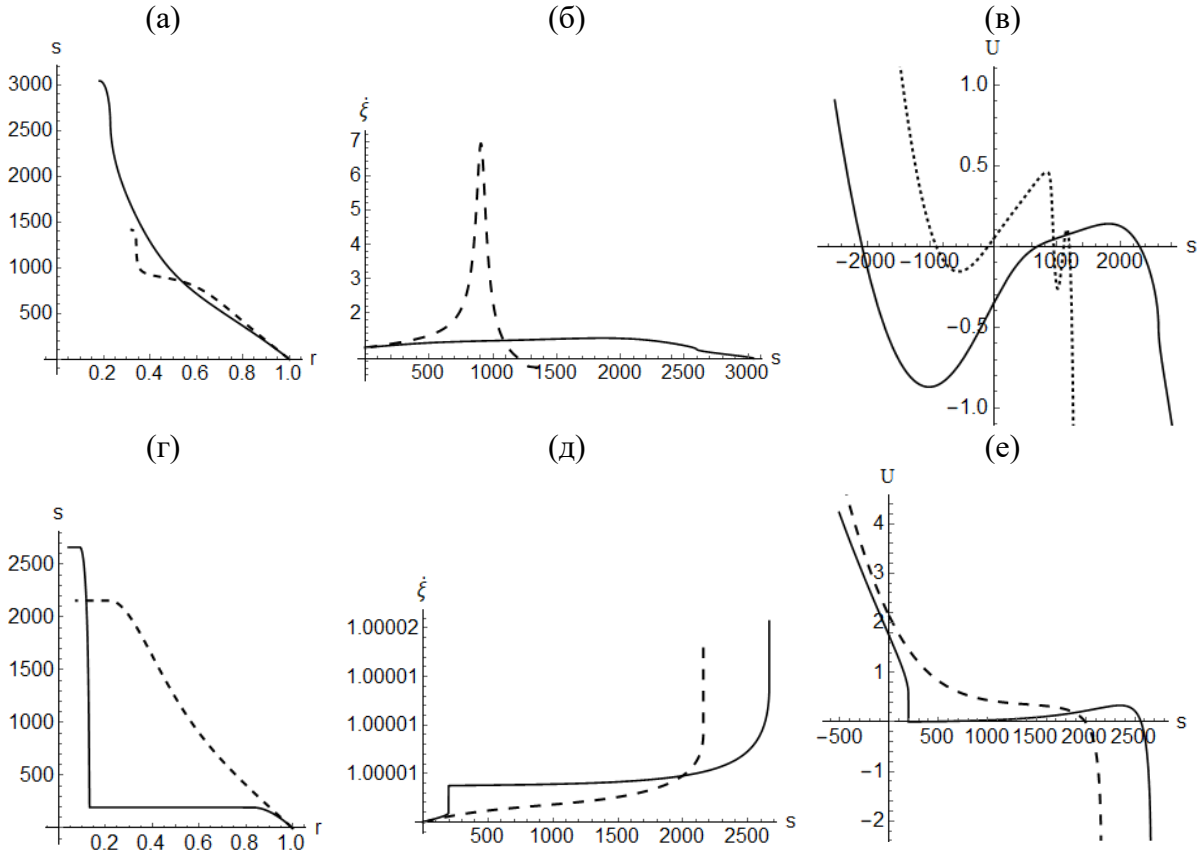


Рис.1 Изотермы сжатия s(r) (а, г), распределение времен релаксаций $\dot{\xi}(s)$ (б, д) и потенциалы зародышей фазы U (в, е), рассчитанные вдоль геодезических в конфигурационном пространстве монослоя.
Расчеты выполнены для потенциалов U_1 (а-в) и U_2 (г-е), скоростей сжатия V = 1,2 см/мин (сплошные кривые) и 2,4 см/мин (пунктирные кривые).

Как видно из рис.1б,д (сплошные линии), при малых скоростях V сжатия монослоя скорость нуклеации можно приблизительно считать постоянной. Образование зародышей происходит с размерами близкими к критическому $\dot{\xi} = 1$; вид потенциалов при этом имеет единственный

минимум, характерный для метастабильного состояния системы (см. рис.1в, е). При больших скоростях сжатия ленгмюровский монослой дестабилизируется с энергией и скоростью, достаточными, чтобы преодолеть энергетический барьер нуклеации, состояние монослоя можно характеризовать как перенасыщение фазы. Точный учет электрокапиллярных эффектов в случае использования эффективного потенциала U_1 показал, что при этом могут образовываться зародыши фаз с размерами значительно больше критического ($\dot{\xi} = 7$) за счет появления дополнительного локального минимума в потенциале (см. рис.1в). Зависимость потенциала $U_2(s)$ при высоких скоростях сжатия V не имеет минимумов, как видно на рис.1е, вид потенциала типичен для гетерогенной нуклеации, когда при достаточно большом пересыщении нуклеация протекает безбарьерно [11]. Размеры образующихся зародышей фаз при этом возрастают с ростом времени, но остаются близкими к размеру критического зародыша. Анализ изотерм, полученных для больших и малых скоростей сжатия для разных модельных потенциалов, и сравнение с поведением экспериментальных кривых [6, 9] показывает, что потенциал U_1 более точно описывает кинетику нуклеации в ленгмюровских монослоях.

Таким образом, электрокапиллярные явления на границе раздела фаз приводят к формирование зародышей фаз с размерами выше критического в условиях быстрого сжатия за счет появления дополнительного локального минимума в потенциале.

[1] H. Möhwald. G. Brezesinski, Langmuir **32**, 10445 (2016).
[2] Л. М. Блинов, УФН **155**, 443 (1988).
[3] S. Karaborni, S. Toxvaerd, J. Chem. Phys. **96**, 5505 (1992).
[4] V. M. Kaganer, H. Möhwald, P. Dutta, Rev.Mod.Phys. **71**, 779 (1999).
[5] E. O'Connor, Discontinuous molecular dynamics studies of model Langmuir monolayers. Thesis, University of Prince Edward Island, Canada (2006).
[6] V. B. Fainerman, D. Vollhardt, J. Phys. Chem. B 106, 345 (2002).
[7] J. Kmetko, A. Datta, G. Evmenenko, P. Dutta, J. Phys. Chem. B 105, 10818 (2001).
[8] V. Balan, H. Grushevskaya, N. Krylova, M. Neagu, J. Nonlin. Phen. in Complex Sys 19, 223 (2016).
[9] Н.Г. Крылова, Г.В. Грушевская, В.М. Редьков, Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. 3, 66 (2017).
[10] V. Balan, H.V. Grushevskaya, N.G. Krylova, G.G. Krylov, Applied Sciences **22**, 94 (2020).
[11] Ф. М. Куни, А. К. Щекин, А. П. Гринин, УФН **171**, 345 (2001).

Компьютерное моделирование магнитных свойств антиферромагнетика $RbFe(MoO_4)_2$ во внешнем магнитном поле

М.К.Рамазанов, А.К.Муртазаев, М.А. Магомедов
Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра, Махачкала, Россия
e-mail: sheikh77@mail.ru

Классические двумерные антиферромагнетики на правильной геометрической решетке обладают необычными магнитными свойствами. Это связано с фрустрацией и вырождением спиновых конфигураций. Кристалл $RbFe(MoO_4)_2$ представляет собой слоистый антиферромагнетик на треугольной решетке [1]. Для изучения особенностей кристалла $RbFe(MoO_4)_2$ на основе метода Монте-Карло может быть использована модель Гейзенберга. В данной работе проводится численное исследование магнитных и термодинамических свойств квазидвумерного антиферромагнетика $RbFe(MoO_4)_2$ во внешнем магнитном поле на основе репличного метода Монте-Карло [2]. Для описания данного кристалла нами был использован гамильтониан модели Гейзенберга

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j) - J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (S_i \cdot S_l) - D \sum_{\langle i \rangle} (S_i^z)^2 - H \sum_{\langle i \rangle} S_i , \qquad (1)$$

где $|\vec{S}_i|$ трехкомпонентный единичный вектор (классический спин) $\vec{S}_i = \left(S_i^x, S_i^y, S_i^z\right)$, H величина магнитного поля (выражается в единицах J_1). Первый член в формуле (1) учитывает обменное антиферромагнитное взаимодействие ближайших соседей внутри слоев ($J_1<0$), а второй - ближайших соседей между слоями ($J_2<0$). Отношение межплоскостного обменного взаимодействия к внутриплоскостному $J_2/J_1=0.05$. Третий член в формуле (1) учитывает анизотропию типа «легкая плоскость» (D=0.57 – постоянная анизотропии). Таким образом моделирование проводилось с учетом всех характеристик кристалла.

Получены температурные зависимости намагниченности, параметра порядка и теплоемкости при разных значениях магнитного поля H. Особый интерес представляет обнаружение плато на зависимости намагниченности от величины магнитного поля.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-02-00153-а.

[1] A.I. Smirnov, H. Yashiro, S. Kimura, M. Hagiwara, Y. Narumi, K. Kindo, A. Kikkawa, K. Katsumata, A.Ya. Shapiro, L.N. Demianets, Phys. Rev. B. **75**, 134412 (2007).
[2] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **106**, 72 (2017).

Влияние магнитного поля на термодинамические свойства модели Гейзенберга на треугольной решетке

А.К.Муртазаев, М.К.Бадиев, М.К.Рамазанов, М.А.Магомедов, Я.К.Абуев
Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
e-mai: m_zagir@mail.ru

В последние десятилетия значительное внимание уделяется исследованию магнитных структур, фазовых переходов (ФП), термодинамических и критических свойств в спиновых системах с фрустрациями. Это связано с тем, что такие системы проявляют поведение, существенно отличное от соответствующих нефрустрированных систем. Причина такого поведения заключается в сильном вырождении в спиновой подсистеме, эффективном ослаблении связи, и, как следствие, высокой чувствительности к различным возмущающим факторам.

Одним из наиболее интенсивно исследуемых фрустрированных моделей является антиферромагнитная модель Гейзенберга на слоистой треугольной решетке. К настоящему моменту времени, эта модель достаточно хорошо изучена как для квантовых, так и для классических систем [1-5]. Однако остаются невыясненными некоторые вопросы, связанные с влиянием внешнего магнитного поля на ФП, термодинамические, критические и магнитные свойства слоистых антиферромагнетиков с треугольной геометрией.

С одной стороны, экспериментальные, численные, а также теоретические данные, полученные методом ренормгрупп на основе ε-разложения, свидетельствуют о наличии ФП второго рода и принадлежности антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке к новому киральному классу универсальности критического поведения. С другой стороны, имеются данные, полученные с использованием непертурбативного подхода метода ренормгрупп, которые показывают наличие в этой модели ФП первого рода, а также слабо выраженного ФП первого рода, близкого к ФП второго рода с эффективными критическими индексами.

Анализ литературных данных показывает, что внешнее магнитное поле влияет на многие физические свойства спиновых систем. Поэтому в данной работе нами изучается влияние магнитного поля на характер ФП, магнитные и термодинамические свойства антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке.

Гамильтониан антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке может быть представлен в следующем виде [6]:

$$\mathrm{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - h \sum_i \vec{S}_i^z \,, \qquad (1)$$

где $\vec{S}_i$ – трехкомпонентный единичный вектор $\vec{S}_i = \left(S_i^x, S_i^y, S_i^z\right)$, $J<0$ – константа антиферромагнитного обменного взаимодействия. Решетка состоит из двумерных треугольных слоев, сложенных по ортогональной оси. Первый член в формуле (1) характеризует антиферромагнитное взаимодействие всех ближайших соседей, h - внешнее магнитное поле. Величина значений внешнего магнитного поля менялась в интервале $0.0 \le h \le 12$.

Для анализа характера ФП нами был использован гистограммный метод анализа данных метода МК [7]. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 12 \div 90$, где L измеряется в размерах элементарной ячейки.

На рис. 1 показана магнитная структура основного состояния исследуемой модели, полученная нами для соседних слоев. Структура упорядоченной фазы образована чередованием структур, показанных на рис. 1.

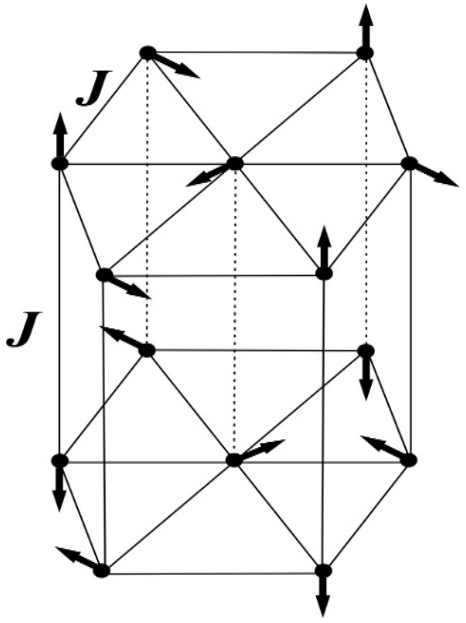


Рис.1. Магнитная структура основного состояния.

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости C и восприимчивости χ нами использовались выражения:

$$C = (NK^2)\left(\left\langle U^2 \right\rangle - \left\langle U \right\rangle^2\right), \tag{2}$$

$$\chi = \begin{cases} (NK)\left(\left\langle m^2 \right\rangle - \left\langle |m| \right\rangle^2\right), T < T_N \\ (NK)\left\langle m^2 \right\rangle, \qquad T \ge T_N \end{cases} \tag{3}$$

где $K = |J| / k_B T$, N – число частиц, U – внутренняя энергия, m – намагниченность.

Намагниченность системы вычислялось по формуле:

$$m = \frac{3}{N}\sqrt{\left\langle M_x^2 + M_y^2 + M_z^2 \right\rangle / 3}\ , \tag{5}$$

Намагниченность подрешетки определялась следующим образом [8]:

$$\left\langle \left| \vec{M}_r \right| \right\rangle = \left\langle \sqrt{S_x^2 + S_y^2 + S_z^2} \right\rangle, r = a, b, c. \tag{6}$$

На рис. 3 представлены температурные зависимости теплоемкости C и восприимчивости χ полученные для системы с линейными размерами $L=36$ при различных значениях величины магнитного поля h. На этом рисунке

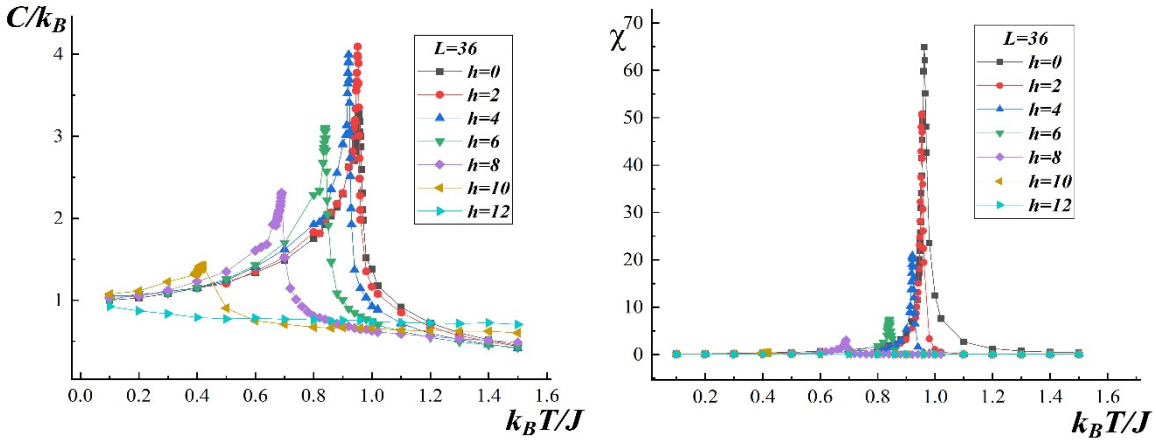


Рис.3. Зависимость теплоемкости C/k_B и восприимчивости χ от температуры при разных значениях h.

мы наблюдаем, что в интервале $0 \leq h \leq 10$ вблизи критической температуры наблюдается хорошо выраженный максимум. Отметим, что рост величины магнитного поля h сопровождается с уменьшением и сдвигом максимумов в сторону низких температур. Физическая картина происходящего объясняется тем, что увеличение величины магнитного поля приводит к быстрому упорядочению системы, уменьшению флуктуаций и соответственно уменьшается температура ФП. При значениях магнитного поля $h \geq 10$ максимумы теплоемкости и восприимчивости становятся более плавными или вовсе исчезают. Это обусловлено тем, что сильное магнитное поле подавляют флуктуации в системе и ФП в системе размывается.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-02-00153

[1] H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jap. 61, 1299 (1992).
[2] M.V. Gvozdikova, P.E. Melchy, M.E. Zhitomirsky, J. Phys.: Condens. Matter 23, 164209 (2011).
[3] H. Kawamura and M. Kikuchi, Phys. Rev. B 47, 1134 (1993).
[4] H. Kawamura, A. Yamamoto, and T. Okubo, J. Phys. Soc. Jpn. 79, 023701 (2010).
[5] M. Kazuaki and O. Yukiyasu, Phys. Rev. B 101, 184427 (2020).
[6] H. Kawamura and S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. 54, 4530 (1985).
[7] F. Wang, and D.P. Landau, Phys. Rev. Lett. 86, 2050 (2001).
[8] P. Calabrese, P. Parruccini, A. Pelissetto, E. Vicari, Phys. Rev. B 70, 174439-1 (2004).

Гистограммный анализ трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с вмороженным беспорядком при *q*=5

А.К.Муртазаев [1], А.Б.Бабаев [1, 2], Г.Я.Атаева [1], М.А. Бабаев [3]
[1]*Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*
[2]*Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН, Махачкала, Россия*
[3]*Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия*
e-mail: ataeva20102014@mail.ru

Методы Монте-Карло с использованием современных алгоритмов зарекомендовали себя как мощный инструмент для систематического изучения магнитных систем, особенно при изучении фазовых переходов (ФП) и магнитных явлений [1]. Связанно это с тем, что моделирование с использованием методов Монте-Карло (МК) позволяет изучать более реалистичные модели и учитывать усложняющие факторы, всегда присутствующие в реальных материалах [1-5].

Модель Поттса часто применяется для описания реальных физических систем. Обусловлено это тем, что решеточная структура данной модели изоморфна многим таким системам как: слоистый магнетик, аэрогели, пленки жидкого гелия, сверхпроводящие пленки и т.д. [6]. Изучение этой модели в присутствии немагнитного беспорядка позволяет определить точные значения концентраций немагнитных примесей *c*, *c=1-p*, где *p*– концентрация спинов, при которых в рассматриваемой системе может происходить смена рода фазового перехода. Определение точных значений концентраций немагнитных примесей имеет большое значение при создании различных новых магнитных материалов, а также при изучении высокотемпературных сверхпроводников, образующих при замещении небольшого количества магнитных атомов *La* немагнитными атомами стронция *Sr* в антиферромагнитном диэлектрике $LaCuO_4$ [7]. Кроме того, к настоящему времени остается открытым вопрос о том, что фазовые переходы первого рода наблюдаются ли в присутствии беспорядка? Выяснение ответа на этот вопрос является главной целью этой работы.

В работе рассматривается трехмерная слабо разбавленная модель Поттса с числом состояний спина *q=5*.

Гамильтониан системы имеет вид [6]

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j), \quad S_i = 1, 2, 3, 4, 5 \qquad (1)$$

где $\delta(S_i, S_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j, \\ 0, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases}$ и $\rho_i = \begin{cases} 1, & \text{если в узле расположен спин} \\ 0, & \text{если в узле расположена немагнитная примесь} \end{cases}$.

Исследования проводились на основе высокоэффективного кластерного алгоритма Вольфа [8]. Методика реализации этого алгоритма приведена в работе [9]. Расчеты проводились для систем с периодическими

граничными условиями при концентрациях спинов p=1.00; 0.90. Исследовались системы с линейными размерами $L \times L \times L = N$, L=10÷120. Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины были упорядочены вдоль оси Z. Для вывода системы в равновесное состояние отсекался неравновесный участок длиной τ_0 для системы с линейными размерами L. Этот неравновесный участок отбрасывали. Затем усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной $\tau = 160\tau_0$. Для самой большой системы L=120, $\tau_0 = 2.3 \times 10^3$ МК шагов/спин. Кроме того, проводилось усреднение по различным начальным конфигурациям. В случае p=1.0 для усреднения использовалось 10 начальных конфигураций. Для слабо разбавленных систем с концентрацией спинов p=0.90 осуществлялось конфигурационное усреднение по 2000 различным конфигурациям, причем для каждой примесной конфигурации выполнялось усреднение по длине цепи $\tau = 200\tau_0$.

Для наблюдения за температурным ходом, теплоемкости C, восприимчивости χ и намагниченности m_F нами использовались следующие соотношения [10-11]:

$$C = (NK^2)(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \tag{2}$$

$$\chi = (NK)(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), \tag{3}$$

$$m_F = \frac{\left[q\left(\frac{N_{max}}{N}\right)-1\right]}{q-1} \tag{4}$$

где $K=/J//k_BT$, $N_{max}=max\{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5\}Ni$– число спинов в состоянии с $q=i$, $N=pL^3$-число магнитных узлов, угловые скобки означают термодинамическое усреднение, квадратные скобки означают усреднение по примесным конфигурациям.

На рисунках 1 и 2 представлены характерные зависимости восприимчивости χ и намагниченности m_F для систем с разными линейными размерами L при концентрации спинов p=1.0 и p=0.9.

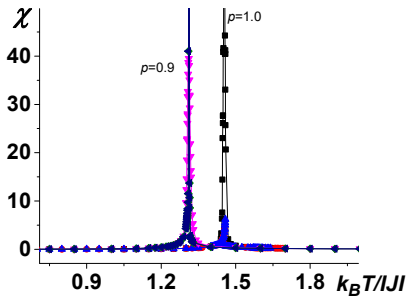


Рис 1. Температурная зависимость восприимчивости χ для модели Поттса при p=1.00 и p=0.90

Как видно из рисунка 1, восприимчивость χ для всех исследуемых нами однородных и слабо разбавленных систем описываемых трехмерной моделью Поттса с q=5 в точке фазового перехода проявляются “всплески”, которые характерны для фазового перехода первого рода.

Температурные зависимости намагниченности m_F при p=1.0 и p=0.9 испытывают скачок в области фазового перехода (см. рис.2).

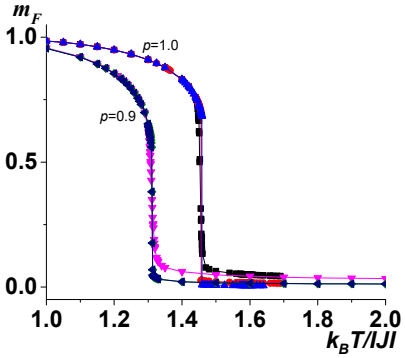


Рис 2. Температурная зависимость намагниченности m_F для модели Поттса при p=1.00 и p=0.90

При моделировании системы, для определения температуры фазового перехода T_l(p) часто используют метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [12]

$$V_L(T,p) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3\langle E^2 \rangle_L^2}, \tag{5}$$

$$U_L(T,p) = 1 - \frac{\langle m^4(T,p;L) \rangle_L}{3\langle m^2(T,p;L) \rangle_L^2}, \tag{6}$$

где E-энергия и m_F-намагниченность системы с линейным размером L. Выражения (5) и (6) позволяют определить $T_l(p)$ с большой точностью в фазовых переходах первого и второго рода соответственно. Так же данный метод, хорошо зарекомендовал себя и при определении рода ФП. Анализ численных данных с применением этого метода представлен в работах [13–16].

Кроме кумулянтов Биндера для анализа рода ФП нами использовался и гистограммный анализ данных метода МК [17].

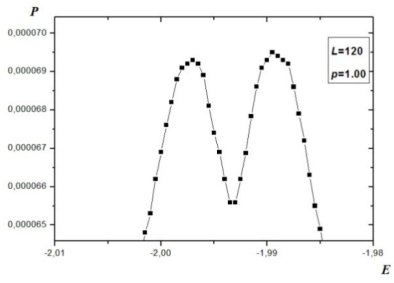


Рис.3.Гистограмма распределения энергии для трехмерной модели Поттса с q=5 при p=1.0.

Гистограммный анализ данных проведенный нами для трехмерной чистой модели Поттса с числом состояний спина q=5 также свидетельствует о наличии ФП первого рода (см. рис. 3). На рисунке 4 представлена гистограмма распределения энергии вблизи точки фазового перехода T_l для слаборазбавленной системы с линейным размером L=120. Как видно из рисунка, на зависимости вероятности P от энергии системы U для системы L=120 наблюдается два хорошо выраженных максимума. Наличие бимодальности в распределении энергии является важным признаком ФП первого рода.

В данной работе исследованы фазовые переходы в трехмерной слабо разбавленной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q=5$ на простой кубической решетке. Полученные данные в результате наших исследований свидетельствуют о том, что в трехмерной ферромагнитной модели Поттса с $q=5$ на простой кубической решетке наблюдается фазовый переход первого рода в соответствии с предсказаниями аналитических теорий [6] и внесение слабого беспорядка ($p=0.90$) в виде вмороженных немагнитных примесей в рассматриваемую модель не приводит к подавлению фазового перехода первого рода.

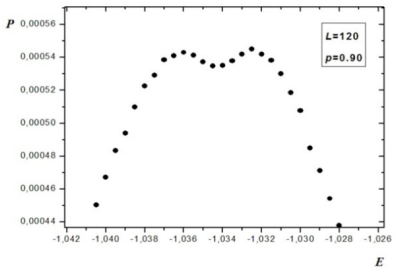


Рис.4.Гистограмма распределения энергии для трехмерной модели Поттса с q=5 при p=0.90.

[1] Л.Н. Щур. УФН 182, 7, 787, (2012).
[2] O. Vasilyev, B. Berche, M. Dudka and Yu. Holovatch. Phys. Rev. E 92, 042118, (2015).
[3] D.P. Landau, K. Binder. A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics.Cambridge university press, (2014).
[4] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev. Materials Letters 258, 126771, (2020).
[5] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, G.Y. Ataeva. J. Magn. Magn. Mater. 440, 101, (2017).
[6] Wu F.Y. Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics. World Scientific,London, (2009).
[7] L.A. Fernandez, A. Gordillo-Guerrero, V. Martin-Mayor, and J. J. Ruiz-Lorenzo. Phys.Rev. B 86, 184428, (2012).
[8] U. Wolff. Phys. Lett. 62, 361, (1989).
[9] А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев. Математическое моделирование 30, 12, с. 55, (2018).
[10] Р. Бекстер. Точно решаемые модели в статистической механике. Москва: Мир, 488 с., (1985).
[11] P. Peczac, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys.Rev. B 43, 6087, (1991)
[12] K. Eichhorn, K. Binder. J. Phys.: Cond. Matter 8, 5209, (1996).
[13] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev Materials Letters **238**, 321, (2019).
[14] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Атаева. Физика твердого тела **57**, 7, 1410, (2015).
[15] А.Б. Бабаев, Т.Р. Ризванова, А.К. Муртазаев, ФТТ **59**, 12, 2416, (2017).
[16] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Атаева. Физика твердого тела. 62, вып. 7. с. 1088, (2020).
[17] Munger E P, Novotny M A *Phys. Rev* B**43**5773, (1991).

Динамика магнитных солитонов и бризеров в многослойной ферромагнитной структуре в режиме авторезонанса

В.Н.Назаров [1], Е.Г.Екомасов [2,3], К.Ю.Самсонов [2]
[1] *Институт физики молекул и кристаллов – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, Уфа, Россия*
e-mail: nazarovvn@gmail.com
[2] *Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия*
[3] *Башкирский государственный университет, Уфа, Россия*
e-mail: EkomasovEG@gmail.com
[2] *Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия*
e-mail: k.y.samsonov@gmail.com

В последнее время появилось много работ по использованию магнитных неоднородностей типа магнитных вихрей и скирмионов, в спинтронных устройствах [1, 2]. Конкуренцию им могут создать магнитные неоднородности солитонного типа, имеющие много схожих динамических свойств [3]. Появление новых экспериментальных методик, позволяющих изучать процессы формирования и распространения локализованных волн намагниченности нанометровых размеров и взаимодействия их с доменными границами (ДГ) [4], так же стимулировала возросший прикладной интерес к данной теме. Ключевым вопросом для создания новых устройств является нахождение условий для генерации устойчивых локализованных волн намагниченности типа магнитных солитонов и бризеров. В данной статье рассматривается возможность управления параметрами магнитного солитона и бризера в трехслойном ферромагнетике постоянными магнитными полями и полями переменной частоты и малой амплитуды, с использованием авторезонансной модели управления при наличии диссипации в системе.

Рассмотрим трёхслойную ферромагнитную структуру, состоящую из двух широких одинаковых слоёв, разделённых тонким слоем с изменёнными значениями параметра магнитной анизотропии [5]. Параметры анизотропии будем считать функциями от координаты x, направленной перпендикулярно границе раздела слоёв. Обычно, при решении динамических задач удобно перейти к сферическим координатам θ и φ вектора намагниченности **M**, где $0 \le \theta \le 2\pi$ - угол в плоскости yz между направлением вектора **M** и осью лёгкого намагничивания (ось Oz), – $\pi/2 < \varphi < \pi/2$ – угол, описывающий выход **M** из плоскости ДГ. Учитывая в плотности энергии магнетика обменное взаимодействие и анизотропию, и считая $\varphi << 1$, уравнение движения для намагниченности можно представить в виде:

$$\Delta\theta - \ddot{\theta} - \frac{1}{2} f(\vec{r}) \sin 2\theta = h \sin\theta + \alpha\dot{\theta}, \qquad (1)$$

где $f(\vec{r}) = K_1(x)/K_1^0$ – функция, определяющая пространственную модуляцию константы анизотропии, K_1^0 – константа анизотропии в толстых слоях, $h = (H_Z/4\pi M_S)Q^{-1}$ и $\alpha = \alpha_0/\sqrt{Q}$ – нормированные внешнее магнитное поле и константа затухания, здесь $Q = K_1^2/(2\pi M_S^2)$ – фактор качества материала, α_0 – константа затухания, время t нормировано на $4\pi M_S\gamma\sqrt{Q}$, координата x нормирована на ширину статической блоховской ДГ. Функцию $f(x)$ в одномерном случае для простоты будем моделировать в форме прямоугольника:

$$f(x) = \begin{cases} 1, & |x| > W_x/2 \\ K, & |x| < W_x/2 \end{cases}. \qquad (2)$$

где W – параметр, характеризующий ширину тонкого слоя, K – величина нормированная константы магнитной анизотропии в области тонкого слоя.

Уравнение (1) решалось численно с использованием явной схемы интегрирования [5]. Распределение намагниченности в начальный момент времени задавалось в виде блоховской ДГ $\theta_0(x) = 2\,\mathrm{arctg}\left(e^x\right)$, находящейся далеко от тонкого слоя. Известно, что при определенных значениях параметров тонкого слоя при прохождении ДГ с постоянной скоростью через него, образуется магнитная неоднородность в виде магнитного бризера или солитона. Для задач управления динамической структурой таких неоднородностей наиболее интересен случай применения переменного внешнего магнитного поля, когда с помощью резонансных эффектов можно добиться локализованных колебаний намагниченности достаточно большой амплитуды. Внешнее магнитное поле аналогично [6] будем рассматривать как переменное поле вида:

$$h = h_0 \cos\omega t, \qquad (3)$$

где частота является линейной функцией времени $\omega = \omega_0 + \mu t$. Здесь ω_0 – рассчитанная ранее в [7] собственная частота магнитной неоднородности, локализованной в области тонкого магнитного слоя, μ – малый параметр.

Сначала рассмотрим случай бризера. Из рис. 1 видно, что при параметре затухания α=0.001 и при начальной частоте колебаний бризера 0.58 за время $t = 30$ происходит увеличение в два раза амплитуды магнитного бризера. С уменьшением параметра затухания (α=0.0001) и частоте 0.58 за такое же время происходит увеличение практически в три раза амплитуды магнитного бризера. Здесь следует заметить, что при колебаниях бризер начинает излучать волны, которые при росте амплитуды бризера становятся сильнее. Эти волны приводят к замедлению роста амплитуды бризера, которая выходит на некоторое стационарное значение, не превышающее 2 rad. Рассмотрим теперь влияние амплитуды внешнего магнитного поля. Амплитуда накачки считается малой $h_0 \ll 1$. Если при

$h_0 = 0.1$ имеем случай резонансного увеличения амплитуды бризера (рис. 1), то при уменьшении амплитуды накачки до $h_0 = 0.05$ происходит небольшой рост амплитуды бризера с дальнейшим ее постепенным понижением при $t > 100$ и выходом на стационар с амплитудой около 1 rad. При малой амплитуде накачки $h_0 = 0.01$ резонансных эффектов не наблюдается, происходит постепенное затухание бризера. Т.е. можно сделать вывод о том, что для каждого случая значений параметров W и K имеется пороговое значение начальной амплитуды магнитного поля, приводящее к резонансу [5].

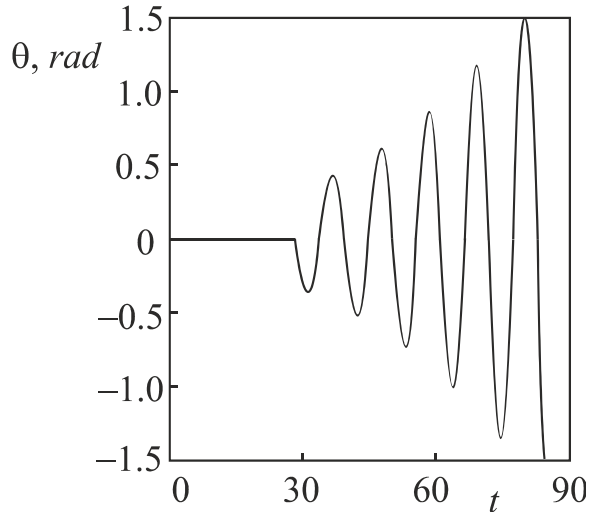


Рис. 1. Зависимость амплитуды колебаний магнитного бризера от времени в переменном поле амплитудой h_0=0.1. *Здесь* W=2, K=−0.3, *константа затухания* α=0.001, *частота поля 0.58, параметр* μ=0.01.

Рассмотрим теперь магнитные неоднородности солитоного типа. Скорость движения блоховской ДГ возьмем на большом расстоянии от тонкого слоя равной 0.85 в безразмерных единицах, константу затухания равной 0.001. Начиная с определенных величин параметров $W = 1.9$, $K = -1.4$, в области тонкого слоя наблюдаем образование магнитной неоднородности солитонного типа. При параметрах больше $W = 2$, $K < -1.8$ наблюдаем образование магнитного антисолитона с противоположным по отношению к солитону направлением намагниченности в его центре. Рассмотрим случай $K = -1.4$ и $W = 2$, когда в отсутствии поля после прохождения ДГ через тонкий слой в нем генерируется магнитный солитон, амплитуда которого испытывает колебания. При $h_0 = 0.1$, μ=0.01 и $\omega_0 = 0.83$ при прохождении ДГ через тонкий слой, будем наблюдать генерацию уже антисолитона. Если в отсутствии магнитного поля амплитуда солитона затухает со временем, то в переменном поле определенной частоты (связанной с собственной частотой колебаний солитона) амплитуда антисолитона возрастает в два раза (рис. 2), но дальнейший рост амплитуды ограничивается за счет излучения спиновых волн. При увеличении параметра K в переменном магнитном поле будет наблюдаться аналогичная ситуация, амплитуда колебаний магнитного антисолитона вырастает в два раза, но только с другой измененной частотой, так как частота антисолитона

зависит от параметров тонкого слоя. Такое ограничение на увеличение амплитуды колебаний вызвано тем, что центр антисолитона уже не остается в центре тонкого слоя, а возбуждается еще и трансляционная мода его колебаний вдоль координаты *x*, сопровождающаяся излучением объемных спиновых волн. Наиболее отчетливо эти волны проявляются в отсутствие затухания. Случай достаточно малой ширины тонкого слоя приводит к исчезновению трансляционной моды колебаний солитона. Здесь можно добиться большего увеличения амплитуды солитона (практически на порядок) в переменном магнитном поле по сравнению со случаем без поля [8].

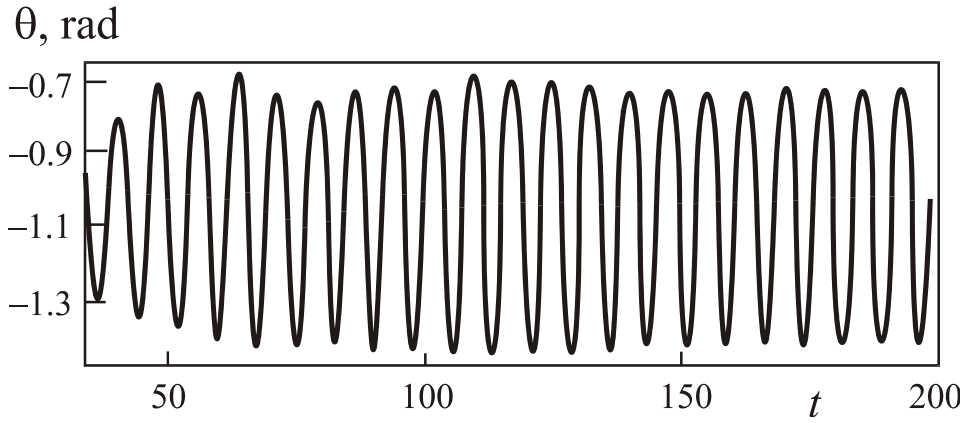


Рис. 2. Зависимость амплитуды солитона от времени в переменном поле, где $h_0 = 0.1$*, параметр* μ=0.01*, начальная частота поля 0.83, параметры ямы* $W = 2$*,* $K = -1.4$*.*

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №20-31-90048

[1] C.Li, S.Wang, N.Xu, X.Yang, B.Liu, B.Yang, L.Fang, JMMM **498**, 166155 (2019).
[2] Sh.Laichuan, X.Jing, Zh.Guoping, Zh.Xichao, E.Motohiko, O.Tretiakov, L.Xiaoxi, Zh.Yan, Appl. Phys. Lett. **114**, 042402 (2019).
[3] М.А.Шамсутдинов, И.Ю.Ломакина, В.Н.Назаров, А.Т.Харисов, Д.М. Шамсутдинов, Ферро- и антиферромагнитодинамика. Нелинейные колебания, волны и солитоны, Наука, Москва (2009).
[4] M.V.Gerasimov, M.V.Logunov, A.V.Spirin, Yu.N.Nozdrin, I.D.Tokman, Phys. Rev. B. **94**, 014434 (2016).
[5] Е.Г.Екомасов, В.Н.Назаров, А.М.Гумеров, К.Ю.Самсонов, Р.Р. Муртазин, Письма о материалах **10**, 141 (2020).
[6] В.Н.Назаров, Е.Г.Екомасов, Письма о материалах **8**, 158 (2018).
[7] Е.Г.Екомасов, Р.Р.Муртазин, Ш.А.Азаматов, Физика твердого тела **54**, 1487 (2012).
[8] Е.Г.Екомасов, В.Н.Назаров, К.Ю.Самсонов, Р.Р.Муртазин, Письма в ЖТФ **47**, 15 (2021).

Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга с магнитным полем

К.Ш.Муртазаев[1], А.К.Муртазаев[2], М.К.Рамазанов[1,2], М.А.Магомедов[1,2]
[1] Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук, Махачкала, Россия, ул. М. Ярагского, 94, 367003
[2] Дагестанский федеральный исследовательский центр Российской академии наук, Махачкала, Россия, ул. М. Гаджиева, 45, 367000
e-mail: 5kurban@mail.ru

Исследование фазовых переходов (ФП) и критических явлений фрустрированных спиновых систем в настоящее время является одним из наиболее актуальных и сложных задач в области физики конденсированных сред [1,2]. Это связано с тем, что основное состояние системы может быть сильно вырождено при наличии фрустраций. [3-7]. Репличный алгоритм метода Монте-Карло безусловно является мощным аппаратом для решения таких задач. Поэтому в данном исследовании был использован высокоэффективный репличный обменный алгоритм метода МК.

В данной работе нами изучается влияние магнитного поля на характер ФП, магнитные и термодинамические свойства антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической (ОЦК) решетке с конкурирующими обменными взаимодействиями.

Гамильтониан антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической (ОЦК) решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей, а также внешнего магнитного поля имеет следующий вид:

$$\mathrm{H} = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j) - J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (S_i \cdot S_l) - H \sum_{\langle i \rangle} S_i , \qquad (1)$$

где J_1 и J_2 – константы обменного антиферромагнитного взаимодействия первых ($J_1<0$) и вторых ($J_2<0$) ближайших соседей, $S_{i,j,l} = \pm 1$ – изинговский спин, H- величина магнитного поля (величина магнитного поля приводится в единицах $H/|J_1|$). В данном исследовании рассматривается случай, когда $r=|J_2|/|J_1|=1.0$.

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $2\times L\times L\times L=N$, $L=12\div 90$, где L измеряется в размерах элементарной ячейки. Величина значений внешнего магнитного поля менялось в интервале $0.0\le H\le 14.0$. Для анализа природы и характера ФП использовались гистограммный метод и метод кумулянтов Биндера. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался участок длиной $\tau_0 = 4\cdot 10^5$ шагов МК на спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль марковской цепи длиной до $\tau_0 = 50000$ шагов МК на спин.

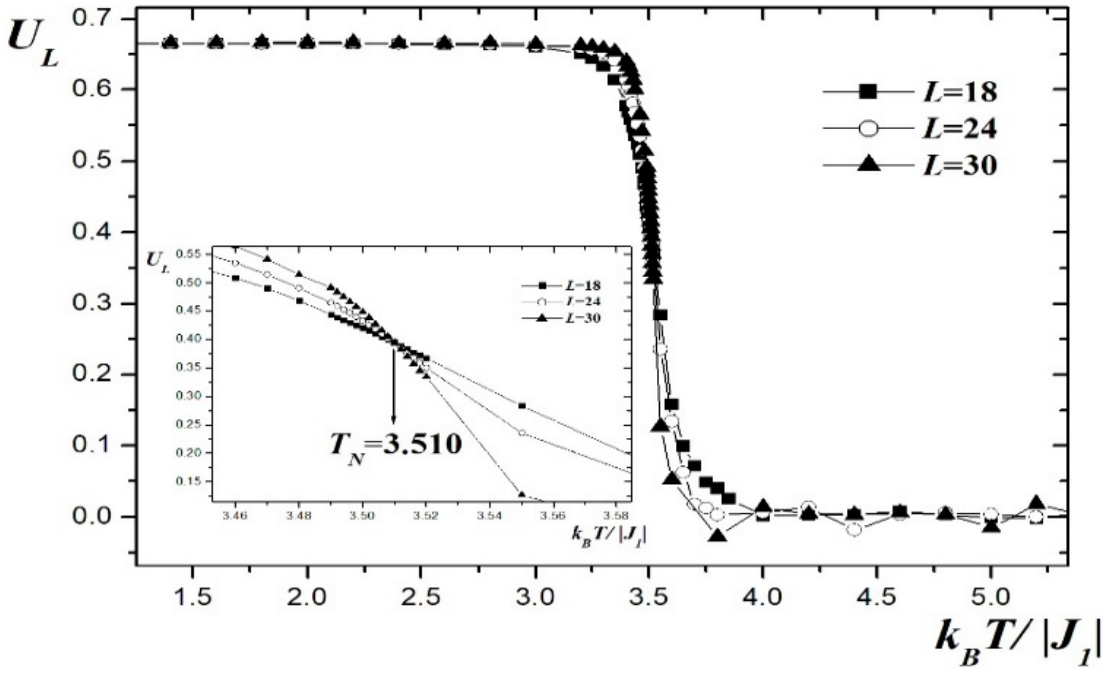


Рис. 1. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_BT/|J_1|$ для разных L при H=6.0.

Зависимости кумулянта Биндера U_L от температуры при $H=6.0$ для разных значений L представлены на рисунке 1. На рисунке видна четко выраженная точка пересечения (T_N=3.510), которая является критический температурой и свидетельствует о ФП второго рода [8].

На рисунке 1 приведены температурные зависимости теплоемкости для различных значений магнитного поля. На вставке *a* приведены температурные зависимости теплоемкости для интервала магнитного поля $0.0 \le H \le 6.0$, а на вставке *b* приведены температурные зависимости теплоемкости для интервала магнитного поля $7.0 \le H \le 14.0$.

На этих рисунках видно, что с увеличением значения H наблюдается сдвиг максимумов теплоемкости в сторону более низких температур. До определенного значения магнитного поля наблюдается спад абсолютных значений максимумов теплоемкости после чего наблюдается рост абсолютных значений максимумов теплоемкости. В интервале значений магнитного поля $11.0 \le H \le 13.0$ на рисунке *1b* в критической области наблюдаются более резкие пики. Можно предположить, что в этом интервале реализуется ФП первого рода. Сдвиг максимумов теплоемкости сторону более низких температур обусловлен тем, что магнитное поле ослабляет обменное взаимодействие спинов. На рис. *1b* видно, что для теплоемкости при значении магнитного поля H=14 пик не наблюдается. Это говорит о том, что дальнейшее увеличение магнитного поля подавляет ФП.

Для более подробного анализа природы ФП нами был использован гистограммный метод анализа данных. Для всех значений магнитного поля $0.0 \le H \le 13.0$ были построены гистограммы распределения энергии и кумулянты Биндера. Наши данные свидетельствуют о том, что в интервале $0.0 \le H \le 10.0$ значений магнитного поля реализуется ФП второго рода, а в интервале $11.0 \le H \le 13.0$ ФП первого рода[9].

Выполнено исследование антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с конкурирующими обменными взаимодействиями во внешнем магнитном поле с использованием репличного алгоритма метода Монте-Карло. Рассмотрен интервал значений величины магнитного поля $0.0 \le H \le 14.0$. Показано, что в интервале значений магнитного поля $0.0 \le H \le 10.0$ происходит фазовый переход второго рода, а в интервале $11.0 \le H \le 13.0$ фазовый переход первого рода. Установлено, что дальнейшее увеличение величины магнитного поля приводит к подавлению фазового перехода.

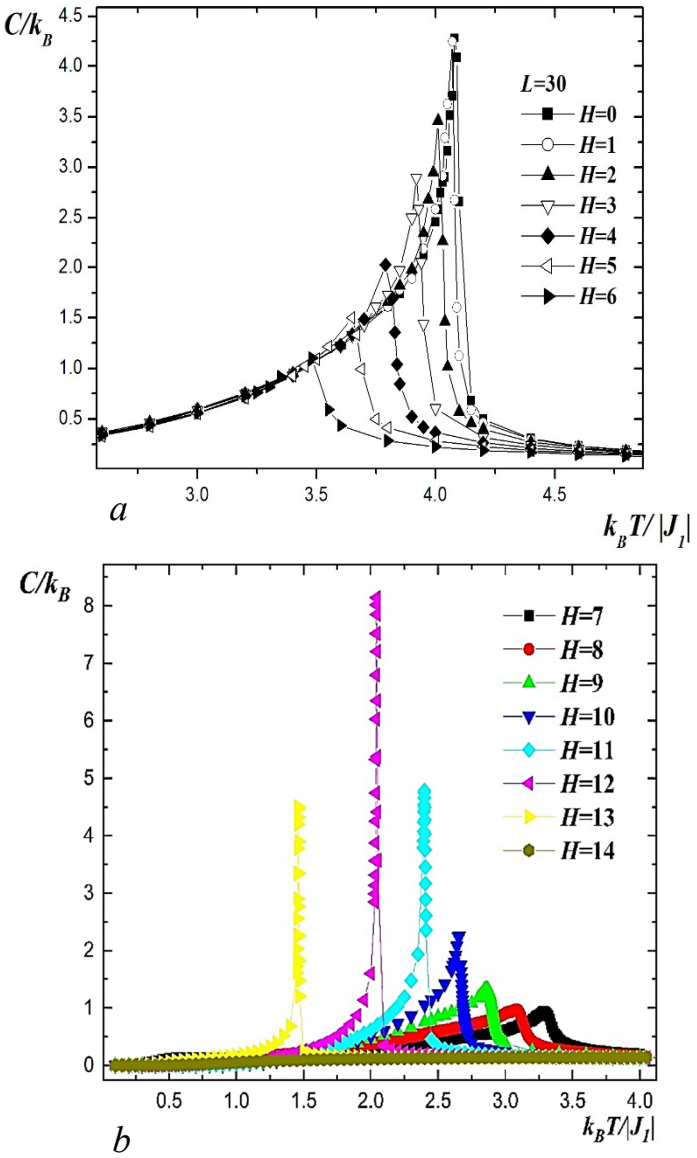


Рис. 2. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_BT/|J_1|$.
a-для интервала значений магнитного поля $0.0 \le H \le 6.0$.
b- для интервала значений магнитного поля $7.0 < H < 14.0$.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 20-32-90079 – аспиранты и № 19-02-00153 – а.

[1] А.З.Паташинский, В.Л.Покровский Флуктуационная теория фазовых переходов. Наука, М. (1982).
[2] Ш.Ма. Современная теория критических явлений. Мир, М.(1980).

[3] А.К.Муртазаев, М.К.Рамазанов, Ф.А.Кассан-Оглы, Д.Р.Курбанова, ЖЭТФ. 147, 1 (2015).
[4] F.A.Kassan-Ogly, A.K.Murtazaev, A.K.Zhuravlev, M.K.Ramazanov, A.I.Proshkin, J. Mag. Mag. Mater. 384, 247 (2015).
[5] А.К.Муртазаев., М.К.Рамазанов, Письма в ЖЭТФ 101 (2015).
[6] А.К.Муртазаев., М.К.Рамазанов, М.К.Бадиев, ЖЭТФ. 142, 2 (2012).
[7] A.K.Murtazaev, M.K.Ramazanov, M.K.Badiev, Physica B: Condensed Matter 476, 1 (2015).
[8] А.К.Муртазаев., М.К.Рамазанов, К.Ш.Муртазаев, М.А.Магомедов, М.К.Бадиев, ФТТ 62, 2 (2020).
[9] K.Sh.Murtazaev, A. K.Murtazaev, M.K.Ramazanov, M.A.Magomedov, A.A.Murtazaeva, Low Temp. Phys. 47(2021).

Первопринципные исследования влияния Al на магнитные свойства и фазовые превращения в сплаве Fe-Ga

М.А.Загребин [1], М.В.Матюнина [1], В.В.Соколовский [1], В.Д.Бучельников [1], И.С.Головин [2]

[1] Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
e-mail: miczag@mail.ru
[2] НИТУ «МИСиС», Москва, Россия

В настоящее время сплавы системы Fe-Ga являются весьма популярными для изготовления изделий с высокой магнитострикцией. На кривой зависимости магнитострикции Fe-Ga сплавов от содержания Ga наблюдается два максимума в районе 18-20 и 27-28 ат.% [1]. Однако, они обладают некоторыми недостатками, среди которых в первую очередь является их высокая хрупкость, затрудняющая механическую обработку изделий, и возможность образования в структуре нежелательных фаз: $L1_2$ с отрицательной магнитострикцией и $D0_{19}$, являющейся парамагнитной. Сплавы системы Fe-Al, хотя и не обладают столь же высокими значениями магнитострикции, однако они свободны от указанных выше недостатков сплавов системы Fe-Ga. Первый максимум магнитострикции для сплавов Fe-Al также имеет место при содержании Al около 18 ат.% [1], то есть вблизи предела его растворимости в α-Fe, на границе между A2 структурой и $D0_3$ структурой. Кроме того, сплавы системы Fe-Al являются основой для создания высоко демпфирующих материалов, эффективно работающих при разной амплитуде колебаний [2, 3]. Высокий уровень демпфирования, при низкой амплитуде колебаний, обусловлен магнитомеханическим механизмом рассеяния энергии.

Однако, несмотря на уже сформировавшееся широкое применение магнитострикционных сплавов в технике, имеется настоятельная потребность в улучшении их функциональных свойств. Дополнительное легирование железа может повышать магнитострикционные характеристики соответствующих сплавов, которые ответственны за демпфирующую способность материалов с магнитомеханическим механизмом диссипации энергии [1]. Исследование влияния добавки Al в сплавы Fe-Ga на величину магнитострикции показывает, что в целом, Al, как и большинство легирующих элементов приводит к снижению значений магнитострикции двойных сплавов [4]. Частичная замена атомов Ga атомами Al в закаленных образцах показывает, что величина магнитострикции насыщения $3/2\lambda_{100}$ снижается приблизительно пропорционально доле замененного галлия на алюминий, при постоянном суммарном содержании 18 ат.% (Ga+Al) приводит к стабилизации фазы $D0_3$ [5]. Несмотря на существующие исследования в данной области отсутствует однозначная трактовка механизмов влияния легирования

третьим элементом, например Al на магнитные свойства и температуры фазовых переходов (ФП) в сплавах Fe-Ga. В данной работе проводится исследование влияния добавки Al на магнитные свойства и температуры ФП (как структурных, так и магнитных) в сплавах Fe-Ga-Al с помощью первопринципных вычислений.

На первом этапе была проведена геометрическая оптимизация кристаллической структуры с помощью метода проекционно-присоединенных волн (*projector-augmented wave*) реализованного в вычислительном пакете VASP (The Vienna Ab initio simulation package) [6, 7]. Для интегрирования по зоне Бриллюэна использовалась сетка, построенная по методу Монхорст-Пака [8] размером 8×8×8 *k*–точек. Рассмотрены следующие устойчивые структурные состояния: A2 (пространственная группа симметрии № 229, со структурой типа α-Fe); B2 (пространственная группа симметрии № 221, со структурой типа CsCl); $D0_3$ (пространственная группа симметрии № 225, со структурой типа BiF_3) и $L1_2$ (пространственная группа симметрии № 221, со структурой типа Cu_3Au). Моделирование было выполнено для суперячеек, составленных из 64 атомов. Для создания нестехиометрических композиций и структурного беспорядка в суперячейках использовались специальные квазислучайные структуры (*special quasirandom structures*), созданные при помощи пакета ATAT (Alloy Theoretic Automated Toolkit) [9]. Полученные в результате геометрической оптимизации кристаллической структуры равновесные параметры были использованы для вычисления параметров магнитного обменного взаимодействия Гейзенберга J_{ij} с помощью метода Коррингы-Кона-Ростокера (*Korringa-Kohn-Rostoker*), реализованного в вычислительном пакете SPR-KKR (A spin polarized relativistic Korringa-Kohn-Rostoker code) [10]. Нестехиометрические композиции и структурный беспорядок задавались с помощью приближения когерентного потенциала (*coherent potential approximation*). Для выполнения самосогласованных расчетов была использована *k*-сетка размером 45×45×45, а для расчетов J_{ij} – размером 57×57×57. Полученные значения обменных постоянных были использованы для вычислений температуры Кюри с помощью приближения молекулярного поля (*mean field approximation*) [11]. Для учета обменно-корреляционного взаимодействия во всех расчетах было использовано приближение обобщенного градиента (*general gradient approximation*) в параметризации Пердью-Бурке-Эрнзерхофа (*Perdew-Burke-Ernzerhof*) [12]. Были рассмотрены три состава – $Fe_{47}Ga_{14}Al_3$, $Fe_{46}Ga_{15}Al_3$ и $Fe_{45}Ga_{16}Al_3$, которые соответствуют сплавам $Fe_{73.4}Ga_{21.9}Al_{4.7}$, $Fe_{71.9}Ga_{23.4}Al_{4.7}$ и $Fe_{70.3}Ga_{25}Al_{4.7}$.

В результате геометрической оптимизации получены равновесные значения полной энергии для всех рассмотренных структурных состояний. Вычисления показывают, что для всех составов наиболее выгодной является фаза $L1_2$. Разность полных энергий фаз (E_0) по отношению к полной энергии

наиболее выгодной фазы (E_{min}) позволяет произвести оценку температур ФП с помощью выражения E_0–$E_{min} \approx k_BT$ (k_B – постоянная Больцмана). Полученные, в результате такой оценки температуры ФП являются завышенными по сравнению с экспериментальными значениями, но позволяют качественно описать последовательности ФП. Температуры ФП, полученные для трех сплавов представлены на Рис. 1.

Из рисунка видно, что для всех трех сплавов при повышении температуры наблюдается последовательность ФП $L1_2 \rightarrow D0_3 \rightarrow B2 \rightarrow A2$.

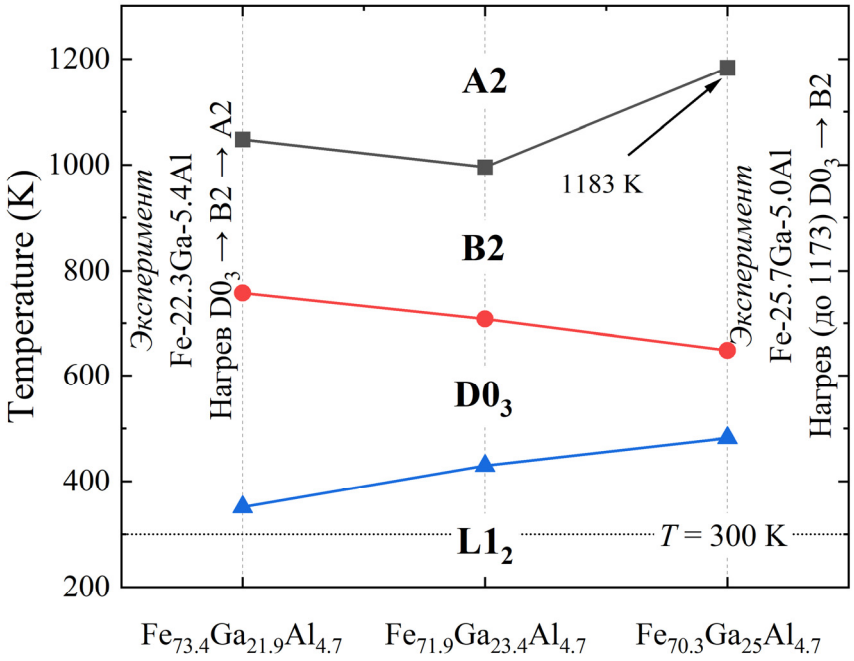


Рис.1 Температуры фазовых переходов для сплавов $Fe_{73.4}Ga_{21.9}Al_{4.7}$, $Fe_{71.9}Ga_{23.4}Al_{4.7}$ и $Fe_{70.3}Ga_{25}Al_{4.7}$.

Экспериментальные исследования для сплавов $Fe_{72.3}Ga_{22.3}Al_{5.4}$, $Fe_{69.3}Ga_{25.7}Al_5$ в литом состоянии показали, что в первом случае при нагревании (до 1173 K) и охлаждении наблюдается последовательность: $D0_3 \leftrightarrow B2 \leftrightarrow A2$, а во втором – $D0_3 \rightarrow B2+A1 \rightarrow B2$ ($B2 \rightarrow D0_3$, в случае охлаждения). Полученные в результате вычислений результаты находятся в качественном согласии с экспериментальными данными.

Вычисленные температуры Кюри для сплавов представлены в Табл 1.

Таблица 1 Температуры Кюри сплавов $Fe_{73.4}Ga_{21.9}Al_{4.7}$, $Fe_{71.9}Ga_{23.4}Al_{4.7}$ и $Fe_{70.3}Ga_{25}Al_{4.7}$, полученные с помощью приближения молекулярного поля.

Сплав	A2	B2	$D0_3$	$L1_2$
$Fe_{73.4}Ga_{21.9}Al_{4.7}$	1059.2	951.1	1187.8	1401.9
$Fe_{71.9}Ga_{23.4}Al_{4.7}$	1020.9	924.4	1171.6	1281.8
$Fe_{70.3}Ga_{25}Al_{4.7}$	984.7	902.6	1147.7	1167.5

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 17-72-20022 (вычисления для суперячеек с помощью VASP). М.В.Матюнина выражает благодарность фонду перспективных научных исследований ЧелГУ.

[1] E.M.Summers, T.A.Lograsso, M.Wun-Fogle, J. Mater. Sci. **42**, 9582 (2007).
[2] A.Emdadi, M.Nartey, I.Chudakov, I.S.Golovin, J. Alloy. Compd. **653**, 460 (2015).
[3] X.Yong-Gang, L.Ning, S.Bao-Luo, H.Hong-Xin, Mat. Sci. Eng. A **447**, 163 (2007).
[5] C.Bormio-Nunes, R.S.Turtelli, H.Mueller, R.Grössinger, H.Sassik, M.A.Tirelli, J. Magn. Magn. Mat. **820**, 290 (2005).
[6] G.Kresse, J.Furthmuller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
[7] G.Kresse, D.Joubert, Phys. Rev. B **59**, 1758 (1999).
[8] H.J.Monkhorst, J.D.Pack, Phys. Rev. B **13**, 5188 (1976).
[9] A.van de Walle, M. Asta, G. Ceder, Calphad **26**, 539 (2002).
[10] H.Ebert, D.Ködderitzsch, J.Minár, , Rep. Prog. Phys. **74**, 096501 (2011).
[11] P.W.Anderson, Solid State Phys. **14**, 99 (1963).
[12] J.P.Perdew, K.Burke, M.Enzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).

Исследование влияния добавки Al на упругие свойства сплавов Fe-Ge из первых принципов

М.В.Матюнина, М.А.Загребин, В.В.Соколовский, В.Д.Бучельников
Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
e-mail: matunins.fam@mail.ru

Исследования магнитострикции насыщения $3/2\lambda_{100}$ сплавов на основе Fe, таких как Fe-Ga, Fe-Al и Fe-Ge от степени содержания немагнитных атомов обнаружило ряд определенных сходств данных систем. Структурные исследования показали, что в каждой из систем первый пик магнитострикции связан со структурой A2 [1-4]. Пик приходится на границу двухфазной области A2/$D0_3$ и дальнейшее уменьшение $3/2\lambda_{100}$ обусловлено образованием структуры $D0_3$. Однофазная область A2 в сплавах Fe-Ga и Fe-Al существует в пределах до ≈18 ат.%, в то время как для сплавов Fe-Ge это соответствует содержанию Ge порядка 10 ат.%. При этом значения магнитострикции в области первого пика достигают 395×10^{-6} при содержании Ga 19 ат.%, 184×10^{-6} в композиции $Fe_{81,5}Al_{18,5}$ и 86×10^{-6} для композиции $Fe_{89,9}Ge_{10,1}$. В случае сплавов Fe-Al наблюдается только один пик магнитострикции. Для систем Fe-Ga и Fe-Ge второй пик магнитострикции связан с полностью упорядоченной структурой $D0_3$ и достигает значений 350×10^{-6} для состава $Fe_{73}Ga_{27}$ и -144×10^{-6} для $Fe_{81,5}Ge_{18,5}$. Также можно отметить, что в диапазоне малого содержания добавки $x\approx10$ ат.% атомов Al, Ge или Ga, величина значений тетрагонального модуля упругости C' и магнитоупругой постоянной $-b_1$ увеличивается с ростом концентрации немагнитных атомов [4]. После достижения первого пика, поведение зависимости $-b_1(x)$ является убывающим вплоть до второго пика в сплавах Fe-Ga и Fe-Ge, при этом в системе Fe-Ge происходит смена знака с положительного на отрицательный, в случае Fe-Ga смены знака не происходит. Изменение тетрагонального модуля упругости в сплавах Fe-Ga и Fe-Ge более существенны по сравнению с чистым железом и сплавами Fe-Al. Второй пик магнитострикции в сплавах Fe-Ga связывают с существенным уменьшением величины C'.

Исследование тройных сплавов на основе Fe-Ga с частичной заменой атомов Ga атомами Al [1,4] показала, что величина тетрагональной магнитострикции тройных сплавов Fe-Ga-Al уменьшается незначительно, что объясняется одновременным увеличением как величины магнитоупругой постоянной, так и увеличением тетрагонального модуля упругости. Влияние замещения атомов Ge атомами Al на магнитострикционные и упругие свойства не проводилось. В данной работе представлено исследование свойств тройных сплавов Fe-Ge-Al из первых принципов

Детали вычислений. Все расчеты были проведены в рамках теории функционала плотности при помощи метода проекционных присоединенных волн (PAW), реализованного в программном пакете VASP (*Vienna Ab-initio Simulation Package*) [5-6]. Обменно-корреляционный потенциал рассматривался с помощью приближения обобщенного градиента в форме Пердью – Бурке – Эрнцерхофа [7]. Для описания электрон-ионных взаимодействий были применены псевдопотенциалы PAW и выбраны следующие электронные конфигурации Fe ($3p^6 3d^7 4s^1$), Ge ($3d^{10} 4s^2 4p^2$) и Al ($3s^2 3p^1$). Энергия отсечки плоских волн равна 450 эВ, отсечка кинетической энергии составила 800 эВ. Интегрирование зоны Бриллюэна выполнено по методу Метфесселя-Пакстона (Methfessel-Paxton) второго порядка на сетке, сгенерированной по схеме Монхроста-Пака и содержащей 8×8×8 k-точек. Критерий сходимости вычислений – 10^{-6} эВ/атом. Все расчеты проводились при нулевой температуре (T = 0 K).

Исследования свойств сплавов $Fe_{100-x}(Ge_{x-y}Al_y)_x$ (x = 9,325; 15,625; 21,875 ат.%; y = 3,125; 6,25 ат.%) были выполнены для 2-х типов упорядочения: полностью неупорядоченной структуры A2 (группа симметрии $Im\bar{3}m$, №229) и упорядоченной структуры $D0_3$ (группа симметрии $Fm\bar{3}m$, №225). Моделирование структур выполнено при помощи 32-атомных суперячеек. Для создания нестехиометрических композиций и структурного беспорядка в суперячейках использовались специальные квазислучайные структуры (special quasirandom structures), созданные при помощи пакета ATAT (Alloy Theoretic Automated Toolkit) [8]. Расчет модулей упругости проводился при помощи разложения энергии в ряд Тейлора по малым деформациям:

$$E(V,\varepsilon) = E(V_0,0) + V_0 \sum_{i=1}^{6} \sigma_i \varepsilon_i + \frac{V_0}{2} \sum_{i,j=1}^{6} C_{ij} \varepsilon_i \varepsilon_j + O(\varepsilon^3) \qquad (1)$$

где C_{ij} - упругие постоянные, $E(V_0,0)$ - соответствующая полная энергия, V_0 - объем недеформированной решетки, а ε_i, σ_i - тензоры деформаций и напряжений соответственно. Для расчета модуля объемного сжатия B и двух модулей сдвига $C' = (C_{11}-C_{12})/2$ и C_{44} были использованы изотропный, орторомбический и моноклинный тензоры деформации. Для орторомбического и моноклинного тензоров учтено сохранение объема. Параметр искажения изменялся в диапазоне $-3\% \le \varepsilon \le 3\%$ с шагом 1%.

Результаты вычислений. На Рис. 1 представлены результаты расчетов равновесных параметров кристаллических структур A2 и $D0_3$. Для удобства проведения оценки влияния атомов Al на структурные свойства сплавов Fe-Ge, Рис. 1 условно разделен на три области в зависимости от концентрации добавочных атомов (слева направо): первая область соответствует $x = 9{,}325$ ат.%, вторая – 15,625 ат.% и третья – 21,875 ат.%. В целом можно отметить, что добавка Al приводит к уменьшению равновесного параметра относительно бинарных композиций, что обусловлено меньшим атомным радиусом Al. Значения параметров a_0 для фазы A2 и $a_0/2$ для фазы $D0_3$ при $x = 9{,}325$ ат.% незначительно отличаются, что коррелирует с экспериментально наблюдаемым структурным фазовым переходом A2→$D0_3$ [3]. Также можно отметить, что значения равновесной энергии тройных сплавов по модулю меньше, т.е. бинарные сплавы Fe-Ge энергетически более стабильны.

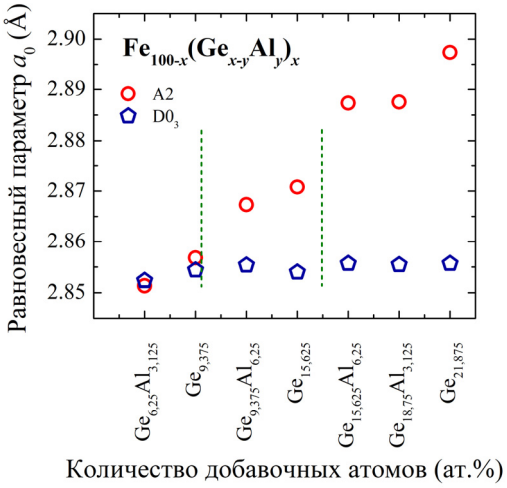


Рис.1 Вычисленные значения параметров кристаллических структур A2 и $D0_3$ ($a_0/2$) сплавов $Fe_{100-x}(Ge_{x-y}Al_y)_x$. Значения параметров для бинарных сплавов приведены из работы [9]. Штрихпунктирными линиями обозначены области с содержанием добавочных элементов x=9,375; 15,625; 21,875

Рассчитанные значения тетрагонального C' и орторомбического C_{44} модулей упругости приведены на Рис. 2. В случае структуры $D0_3$ добавка Al усиливает сопротивление деформационным нагрузкам в направлении [001] (см. Рис. 2(a)). Наибольшее увеличение тетрагонального модуля упругости получено для композиций с $x = 21{,}875$ ат.%. В случае A2 структуры незначительное увеличение C' наблюдается только для композиции $Fe_{91,875}Ge_{6,25}Al_{3,125}$. Орторомбический модуль упругости увеличивается при добавлении атомов Al в систему Fe-Ge в обеих кристаллических структурах.

Можно сделать вывод, что добавка атомов Al приводит к увеличению тетрагонального модуля упругости в фазе $D0_3$ и уменьшает степень упругой анизотропии $A = C_{44}/C'$. При этом наибольшие изменения A найдены для композиций с содержанием добавочных атомов $x = 21{,}875$ ат.%.

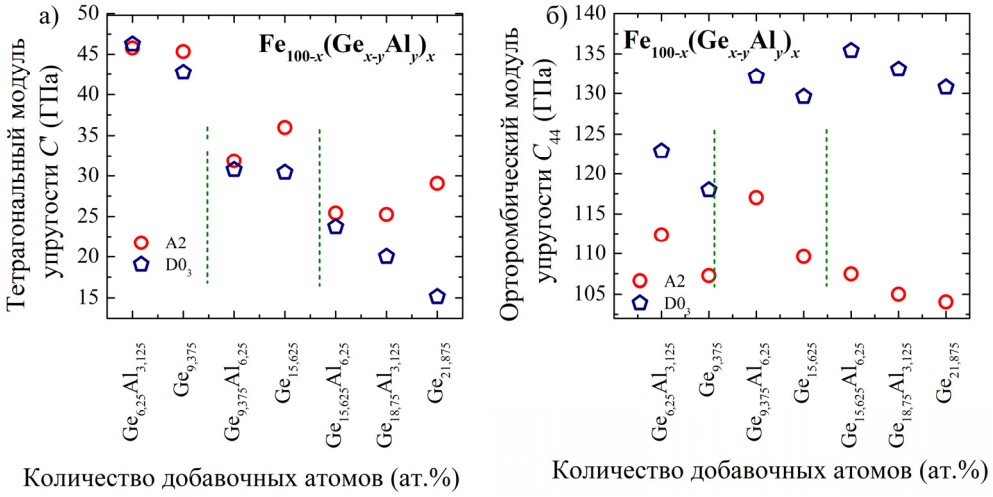


Рис.2 Вычисленные значения а) тетрагонального C' и б) орторомбического C_{44} модулей упругости кристаллических структур A2 и $D0_3$ ($a_0/2$) сплавов $Fe_{100-x}(Ge_{x-y}Al_y)_x$. Значения C' и C_{44} для бинарных сплавов приведены из работы [10]. Штрихпунктирными линиями обозначены области с содержанием добавочных элементов x=9,375; 15,625; 21,875.

Работа выполнена при поддержке фонда научных исследований ЧелГУ.

[1] A.E.Clark, J.B.Restorff, M.Wun-Fogle D.Wu, T.A.Lograsso, A.Thomas, V.M.Keppens, G.Petculescu, R.A.Taylor, J. Appl. Phys. **103**, 07B310 (2008).
[2] Q.Xing, Y.Du, R.J. McQueeney, T.A.Lograsso, Acta Materialia, **56**, 4536 (2008).
[3] D.Wu, Q.Xing, R.W.McCallum, T.A.Lograsso, J. Appl. Phys. **103**, 07B307 (2008).
[4] J.B.Restorff, M.Wun-Fogle, K.B.Hathaway, A.E.Clark, T.A.Lograsso, A.Thomas, G.Petculescu, J. Appl. Phys. **111**, 023905 (2012).
[5] G.Kresse, D.Joubert, Phys. Rev. B. 59, 1758 (1999).
[6] G.Kresse, J.Furthműller, PhysicalReview B. **54**, 11169 (1996).
[7] J.P.Perdew, K.Burke, M.Enzerhof, Phys Rev Lett, **77**, 3865 (1996).
[8] A.van de Walle, M. Asta, G. Ceder, Calphad, **26**, 539 (2002).
[9] M.V.Matyunina, M.A.Zagrebin, V.V.Sokolovskiy, V.D.Buchelnikov, Phys. Rev. B. **580**, 411934 (2020).
[10] M.A.Zagrebin, M.V.Matyunina, V.V.Sokolovskiy, V.D.Buchelnikov, Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика», **12 (2)**, 49 (2020).

Зонная структура наноструктурированного теллурида серебра

Д.И.Сафаргалиев, Н.Н.Биккулова, А.Р.Курбангулов
Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета, Стерлитамак, Россия
e-mail: bickulova@mail.ru

Несмотря на все возрастающее количество данных, свидетельствующих о реализации суперионного состояния в большом классе соединений, до сих пор не существует более или менее последовательных представлений о конкретных механизмах ионного переноса в суперионных проводниках и не выявлены главные факторы, способствующие формированию такого состояния. По-существу, это необычное состояние вещества, в котором некоторые ионы имеют подвижность почти такую же, как и в жидкости, в то время как другие сохраняют свое регулярное положение в кристалле. Поэтому с позиций изучения закономерностей формирования конденсированных сред суперионные проводники представляют очень важное звено в цепи усложняющихся объектов.

К настоящему времени недостаточно подробно изучена зонная структура и динамика решетки суперионных проводников. Интерес к исследованию зонной структуры и динамики кристаллической решетки в суперионных проводниках обусловлен ее тесной взаимосвязью с явлением суперионной проводимости, понимание которого необходимо для получения новых соединений с необходимыми свойствами. Поэтому проблема расчета зонной структуры и динамики решетки кристаллов является одной из важнейших задач физики твердого тела.

Известно, что структурные и электронные свойства полупроводников хорошо описываются с помощью теории функционала электронной плотности (расчеты из первых принципов) в приближении локальной плотности (LDA). Они в настоящее время являются стандартными при изучении электронной структуры новых материалов. Использование методов теории функционала плотности (DFT) позволяет достичь разумного компромисса между точностью и вычислительными затратами, при этом развитие расчетных методов и постоянный рост компьютерных мощностей делают возможными исследование все более сложных систем.

В данной работе исследовалась зонная структура теллурида серебра для макро- и наноструктурированного состояния. Расчет был выполнен в рамках теории возмущений для функционала плотности (DFPT) с использованием программного пакета Quantum Espresso [1]. Описание теории функционала электронной плотности содержится в нобелевской

лекции В. Кона [2]. Обзор данной теории, и её приложения содержатся в работах [3–5].

Теллурид серебра Ag_2Te в несуперионной фазе представляет собой моноклинную структуру, кристаллографические данные которого представлены в таблице 1.

Таблица 1. Параметры решетки теллурида серебра Ag_2Te при комнатной температуре

Параметры решетки				a = 8,164 Å b = 4,468 Å c = 8,977 Å β = 124,16°	
Кристаллическая структура				моноклинная	
Пространственная группа				$P21/c$ (14)	
Атомные координаты					
Элемент	***x***	***y***	***z***	***B***	***Focc***
Ag	0,01900	0,15100	0,37100	1	1
Ag	0,33300	0,83800	0,99600	1	1
Te	0,27200	0,15800	0,24200	1	1

Согласно расчетам зонной структуры, выполненным для макросостояния, ширина запрещенной зоны в Ag_2Te для несуперионного состояния отсутствует, а для суперионного состояния (ГЦК решетка, пр. группа $Fm\bar{3}m$) ширина запрещенной зоны составляет 0,356 эВ. Зонная структура в несуперионной фазе для Ag_2Te существенно отличается от зонной структуры для суперионного состояния. Разупорядочение по тригональным позициям в несуперионной фазе приводит к отсутствию запрещенной зоны. Данные отличия можно объяснить *s-p-d*-гибридизацией, которая приводит к экранированию потенциала кристаллической решетки, вследствие чего происходит разупорядочение катионной подрешетки.

Уменьшение размера частицы приводит к проявлению весьма необычных свойств материалов. Причиной этого являются квантово-механические эффекты (квантово-размерный эффект), возникающие при пространственном ограничении движения носителей заряда. Трехмерное ограничение движения носителей заряда (электронов и дырок) приводит к полностью дискретному спектру их состояний, в результате которого многие физические свойства наноструктурированных систем становятся отличными от свойств объемных кристаллов. Для подтверждения данного предположения были проведены модельные расчеты зонной структуры нанопленок и наноточек теллурида серебра Ag_2Te для несуперионного состояния.

Размер наноточки составлял одну элементарной ячейки. Расстояние между соседними наноточками соответствовало значению 10 Å. Толщина

смоделированных нанопленок составляла одну элементарную ячейку, а расстояние между нанопленками вдоль направления OZ выбиралась равной 10 Å. Результаты расчета зонной структуры для модельных нанообъектов приведены на рис. 1 и 2.

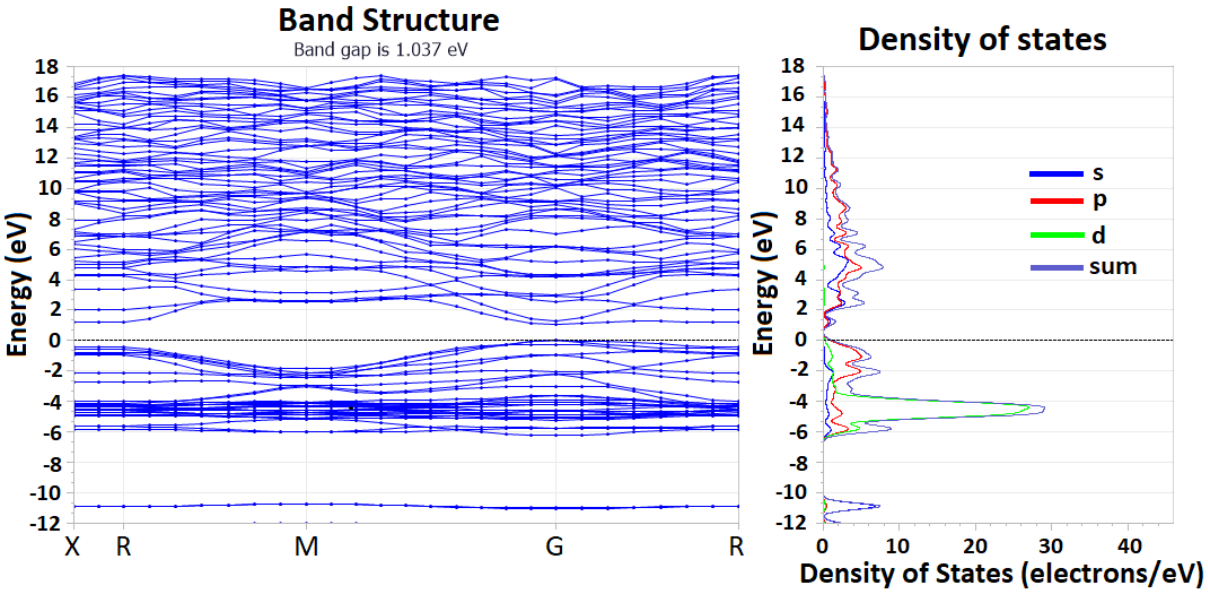


Рис. 1. Зонная структура и плотность состояний Ag_2Te в наносостоянии (нанопленка, расстояние между слоями 10 Å)

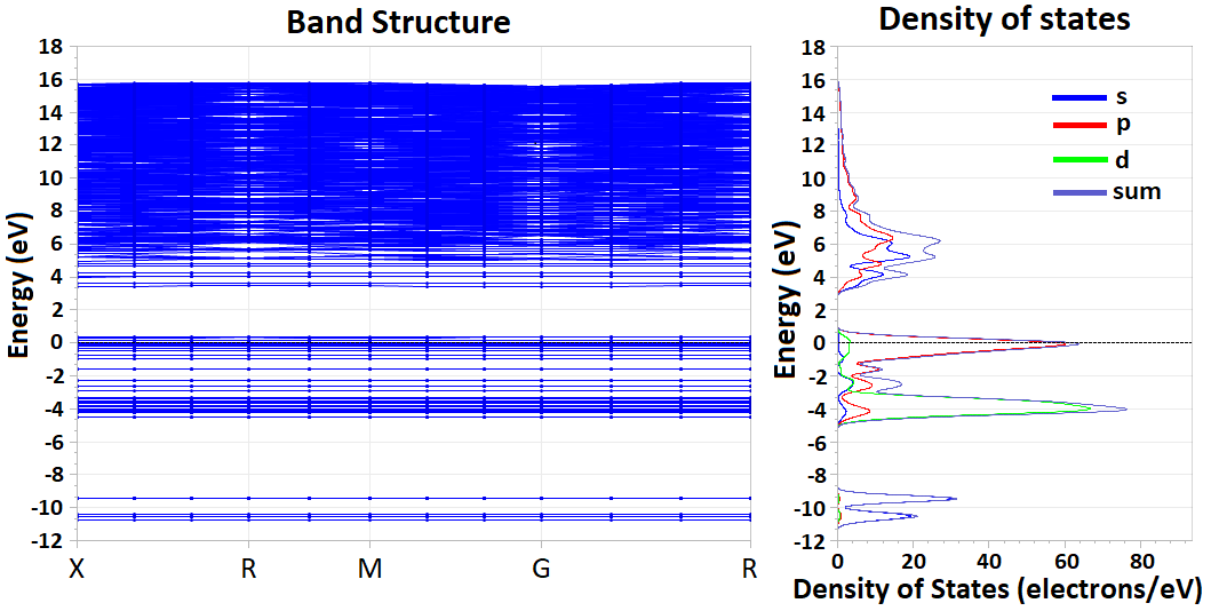


Рис. 2. Зонная структура и плотность состояний Ag_2Te в наносостоянии (наноточка, расстояние между наноточками 10 Å)

Согласно расчетам, зонные структуры смоделированной наноточки и нанопленки соединения Ag_2Te являются полностью дискретными. В теллуриде в состоянии нанопленки показано наличие ширины запрещенной

зоны, равной 1,037 эВ, однако для наноточки Ag_2Te в несуперионной фазе наличие запрещенной зоны не наблюдается.

Статья подготовлена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90216.

[1] Quantum-ESPRESSO [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://www.quantum-espresso.org.
[2] W.Kohn, Rev. Mod. Phys. **71**, 1253 (1999).
[3] R.O.Jones, O.Gunnarsson, Rev. Mod. Phys. **61,** 689 (1989).
[4] S.Baroni, S.de Gironcoli, A.DalCorso, P.Giannozzi, Rev. Mod. Phys. **73**, 515 (2001).
[5] M.Bockstedte, A.Kley, J.Neugebauer, M.Scheffler, Computer Physics Communications. **107**, 187 (1997).

ЛОКАЛЬНЫЕ СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА РАВНОВЕСНОГО И ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО РАСПЛАВА НИКЕЛЯ

Р.Р. Хайруллина*, Р.М. Хуснутдинов, А.В. Мокшин
Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
**e-mail: raniya-art@mail.ru*

Переохлажденные переходные металлы представляют собой класс жидкостей, обладающие специфическим ближним порядком во взаимном расположении атомов. Так, локальная структура таких металлов характеризуется многогранниками Франка-Каспера с координационными числами z=14÷16, а также сложным набором корреляционных длин, которые, в свою очередь, предопределяют её микроскопическую атомарную динамику.

В настоящей работе исследуются локальные структурные особенности и транспортные свойства равновесного и переохлажденного расплавов никеля с помощью моделирования молекулярной динамики. Моделирование никеля выполнялось в *NpT*-ансамбле для диапазона температур T=[1200; 3000]K при давлении p=1.0 *бар*. Рассматривались две системы, взаимодействия, между атомами которых осуществлялось с помощью потенциалов «погруженного атома» (EAM-потенциалов) [1] и [2]. Моделируемые системы состояли из N=32000 атомов, заключенные в кубическую ячейку с периодическими граничными условиями. Расплавы с заданными температурами были получены быстрым охлаждением (со скоростью охлаждения $\gamma=10^{10}$ K/c) из высокотемпературного равновесного состояния при T=3000K. Цель настоящего исследования заключалась в уточнении данных по вязкости и самодиффузии равновесного и переохлажденного никеля, а также в определении влияния локальных структурных особенностей на транспортные свойства и коллективную динамику в жидких переходных металлах.

Для исследования локальных структурных особенностей равновесного и переохлажденного никеля были рассчитаны статический структурный фактор, функции радиального и углового распределения. На рис. 1 представлены функция радиального распределения $g(r)$, статический структурный фактор $S(k)$ и функция углового распределения $P(\theta)$ ближайших соседей в расплаве никеля при различных температурах, полученные моделированием с EAM-потенциалом [1] и [2], соответственно. Из рисунка видно, что оба потенциала приводят к подобным результатам по структуре расплава никеля в широком диапазоне температур. Видно, что с уменьшением температуры в функциях радиального распределения $g(r)$ не наблюдаются какие-либо особенности, которые были бы характерны для

кристаллических и аморфных систем (появление экстрапиков, расщепление второго пика и др.). В то же время, второй максимум статического структурного фактора *S(k)* характеризуется слабым плечом, который становится более выраженным с переохлаждением. Такая особенность второго максимума в *S(k)* была обнаружена и в ряде других переходных металлов (*Fe*, *Ti*, *Zr*) и обычно связывается с так называемым икосаэдрическим (идеальным или искаженным) ближним порядком. Тот факт, что ближний порядок изменяется с охлаждением системы, также подтверждается формами функций углового распределения *P(θ)* при различных температурах (*T=3000K* для стабильного жидкого состояния и *T=1200K* для переохлажденного расплава), как показано на рис. 1 (c). Как видно из рисунка, переохлажденный расплав характеризуется более выраженными максимумами в функции распределения *P(θ)*, а также дополнительным пиком при θ=150°, что указывает на сложный политетраэдрический порядок.

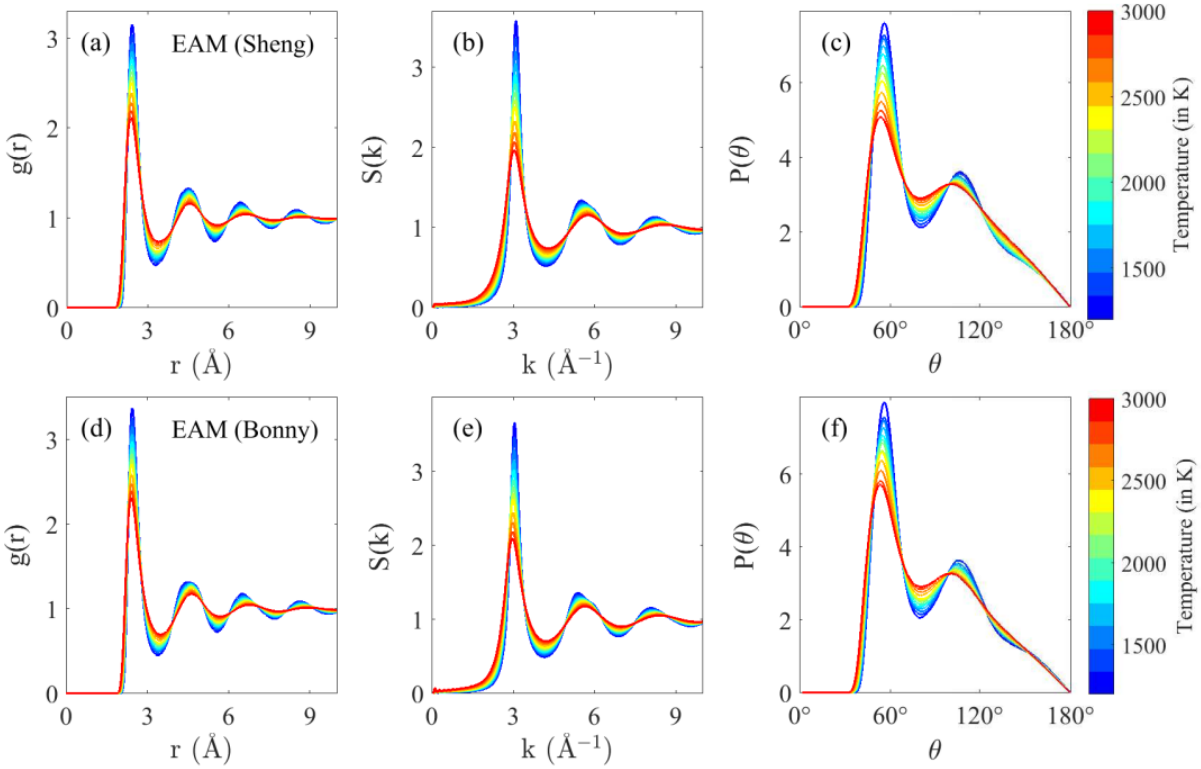


Рис. 1. Функция радиального распределения g(r) (a,d), статический структурный фактор S(k) (b,e) и функция углового распределения P(θ) (c,f) ближайших соседей в расплаве никеля при различных температурах. Верхняя колонка представляет результаты моделирования с потенциалом [1], нижняя колонка – результаты моделирования с потенциалом [2].

Сравнение результатов моделирования с имеющимися экспериментальными данными по самодиффузии *D* расплава никеля представлено на левой колонке рис. 2. Как видно из рисунка, результаты наших расчетов имеют подобную температурную зависимость для значений коэффициента *D*. В то же время, результаты моделирования для обоих

потенциалов [1] и [2] несколько переоценивают имеющиеся экспериментальные значения [3,4] на ~36% и ~20%, соответственно. На правой колонке рис. 2 представлены результаты моделирования в сравнении с экспериментальными данными [5,6] для температурной зависимости коэффициента сдвиговой вязкости η. Из рисунка видно, что рассчитанные значения вязкости находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными по вискозиметрии. В то же время, некоторые расхождения полученных результатов с экспериментальными данными [3,4], которые наблюдаются в области низких температур, могут объясняться различиями в специфике протоколов охлаждения моделирования и эксперимента (скорости охлаждения, времени выдержки и др.).

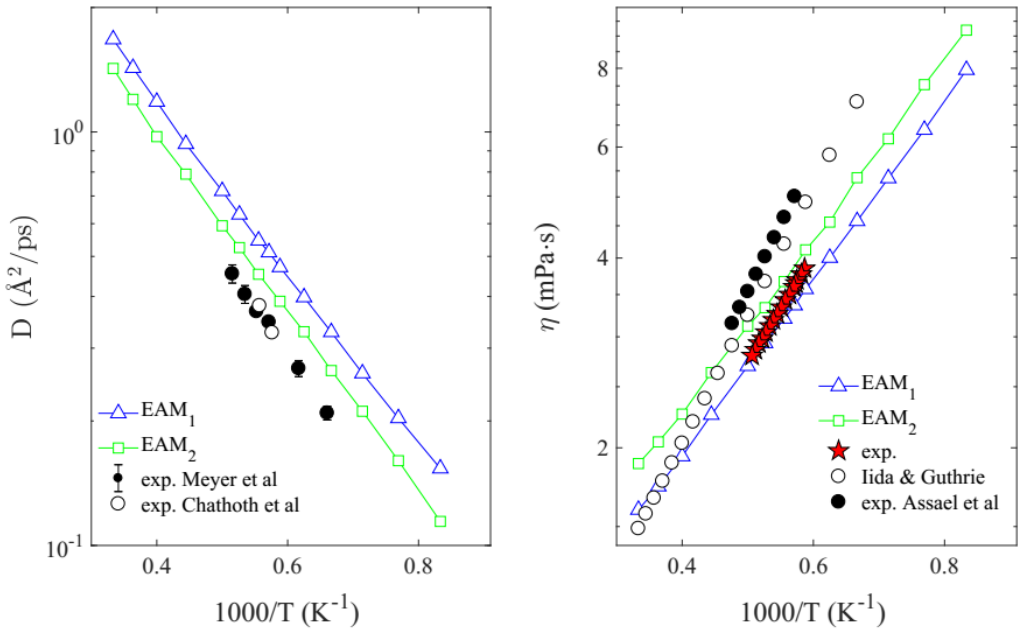


Рис. 2. Левая колонка: Температурная зависимость коэффициента самодиффузии расплава никеля: маркеры (●●●) и (ooo) представляют экспериментальные данные [3] и [4], соответственно. Правая колонка: Зависимость сдвиговой вязкости жидкого никеля от обратной температуры: маркеры (звездочки) соответствуют экспериментальным результатам; (ooo) и (●●●) – экспериментальные данные [5] и [6], соответственно. В обоих колонках маркеры (ΔΔΔ) и (□□□) обозначают результаты моделирования молекулярной динамики с EAM-потенциалами [1] и [2], соответственно.

Для выявления корреляций между транспортными характеристиками и структурными особенностями многочастичной неупорядоченной системы мы воспользовались масштабными преобразования, предложенные Дзугутовым, Ли и Розенфельдом[1] [7]. На рис. 3 представлены приведенные значения коэффициентов самодиффузии и вязкости для расплава никеля в зависимости от избыточной конфигурационной энтропии. Как видно из рисунка, результаты моделирования с обоими потенциалами показывают корреляцию между транспортными характеристиками и структурными

[1] Индексами Z, L и R обозначены масштабные преобразования Дзугутова, Ли и Розенфельда, соответственно.

особенностями расплава никеля для широкой области значений температур. Установлено, что наилучшее описание зависимостей $D^*(S_{ex})$ и $\eta^*(S_{ex})$ осуществляется в рамках масштабных преобразований Дзугутова и Ли, в то время как масштабные преобразования Розенфельда приводят к некоторым расхождениям результатов моделирования с теоретическими предсказаниями.

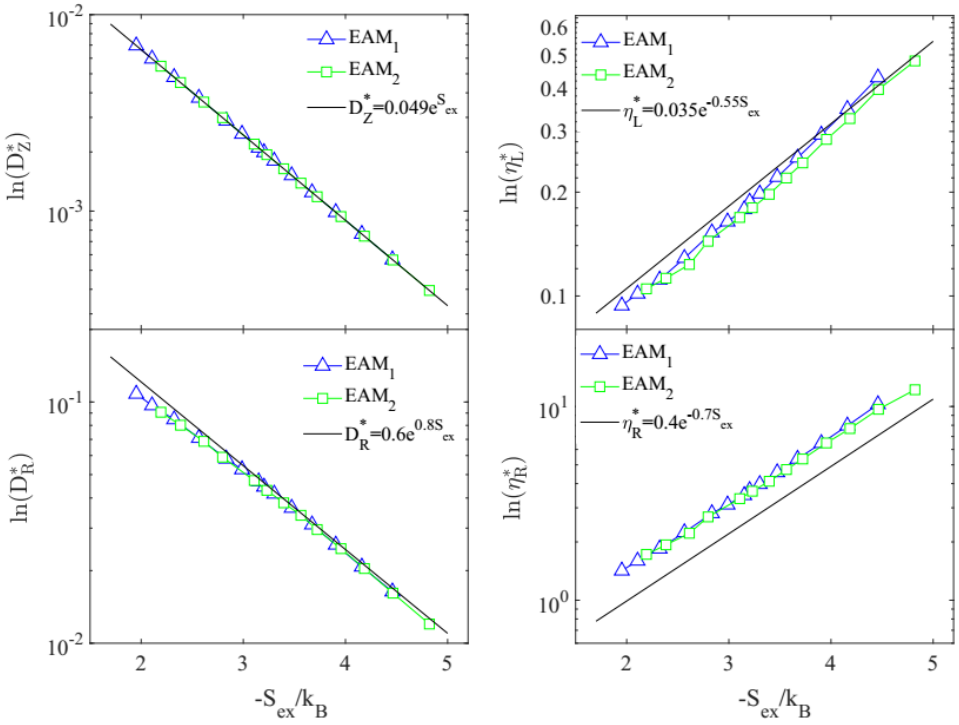


Рис. 3. Левая колонка: Зависимость приведенного коэффициента самодиффузии от избыточной энтропии. Сплошные линии (сверху) и (снизу) представляют масштабные соотношения Дзугутова и Розенфельда, соответственно. Правая колонка: Приведенная вязкость как функция от избыточной энтропии. Сплошные линии (сверху) и (снизу) представляют масштабные соотношения Ли и Розенфельда, соответственно. Маркеры (ΔΔΔ) и (□□□) представляют результаты моделирования молекулярной динамики с EAM-потенциалами [1] и [2], соответственно.

Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект № 19-12-00022).

[1] H.W. Sheng, E. Ma, M. J. Kramer, JOM **64**, 856 (2012).
[2] G. Bonny et al, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **17**, 025010 (2009).
[3] A. Meyer, S. Stüber et al, Phys. Rev. B **77**, 092201 (2008).
[4] S.M. Chathoth, A. Meyer et al, Appl. Phys. Lett. **85**, 4881 (2004).
[5] T. Iida, R.I.L. Guthrie, *The thermophysical properties of metallic liquids.* (Oxford: Oxford Press, 2015).
[6] M.J. Assael, A.E. Kalyva et al, High Temp.-High Press., **41**, 161 (2012).
[7] R.M. Khusnutdinoff, A.V. Mokshin, J. Phys.: Condens. Matter **33**, 104006 (2021).

Вычисление ренормализационной константы связи трехмерной модели Изинга

А.Н. Вакилов, В.В. Бражник
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия
e-mail: vakilovan@omsu.ru

Теория фазовых переходов второго рода характеризуется аномально большими взаимодействием флуктуаций параметра порядка и является теорией без малого параметра[1]. Поэтому ряды теории возмущений являются расходящимися и адекватно описать критические свойства реальных систем возможно только с применением специальных методов суммирования[2]. Ренормализационная константа связи является неподвижной точкой ренормгруппового преобразования и определяет критические характеристики системы и критические индексы. Вычисление таких критических характеристик непертурбативным методом Монте-Карло представляет большой интерес.

Модель Изинга описывается гамильтонианом

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^{N} S_i S_j,$$

где J- константа обменного взаимодействия между ближайшими соседями. В нашем случае $J > 0$, что соответствует ферромагнетику, S_i – спины, принимающие значения ±1 находятся в узлах трехмерной кубической решетки линейного размера L и периодическими граничными условиями. Микросостояние решетки определяется набором спинов S_i, а макроскопические свойства системы определяются свойствами ее возможных микросостояний.

В данной работе вычислялись следующие физические величины: намагниченность системы $M = \sum_i^N S_i$, восприимчивость $\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{kT}$, корреляционная длина $\xi = \frac{1}{2sin\left(\frac{\pi}{L}\right)} \sqrt{\frac{\chi}{F} - 1}$, где $F = \frac{\langle \Phi \rangle}{L^3}$,

$$\Phi = \frac{1}{3}\left(\left|\sum_i S_i exp\frac{2\pi i x_{1,i}}{L}\right)\right|^2 + \left|\sum_i S_i exp\frac{2\pi i x_{2,i}}{L}\right)\right|^2 + \left|\sum_i S_i exp\frac{2\pi i x_{3,i}}{L}\right)\right|^2\Big),$$

$\left(x_{1,i}, x_{2,i}, x_{3,i}\right)$ – координаты i-го узла решетки. Ренормализационная константа связи $g_R = 3\left(\frac{L}{\xi}\right)^3 \left(1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2}\right)$. Угловые скобки в формулах обозначают статистическое усреднение. Фазовый переход второго рода возможен лишь в термодинамическом пределе, когда объем системы и количество частиц стремиться к бесконечности. Для нахождения физических величин вблизи

критической температуры используются методы конечно-размерного скейлинга. Прямое применение этих методов для вычисления константы связи в термодинамическом пределе не дает правильного значения, так как в критической области необходимо учитывать переход от непрерывного к дискретному распределению спинов [3,4].

Для вычисления термодинамических величин использовали метод перевзвешивания [5], позволяющий на основе моделирование только при одной температуре получать значения среднее значение физических величин при других температурах.

Для уменьшения эффектов критического замедления времени релаксации в работе применялся кластерный алгоритм Вольфа[6]. В работе выполнено моделирование решеток с линейным размером L = 64, 80,96,110,128,140 при критической температуре. Усреднение термодинамических величин проводилось по $2\cdot10^6$ различным состояниям, соответствующим одному шагу Монте-Карло. Один шаг соответствовал десяти переворотам кластера Вольфа В работах [3,4] было получено условие одновременного достижения термодинамического и континуального предела $L/\xi > 4$. Поэтому, из вычисленных значений g_R для получения асимптотического значения g_R^∞ , использовались только те которые соответствовали условию $L/\xi = 5$. Нами было получено значение $g_R^\infty = 23{,}56(1)$, которое хорошо соотноситься с теоретико-полевым значением $g_R^\infty = 23{,}73(2)$[4] и результатами Монте- Карло $g_R^\infty = 23{,}3 - 26{,}4$[3,4].

В работе показано, что метод перевзвешивания дает возможность получать более точные значения для констант связи ренормализационного преобразования.

[1] К. Вильсон , Дж.Когут , УФН **146**, 459 (1985).
[2] И.М.Суслов И.М. , ЖЭТФ **127**, 1350 (2005).
[3] J.K.Kim , A.J. de Souza , D.P. Landau , Phys.Rev. E **54,** 2291(1996).
[4] H.G.Ballesteros , L.A.Fernández , V.Martín-Mayor , A. Muñoz Sudupe , Phys. Lett. B **441**, 330 (1998).
[5] A.M. Ferrenberg , R.H. Swendsen , Phys. Rev. Lett. **61 ,** 2635 (1988).
[6] U. Wolf ,Phys. Rev.Lett. **62,** 361 (1998).

Моделирование структуры системы Cu-Se

Н.Н. Биккулова, [1], А.Р. Курбангулов [1], Д.И. Сафаргалиев [1],
Г.Р. Акманова [2], Р.А. Якшибаев [2]
[1]Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета, Стерлитамак, Россия
[2] Башкирский государственный университет, Уфа, Россия
e-mail: grakmanova@mail.ru

Компьютерный дизайн структуры соединений халькогенидов меди и серебра является альтернативой классическому подходу при изучении суперионных проводников в суперионном и несуперионном состоянии [1]. Развитие физико-математических моделей учета анизотропии и отклонения от стехиометрии послужит основой для создания критериев прогноза свойств халькогенидов меди и серебра.

В данной работе расчет производился на основе программнго пакета USPEX [2] в комбинации с MOPAC, представителем полуэмпирического метода расчета структур. В эволюционном алгоритме USPEX использовалась теория функционала плотности, цель которого заключается в упрощении расчетов электронной структуры молекул и кристаллов в сочетании с квантово-механическими расчетами. Алгоритм USPEX основан на использовании подхода, в котором случайным образом генерируется небольшое количество структур и рассчитывается их энергия. Модели структуры с наибольшей полной энергией, то есть менее устойчивые, отбрасываются на каждом этапе, а из оставшихся наиболее устойчивых структур генерируются подобные и расчет продолжается.

Расчет был проведен для кристаллической структуры размером 4x4x4 элементарной ячейки Cu_2Se, на границы расчетного блока накладывались периодические граничные условия. Всего число атомов в кристаллической структуре 768, в том числе атомов селена 256 и атомов меди 512, параметр решетки 5,855Å. В результате расчета энергия кристаллической структуры на один атом Cu_2Se E=4.173 эВ, E=3.4 эВ по результатам расчета других авторов. Затем был проведен расчет упругих модулей. Модуль всестороннего сжатия/растяжения. Производная второго порядка энергии структуры рассчитывалась численными методами по пяти точкам.

В результате проведенных вычислений, значение упругого модуля всестороннего сжатия/растяжения равно 81.1 GPa, что дает хорошее согласие с экспериментальными данными 85.0 GPa.

Модельные расчеты зонной структуры наноточек для селенида меди представлены на рис.1 и 2. Минимизированная по энергии структура лишь незначительно отличается от измеренной объемной структуры. Были рассчитаны зонные структуры квантовых точек размера 1 элементарной ячейки, расположенные на расстоянии 10 Å, 15 Å, 20 Å и 2–х элементарных

ячеек. Боровский радиус для селенида меди составляет 10Å, в пределах которого возможны квантовые эффекты.

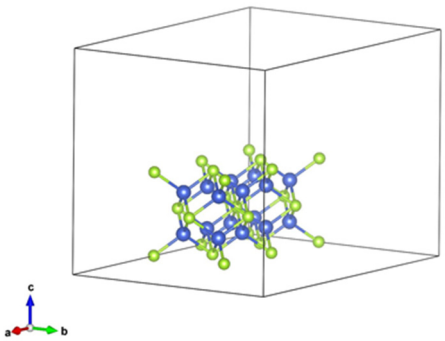


Рис. 1. Структура решетки Cu_2Se наноточка (2 ячейки), расстояние между точками 10Å по трем осям

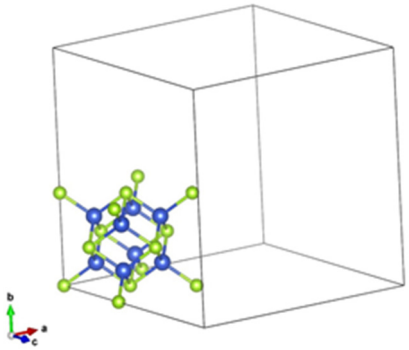


Рис. 2. Структура решетки Cu_2Se (1 ячейка), расстояние между наноточками 10Å

Таким образом, были проведены модельные компьютерные расчеты фазовой диаграмм системы Cu-Se с помощью программы USPEX, уточнены структуры селенидов меди стехиометрических и нестехиометрических составов. Было сделано предположение, что такой модельный расчет позволит получить теоретическую структурную модель, которая далее будет использована для расчета зонной структуры и фононного спектра.

Сравнительный анализ данных в суперионном и несуперионном состоянии мог бы дать ключ к пониманию природы суперионной проводимости и определить критерии по которым можно было бы делать прогноз о наличии суперионных свойств у исследуемых соединений.

[1] А.Р.Курбангулов, Л.В.Цыганкова, Н.Н.Биккулова, Д.И.Сафаргалиев, Г.Р. Нигматуллина Инженерная физика 10, 29 (2020).
[2] USPEX (Universal Structure Predictor: Evolutionary Xtallography) [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://uspex-team.org

Моделирование температурной зависимости диэлектрической проницаемости в сегнетоэлектрической керамике $Ba_{0,8}Sr_{0,2}Bi_{0,1}TiO_{2,85}(V_O)_{0,05}$

С.А. Гриднев, И.И. Попов
Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия
e-mail: popovich_vano@mail.ru

Сегнетоэлектрические материалы интересны как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения, поскольку изменяют свои свойства под действием электрического поля [1]. В обычных сегнетоэлектриках фазовый переход сопровождается резким изменением свойств и структуры при температуре Кюри. В материалах с размытым фазовым переходом аномалии свойств наблюдаются в широком интервале температур, который может занимать десятки и сотни градусов [2]. Моделирование свойств сегнетоэлектриков с размытым фазовым переходом, объяснение их температурных и частотных зависимостей до сих пор является актуальной задачей.

В работе [3] предложен вариант анализа диэлектрического отклика сегнетоэлектрических релаксоров, используя статистическое моделирование. В рамках данного подхода предлагается разделить отдельные диполи на различные группы в зависимости от их динамики, при этом каждая группа вносит отдельный вклад в восприимчивость. Число диполей с кинетической энергией, превышающей некоторый средний потенциальный барьер E_b, определяется выражением

$$N_1(E_b,T) = N\sqrt{\frac{4}{\pi}}\sqrt{\frac{E_b}{kT}}\exp\left(-\frac{E_b}{kT}\right) + N\ \mathrm{erfc}\left(\sqrt{\frac{E_b}{kT}}\right), \qquad (1)$$

где k – постоянная Больцмана, erfc – дополнительная функция ошибок. Тогда число диполей, ограниченных потенциальной ямой, будет равно

$$N_2(E_b, T) = N - N_1(E_b, T). \qquad (2)$$

Общая восприимчивость будет равна

$$\chi(T,\nu) = \chi_1(T,\nu)P_1(E_b,T) + \chi_2(T,\nu)P_2(E_b,T), \qquad (3)$$

где $P_1(E_b, T) = N_1(E_b, T)/N$, $P_2(E_b, T) = N_2(E_b, T)/N$, а $\chi_1(T, \nu)$ и $\chi_2(T, \nu)$ описывают отклики каждой дипольной группы.

В результате была получена формула для описания температурной зависимости диэлектрической восприимчивости в области размытого фазового перехода

$$\chi(T) = \frac{\chi_1}{1+\left|\frac{T-T_0}{\theta}\right|^{\gamma}}P_1(E_b,T) + \chi_2 P_2(E_b,T), \qquad (4)$$

где E_b, χ_1, χ_2, T_0, θ и γ являются подгоночными параметрами. Здесь γ – критический показатель степени, T_0 связана с положением пика размытого фазового перехода, θ – параметр, описывающий ширину пика, χ_2 имеет смысл диэлектрической восприимчивости при нуле Кельвина.

На рис. 1 представлена температурная зависимость диэлектрической проницаемости в сегнетоэлектрическом твёрдом растворе $Ba_{0,8}Sr_{0,2}Bi_{0,1}TiO_{2,85}(V_A)_{0,05}$ (синяя линия) и аппроксимация полученной зависимости с помощью формулы (4). При этом использовались следующие значения параметров: E_b = 0,036 эВ, χ_1 = 5050, χ_2 = 310, T_0 = 212 К, θ = 110 К и γ = 1,55.

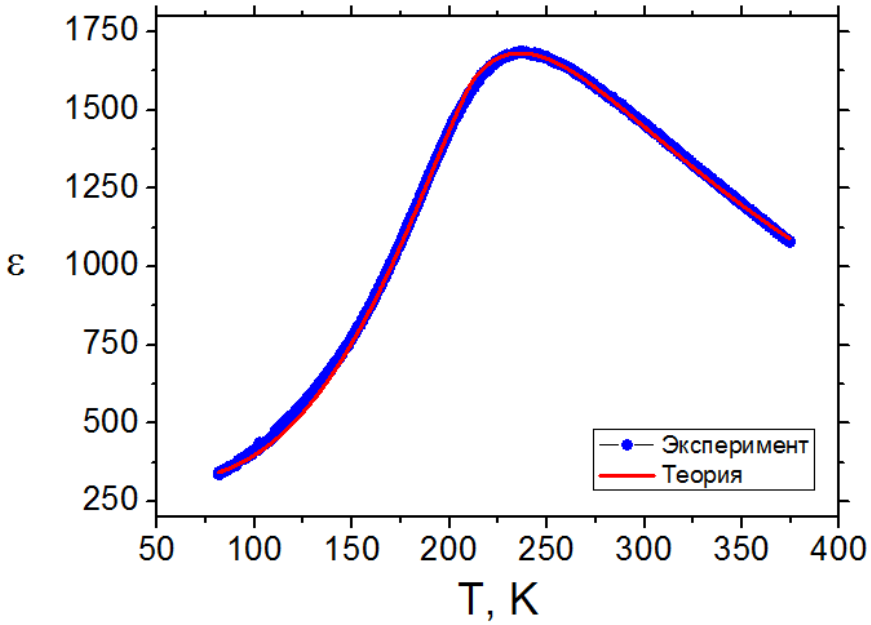


Рис.1. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости в сегнетоэлектрическом твёрдом растворе $Ba_{0,8}Sr_{0,2}Bi_{0,1}TiO_{2,85}(V_A)_{0,05}$ (синяя линия) и аппроксимация экспериментальной зависимости с помощью формулы (4) (красная линия)

Видно, что теоретическая кривая достаточно точно описывает экспериментальную зависимость $\varepsilon(T)$, что показывает применимость подхода, описываемого в работе [3], к анализу диэлектрического отклика в материалах с размытым фазовым переходом.

[1] К.А. Воротилов, В.М. Мухортов, А.С. Сигов, Интегрированные сегнетоэлектрические устройства / Под ред. А.С. Сигова, Энергоатомиздат, Москва (2011).
[2] A.A. Bokov, Z.-G. Ye, J. Mater. Sci. **41,** 31–52 (2006).
[3] J. Liu, F. Li, Y. Zeng, Z. Jiang, L. Liu, D. Wang, Z.-G. Ye, and C.-L. Jia, Phys. Rev. B **96,** 054115 (2017).

Численное моделирование кинетических процессов в струйных источниках холодной плазмы для медицинских приложений

Н.А.Ашурбеков[1], К.М.Рабаданов[1], Г.Ш.Шахсинов[1],
А.А.Муртазаева[1,2], З.М.Исаева[1]
[1] *Дагестанский Государственный Университет*
[2]*Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*
e-mail: nashurb@mail.ru

Низкотемпературная плазма атмосферного давления генерирует большое количество химически и биологически активных азотсодержащих и кислородсодержащих радикалов [1-9], без значительного повышения температуры окружающего газа. Наличие таких химически активных комплексов делает низкотемпературную плазму атмосферного давления (НТП) весьма привлекательной для использования в медицине. В этой области в настоящее время формируется новое научное направление, которое получило название плазменная медицина. Биомедицинские приложения НТП включают, например, стерилизация [1, 6], лечение рака [9], заживление ран и другие [10-11]. В настоящем докладе изложены результаты численного моделирования струйного источника холодной плазмы атмосферного давления в смеси воздуха и аргона. Конфигурация цифровой модели плазменного источника идентична экспериментальной установке, используемой авторами данной работы, что позволяет проводить сравнение результатов моделирования с экспериментом [12-14].

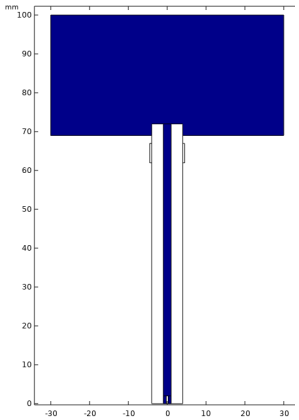


Рис.1 Геометрия модели.

Конфигурация источника плазменной струи состоит из кварцевой капиллярной трубки (относительная диэлектрическая проницаемость равна 4,1), и двух электродов, один из которых заземленный электрод в виде кольца одет на капиллярную трубку, второй электрод является приводным электродом. Предполагается, что через трубку пропускается газ – аргон, проходящий с определенной скоростью через атмосферу воздуха. Капилляр имеет внутренний радиус 1 мм, внешний радиус 7 мм, толщину стенок трубки 3 мм и длину 72 мм. 2D -геометрия источника плазменной струи, принятая в модели, приведена на рисунке 1.

Теоретическая модель плазменной струи состоит из двух связанных подмоделей: модели динамики потока газа и модели кинетики газоразрядной плазмы. В модели динамики потока газа вычисляются

давление, поле скорости и плотности компонентов фонового газа. Выходные данные модели динамики потока газа, такие как давление и скорость газа, используются в качестве входных данных для модели газового разряда. Также, выходные данные модели газового разряда, такие как динамическая вязкость и плотность газа, используются в качестве входных данных для динамики потока газа, что делает связь между двумя моделями самосогласованной. В модели газового разряда решаются уравнения для электронной плотности, плотности энергии электронов, электрического потенциала и плотностей активных частиц, образующихся при разряде (аргона, кислорода, азота, радикалов, содержащих азот и кислород). Поскольку число переменных в модели газового разряда, больше, чем в модели динамики потока газа, и поскольку ожидаемое решение модели разряда имеет более резкие градиенты плотности по сравнению с решением динамической модели потока, для модели разряда требуется гораздо более тонкая сетка. Мелкая сетка и большое количество переменных в модели разряда приводят к тому, что вычислительные и временные затраты (время выполнения и использование памяти) очень большие. Данная вычислительная модель была реализована с использованием пакета COMSOL Multiphysics версии 5.5 [www.comsol.ru].

Для моделирования течения газа используются обобщенная версия уравнений Навье-Стокса для решения задач гидродинамики. Уравнение Навье-Стокса вместе с уравнением непрерывности в Comsol записывается в виде системы дифференциальных уравнений:

$$\rho\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \nabla\cdot\left[\mu(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T) - \frac{2}{3}\mu(\nabla\cdot\mathbf{u})\mathbf{I}\right] + \rho(\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u} + \nabla p = 0,$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\mathbf{u}) = 0$$

где I – (m/s), p – давление (Pa),

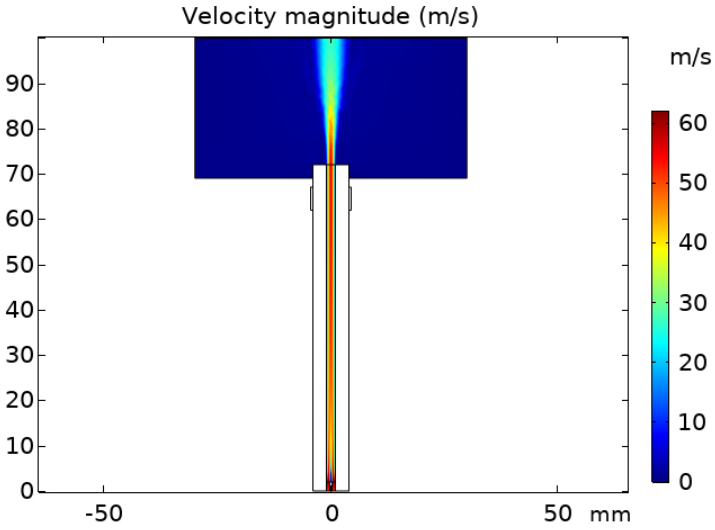


Рис 2. Результаты численного моделирования пространственной структуры плазменной струи в смеси воздуха с аргоном.

В результате численного моделирования было получено пространственное распределение электронов и частиц газа, таких как Ars, , O. Было обнаружено, что максимальная плотность активных частиц плазменной струи получается на выходе из капилляра, удаляясь от выхода из капилляра, плотность частиц испытывает быструю релаксацию (рисунок Также обнаружено, что пространственное содержание частиц изменяется в зависимости от скорости потока газа. Кроме того, в зависимости от скорости газа изменяется длина плазменной струи и ее пространственная структура. Результаты исследований показали, что плотность определенного сорта активных частиц в плазменной струе изменяется в зависимости от амплитуды импульсов напряжения, скорости потока аргона и расстояния от выхода разрядной трубки.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ № 19-32-90180

[1] E. Sysolyatina, M. Vasiliev, M. Kurnaeva et.al. J Phys D Appl. Phys **49**, 294002 (2016).
[2] N.Y. Babaeva, G.V. Naidis, Trends Biotechnol **36**, 603-14 (2018).
[3] D. Staack, B. Farouk, A. Gutsol, A. Fridman, Plasma Sources Sci T **14**, 700-11 (2005).
[4] T. Nosenko, T. Shimizu, G.E. Morfill, New Journal of Physics **11**, 115013 (2009).
[5] G.E. Morfill, M.G. Kong, J.L. Zimmermann, New Journal of Physics **11**, (2009).
[6] M.J. Kirkpatrick, B. Dodet, E. Odic, International Journal of Plasma Environmental Science & Technology **1**, 96-101 (2007).
[7] D.Y. Yan, N. Nourmohammadi, A. Talbot, J.H. Sherman, M. Keidar, J Phys D ApplPhys **49**, (2016).
[8] J.S. Oh, E.J. Szili, N. Gaur, S.H. Hong, H. Furuta, H. Kurita, A. Mizuno, A. Hatta, R.D. Short, J Phys D ApplPhys **49**, (2016).
[9] S. Arndt, E. Wacker, Y.F. Li, T. Shimizu, H.M. Thomas, G.E. Morfill, S. Karrer, J.L. Zimmermann, A.K. Bosserhoff, Exp Dermatol **22**, 284-9 (2013).
[10] G. Isbary et al., Clinical Plasma Medicine **1**, 25-30 (2013).
[11] K. Ostrikov, U. Cvelbar, A.B. Murphy, J Phys D Appl Phys **4**4, (2011).
[12] N.A. Ashurbekov, G.S. Shakhsinov, E.K. Israpov, Z.M. Isaeva, Herald of Dagestan State Univ **34**, 19-35 (2019).
[13] N.A. Ashurbekov, K.M. Giraev, G.Sh. Shakhsinov et.al. Journal of Physics Conference Series **1697**, 012044 (2020).
[14] N.A.Ashurbekov, Z.M.Isaeva, G.Sh.Shakhsinov, K.M.Rabadanov, A.A.Murtazaeva and Kh.Israpov, Journal of Physics Conference Series. (2021).

Фазовая диаграмма и структуры основного состояния модели Поттса на решетке Кагоме

М.А. Магомедов [1, 2] А.К. Муртазаев [1]
[1] *Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*
[2] *Отдел Математики и Информатики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*
e-mail: magomedov_ma@mail.ru

В данной работе нами проведены высокоточные исследования модели Поттса с числом состояний q=3 на решетке Кагоме с учетом обменного взаимодействия как первых, так и вторых ближайших соседей.

Схематически модель представлена на рисунке 1. Как видно из рисунка, атомы на решетке Кагоме можно разделить на три подрешетки. Спины, входящие в одну подрешетку обозначены на рисунке одним цветом.

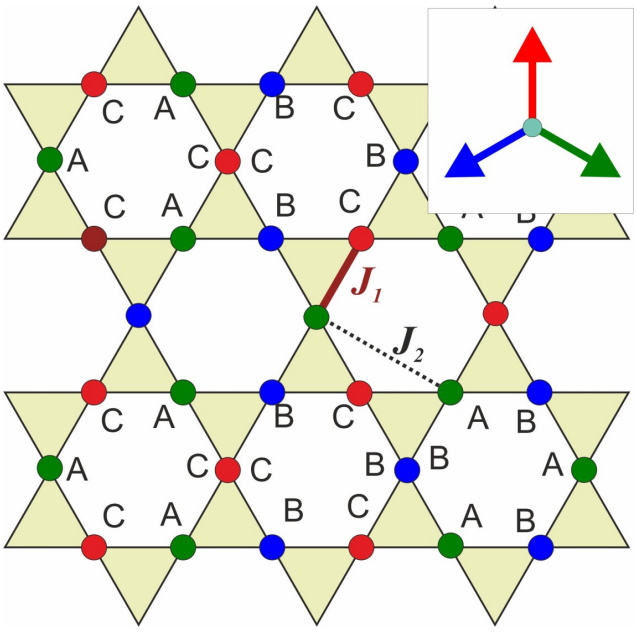


Рис.1 Модель Поттса с числом состояний спина q = 3 на решетке Кагоме.

Взаимодействие между ближайшими спинами характеризуется обменным взаимодействием J_1, а между следующими за ближайшими спинами – J_2. Обменные взаимодействия могут принимать различные значения. Величина и знак J_1 и J_2 играют основополагающую роль в характере поведения модели. Нами проведены исследования при различных соотношениях J_1 и J_2 для выяснения степени их влияния на термодинамические свойства системы

Гамильтониан модели может быть представлен в следующем виде:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} Cos\,\theta_{i,j} - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle} Cos\,\theta_{i,k}\,, \qquad (1)$$

где J_1 и J_2 – параметры обменных взаимодействий для ближайших и вторых ближайших соседей соответственно. $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$ соответственно. Спины могут принимать одно из трех возможных значений, изображенных на рисунке 1. В данной работе обмен между ближайшими соседями бралось равным $J_1 = 1$, а J_2 менялось в широком диапазоне значений.

Для исследования модели нами использован алгоритм Ванга-Ландау метода Монте-Карло [1, 2]. Данный алгоритм позволяет найти функцию плотности состояний системы, зная которую можно легко рассчитать все остальные характеристики. Алгоритм Ванга-Ландау основан на том, что совершая случайное блуждание в пространстве энергий с вероятностями, обратно пропорциональными плотности состояний $g(E)$, мы получаем равномерное распределение по энергиям. Подобрав вероятности перехода такими, что посещение всех энергетических состояний стало бы равномерным, можно получить изначально неизвестную плотность состояний $g(E)$, зная которую можно вычислить значения необходимых термодинамических параметров при любой температуре. Важным обстоятельством является то, что плотность состояний $g(E)$ не зависит от температуры, следовательно, ее расчет нужно проводить только однократно.

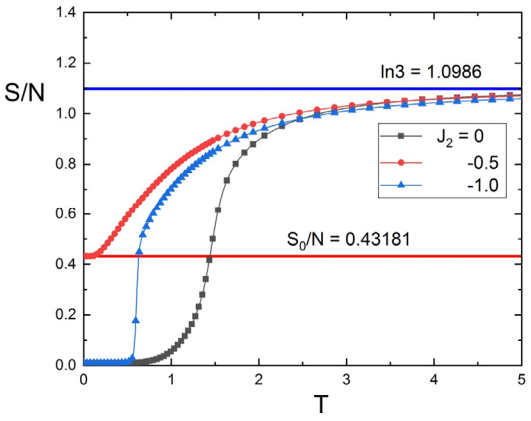


Рис.2 Температурная зависимость энтропии S.

Температурная зависимость энтропии ***S*** при различных линейных размерах системы приведена на рисунке 2. При высоких температурах энтропия системы стремится к теоретическому значению **ln3**, в то время как с понижением температуры для большинства значений обменных взаимодействий энтропия стремится к нулю, кроме случая фрустрации.

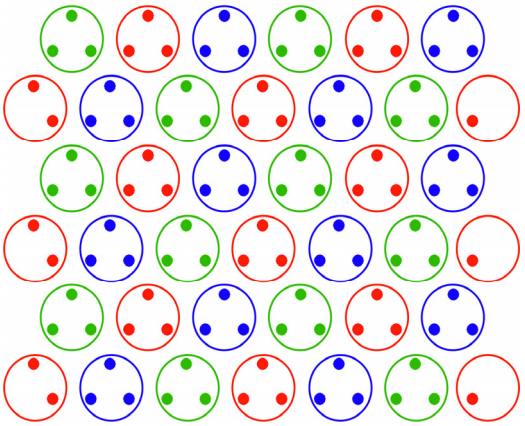


Рис.3 Структура основного состояния при J_1 =1 и J_2=-1.

Далее на рисунке 3 мы приводим структуру основного состояния при J_1=1 и J_2=-1.

Результаты, полученные в ходе исследований, могут быть весьма полезными для описания различных низкоразмерных магнитных материалов, таких как Делафосситы, Гербертсметиты, и т.д.

[1] M.A. Magomedov, A.K. Murtazaev, Solid State Phys. **60**, 1184 (2018).
[2] F. Wang, D.P. Landau, Phys. Rev. Lett. 864, 2050 (2001).

Термодинамика модели Поттса на гексагональной решетке

М.А. Магомедов [1, 2], Л.К. Магомедова [1, 3]
[1] *Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*
[2] *Отдел Математики и Информатики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*
[3] *Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия*
e-mail: magomedov_ma@mail.ru

В данной работе нами проведены высокоточные исследования методом Ванга-Ландау модели Поттса с числом состояний q=4 на гексагональной решетке с учетом взаимодействия как первых, так и вторых ближайших соседей [1, 2].

Гамильтониан модели может быть представлен в следующем виде:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} Cos\,\theta_{i,j} - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle} Cos\,\theta_{i,k}\,, \qquad (1)$$

где J_1 и J_2 – параметры обменных взаимодействий для ближайших и вторых ближайших соседей соответственно. $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$ соответственно.

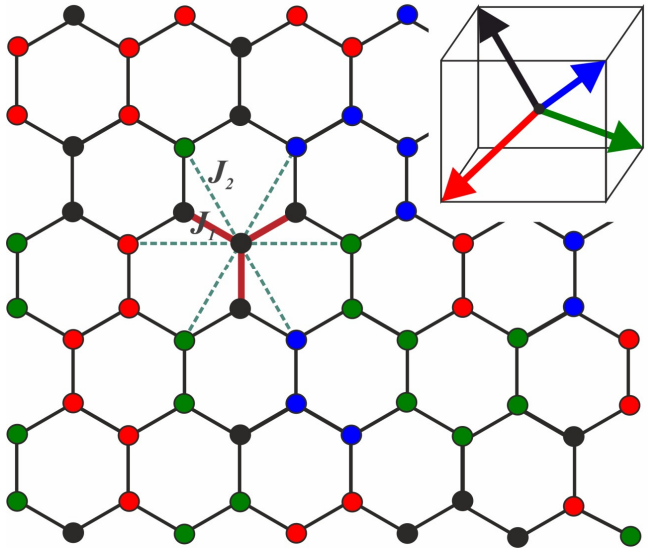


Рис.1 Модель Поттса с числом состояний спина q=4 на гексагональной решетке.

Схематически модель представлена на рисунке 1. На вставке приведены цветовые обозначения каждого из четырех возможных направлений спина. Взаимодействие между ближайшими спинами характеризуется обменным взаимодействием J_1, а между следующими за ближайшими спинами – J_2. Обменные взаимодействия могут принимать различные значения. Нами проведены исследования при различных соотношениях J_1 и J_2 для выяснения степени их влияния на термодинамические свойства системы

Нами рассчитана плотность состояний системы, определены структуры основного состояния и вычислены температурные зависимости различных термодинамических параметров системы при различных соотношениях J_1 и J_2.

[1] M.A. Magomedov, A.K. Murtazaev, Solid State Phys. **60**, 1184 (2018).
[2] F. Wang, D.P. Landau, Phys. Rev. Lett. 864, 2050 (2001).

Влияние немагнитных примесей на фазовые переходы и критические явления во фрустрированной модели Изинга на треугольной решетке

М.Р.Джамалудинов[1], М.К.Рамазанов[1,2], М.А. Магомедов[1,2], А.К.Муртазаев[1]
[1] Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
[2] Отдел Математики и Информатики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
e-mail: dzhamaludinov.1993@mail.ru

Изучение фазовых переходов и критического поведения фрустрированных спиновых систем является одной из наиболее сложных и центральных проблем в физике конденсированного состояния [1]. Особый интерес представляет исследование фрустрированых систем с «вмороженными» немагнитными примесями.

В данной работе приводится Монте-Карло исследование влияния немагнитных примесей на термодинамические и магнитные свойства фрустрированной двумерной антиферромагнитной модели Изинга методом Ванга-Ландау [2].

Гамильтониан исследуемой модели описывается выражением:

$$H = -\frac{J}{2}\sum_{\langle i,j\rangle}\rho_i\rho_j S_i S_j ,$$

$$\rho_i = \begin{cases} 0 & \textit{если в узле находится примесь} \\ 1 & \textit{если в узле находится магнитный атом} \end{cases}, \qquad (1)$$

где *J*-параметр обменного взаимодействия (J<0).

Проведено численное исследование для решеток с линейными размеромы L*L=N, где L=12, 30, 48, 60 и с концентрацией спинов p=1.0 и p=0.9. Для случая p=0.9 проведено усреднение термодинамических и магнитных параметров по 30 конфигурациям случайного распределения примесей в решетке. Получены температурные зависимости теплоемкости, энтропии, энергии и намагниченности. Обнаружено, что при введении немагнитных примесей наблюдается рост величины теплоемкости до 1.5 раз и смещение его пика в сторону низких температур. В области низких температур при внесении немагнитных примесей с увеличением размера решетки для теплоемкости наблюдается пик нехарактерный для чистой решетки. В данной области температур скачок испытывают энтропия и энергия, что может свидетельствовать о фазовом переходе первого рода.

[1] M.A. Magomedov, A.K. Murtazaev, Solid State Phys. **60**, 1184 (2018).
[2] F. Wang, D.P. Landau, Phys. Rev. Lett. 864, 2050 (2001).

Фазовая диаграмма модели Поттса с числом состояний спинов q = 4 на решетке Кагоме

М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, Т.Р. Ризванова, А.А. Муртазаева
Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук, Махачкала, Россия
e-mail: rizv@yandex.ru

В последнее время большое внимание привлекло изучение фазовых переходов (ФТ) и низкотемпературных свойств соединений с решеткой кагоме . Это связано с тем, что в таких веществах из-за особой геометрии решетки могут возникать фрустрации. В антиферромагнитных соединениях с решеткой кагоме при учете взаимодействий ближайших первых и вторых соседей наблюдаются фрустрации. Эффекты фрустрации играют важную роль в магнитных системах. Фрустрированные спиновые системы проявляют свойства, отличные от соответствующих нефрустрированных систем, что вызывает повышенный интерес к изучению явлений фрустрации в магнитных системах [1-3].

Каждый спин в двумерной модели Поттса с числом спиновых состояний q = 4 на решетке кагоме имеет четыре первых ближайших и четыре вторых ближайших соседей, так же четыре возможных направления вращения. С помощью алгоритма Ванга-Ландау метода Монте – Карло были получены магнитные структуры основного состояния в широком диапазоне значений взаимодействия вторых ближайших соседей. Показано, что учет антиферромагнитных взаимодействий ближайшего соседа приводит к нарушению магнитного упорядочения. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия ближайших соседей. Показано, что фазовый переход первого порядка наблюдается в диапазонах $0 \le r < 0,5$ и $0,5 < r \le 1,0$. При $r = 0,5$ основное состояние сильно вырождается, и система становится фрустрированной.

[1] H. T. Diep, Frustrated Spin Systems, World Scientific Pub-lishing Co. Pte. Ltd., Singapore (2004), p. 624.
[2] F. A. Kassan-Ogly, A. K. Murtazaev, A. K. Zhuravlev, M. K. Ramazanov, and A. I. Proshkin, *J. Magn. Magn.*

Секция Б2

Общие вопросы физики фазовых переходов и критических явлений

Pressure tuning of structure and electronic properties and pressure-driven superconductivity of transition-metal dichalcogenides

S. A. Medvedev
Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids, 01187 Dresden, Germany
e-mail: medvedie@cpfs.mpg.de

The exploration of the chemical, structural and electronic parameters of a solid, which lead to the appearance or the enhancement of superconductivity, is an ongoing topic of intensive research. Application of the high pressure is a powerful method to change drastically but in controllable manner the interatomic distances in solids and investigate consequent properties of the system. The impact of high pressure on the crystalline solid results in structural, electronic, magnetic and other phase transitions and leads to unusual and sometimes even unexpected properties of matter. The family of transition-metal dichalcogenides with their well-defined structure and wide range of electronic properties provides a platform to study the regularities of pressure-induced structural phase transitions and the interplay between structure and properties of matter. Transition-metal dichalcogenides (TMDs) TX_2 (T is transition metal cation and X is chalcogen anion) have attracted the interest in mineralogy, chemistry, solid-state physics and materials science over more than five decades due to their interesting structural chemistry, unusual electronic properties, rich intercalation chemistry, and wide spectrum of potential applications. Originating from the competition between cationic (metal) *d*-orbitals and anionic (chalcogen) *sp*-levels, TMDs form either two- (2D) or three-dimensional (3D) structures. In this talk, the pressure tuning of crystal and electronic structure and pressure-induced superconductivity in layered 2D β-$MoTe_2$ and 3D PdS_2 nad $PdSe_2$ will be discussed.

Исследование фазовых переходов в фосфатах со структурой витлокит

И.В.Никифоров, Д.В.Дейнеко
МГУ имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, Москва, Россия
e-mail: ivan.nikiforov@chemistry.msu.ru

Соединения со структурой типа витлокит (β-$Ca_3(PO_4)_2$) привлекают все больше внимания различных научных групп. Большая часть соединений данного структурного типа кристаллизуется в пространственной группе (пр. гр.) R3c, например, фосфаты состава $Ca_9R(PO_4)_7$, R – катион редкоземельного элемента [1]. При гомовалентном замещении $Ca^{2+} \rightarrow M^{2+}$ (M – Zn, Mg) получаемые соединения сохраняют витлокитоподобную структуру, но пр.гр. становится уже R-3c [2]. Ранее, при исследовании системы $Ca_{9-x}Mg_xEu(PO_4)_7$ было показано что дифрактограммы получаемых соединений не различимы [3]. Чтобы установить границы образования различных фаз, необходимо использовать комплекс методов, таких как люминесцентная спектроскопия, генерация второй оптической гармоники (ГВГ) и другие, поскольку изменение кристаллической структуры и пр.гр. изменяет и свойства исследуемых веществ. В данной работе исследуются фосфаты состава $Ca_8M^{2+}M^{+}(PO_4)_7:Eu^{3+}$ (M^{2+} = Ca, Mg, Zn; M^{+} = Li, Na, K), с варьированием катионов одновалентных и двухвалентных металлов.

Синтез сложных фосфатов проводили стандартным твердофазным методом из $CaHPO_4 \cdot 2H_2O$ (ч.д.а.), $CaCO_3$ (ч.д.а.), $M^{+}_2CO_3$ (ч.д.а.) (M^{+} = Li, Na, K), ZnO (ч.д.а.), MgO (ч.д.а.),и Eu_2O_3 (ч.д.а.). Исходные реагенты были проверены на чистоту и не содержали примесных фаз. Синтез проводили посредством ступенчатого нагревания до 1100°C и выдерживанием при данной температуре порядка 50 часов.

На рисунке 1 представлена рентгенограмма для синтезируемых соединений, все вещества кристаллизуются в структурном типе витлокит. Однако, по рентгенограммам нельзя определить точно пространственную группу. Сигналы ГВГ для приведенных образов отсутствуют, что говорит об образовании пр.гр. R-3c.

При исследовании спектров фотолюминесценции при возбуждении на 395 нм, наблюдаются стандартные переходы в красно-оранжевой области видимого спектра, отвечающие Eu^{3+}: $^5D_0 \rightarrow {}^7F_J (J = 0 – 4)$. Самая интенсивная линия соответствует переходу $^5D_0 \rightarrow {}^7F_2$ (615 нм). Наиболее эффективным оказался состав $Ca_8ZnLi(PO_4)_7:Eu^{3+}$, кристаллизующийся в пр.гр. R-3c, таким образом повышение общей симметрии способствует увеличению интегральной интенсивности.

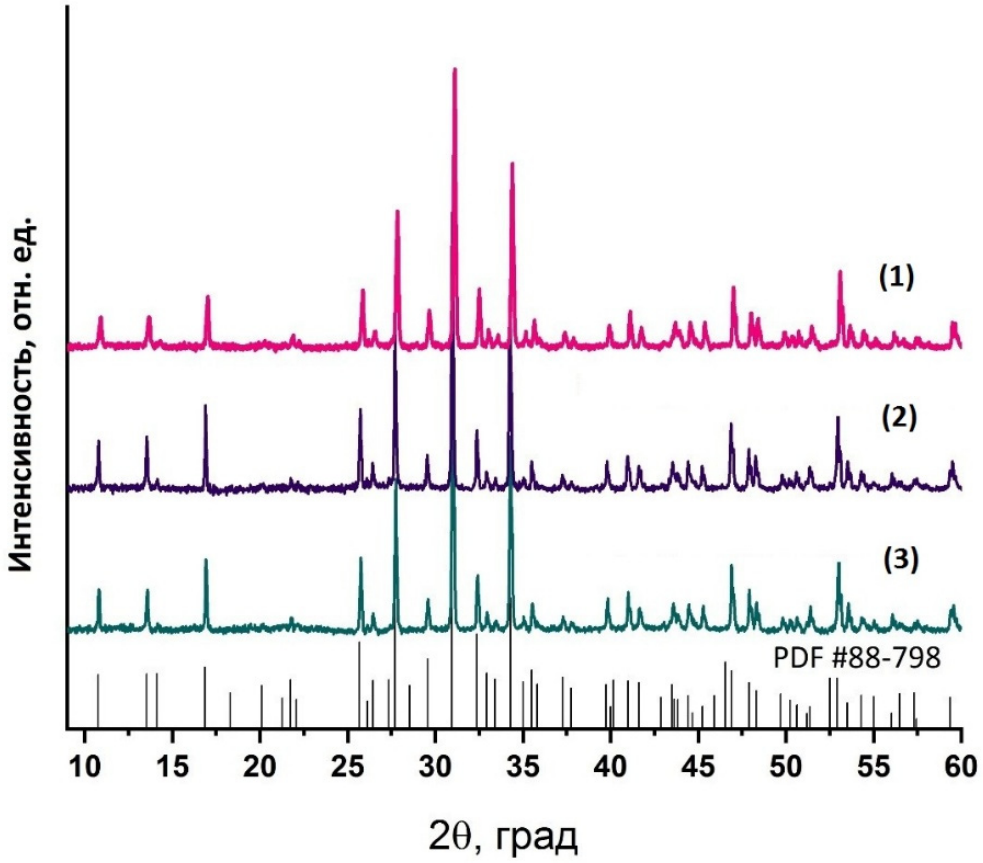


Рис. 1. Рентгенограмма для соединений состава $Ca_9MgM(PO_4)_7:0.1Eu^{3+}$, где M = Li (1), Na (2), K (3).

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ (№ 19-77-10013)

[1] A. Bessière, R.A. Benhamou, G. Wallez, A. Lecointre, Acta Mater. **60**, 6641 (2012).
[2] A.A. Belik, et al., J. Alloys Compd. **699**, 928 (2017).
[3] D.V. Deyneko, I.V. Nikiforov, et al., CrystEngComm. 21, 5235 (2019).

Синтез фосфатов $Sr_8MEu(PO_4)_7$ ($M = Mg^{2+}, Zn^{2+}$): влияние метода синтеза на люминесцентные свойства

Д.В. Дейнеко, И.В. Никифоров
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
e-mail: deynekomsu@gmail.ru

В связи и растущим потреблением электроэнергии возрос запрос на использование энергосберегающих осветительных устройств. В данной сфере прогресс может быть достигнут путем улучшения как самого диода, так и модификации люминофора, покрывающего этот диод. Люминофоры, использующиеся в данной области в основном, принадлежат классам фосфатов [1], аллюминатов, силикатов.

В классе фосфатов одним из наиболее обширных и перспективных семейств являются вещества со структурой β-$Ca_3(PO_4)_2$ или минерала витлокита [2]. Был накоплен обширный материал по различным химическим композиция в данном структурном типе [3], показано, что на интенсивность люминесцентных свойств оказывает влияние как общая симметрия элементарной ячейки, так и точечная группа симметрии. Существует несколько основных методов синтеза люминофоров: классический твердофазный метод, проводящийся при высоких температурах (T ~ 1100 ºC); золь-гель метод, при котором исходные реагенты переводятся в раствор и оказываются смешанными на микроуровне, что позволяет получать лучшую гомогенность продуктов; гидротермальный метод, который не требует высоких температур и позволяет получать продукт в виде микрокристаллов.

Серия новых стронций-содержащих фосфатов была получена в системе $Sr_8ZnSm_{1-x}(PO_4)_7{:}xEu^{3+}$ со структурой β-$Ca_3(PO_4)_2$. Фосфаты были получены тремя различными методами синтеза: высокотемпературный твердофазный, золь-гель и гидротермальный. В качестве исходных реагентов были использованы $NH_4H_2PO_4$, $SrCO_3$, MgO, ZnO и Eu_2O_3. Для проведения синтеза методом золь-гель навески исходных реагентов растворяли в азотной кислоте и смешивали с лимонной кислотой. Для проведения гидротермального синтеза навески помещались в автоклав с тефлоновой обкладкой.

Вещества были исследованы методом рентгенофазового анализа, доказана их однофазность и принадлежность к структурному семейству β-$Ca_3(PO_4)_2$. В комбинации с методом генерации второй оптической гармоники было установлено неполярное строение ввиду полного отсутствия сигнала в сравнении с кварцевым эталоном. Так, при уточнении кристаллических структур была установлена пространственная группа *R*-3*m*.

В работе было изучено распределение частиц по размерам. Показано, что при получении люминофора твердофазным методом распределение частиц является наиболее равномерным, количество фракции наибольшее.

Размер частиц оказывает влияние на проявляемые люминесцентные свойства. На спектрах фотолюминесценции при возбуждении $\lambda_{возб.}$ = 395 нм присутствуют стандартные переходы из возбужденного уровня $^5D_0$ на термы основного состояния ^7F_J. Установлено, что вещества, синтезированные методом твердофазных реакций, показывают наибольшую интенсивность люминесценции.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект номер 19-77-10013).

[1] И.В. Никифоров, Д.В. Дейнеко, И.Ф. Дускаев, Физика твердого тела, **5**, 766 (2020).
[2] D.V. Deyneko, S.M. Aksenov, V.A. Morozov, S.Yu Stefanovich, O.V. Dimitrova, O.V. Baryshnikova, B.I. Lazoryak. *Zeitschfrift für Kristallographie*, **229,** 823 (2014).
[3] D.V. Deyneko, S.M. Aksenov, I.V. Nikiforov, S.Yu. Stefanovich, B.I. Lazoryak. *Crystal Growth and Design,* **20**, 6461–6468 (2020).

Фазовые состояния в нанокристаллах тетрахлорцинката рубидия в условиях ограниченной геометрии

Л.С. Стекленева, Л.Н. Коротков
Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия
e-mail: lubov_stekleneva@mail.ru

Тетрахлорцинкат рубидия (Rb_2ZnCl_4) представляет собой сегнетоэлектрик с несоразмерной фазой, которая реализуется в интервале температур между сегнетоэлектрической и параэлектрической фазами (рис. 1). Область существования несоразмерной фазы составляет 109 К и ограничивается фазовыми переходами из параэлектрической в несоразмерную фазу при $T_i \approx$ 303 К и переходом из несоразмерной в сегнетоэлектрическую фазу при температуре $T_C \approx 192$ К.

В наноструктурированном состоянии несоразмерные сегнетоэлектрики до сих пор изучались сравнительно мало, поэтому исследование свойств Rb_2ZnCl_4, внедренного в пористые матрицы представляется актуальной задачей физики сегнетоэлектриков.

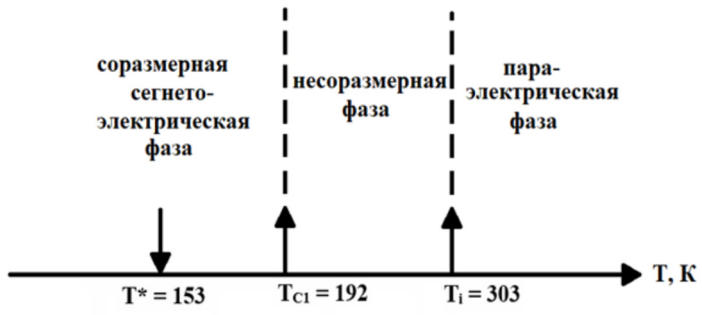


Рис.1 Температурная последовательность фазовых переходов в Rb_2ZnCl_4.

Для экспериментов использовались композиционные материалы на основе Rb_2ZnCl_4 и пористых матриц из SiO_2 со средним диаметром сквозных пор пор 320 нм и из Al_2O_3 с диаметром пор 300 нм (рис. 2).

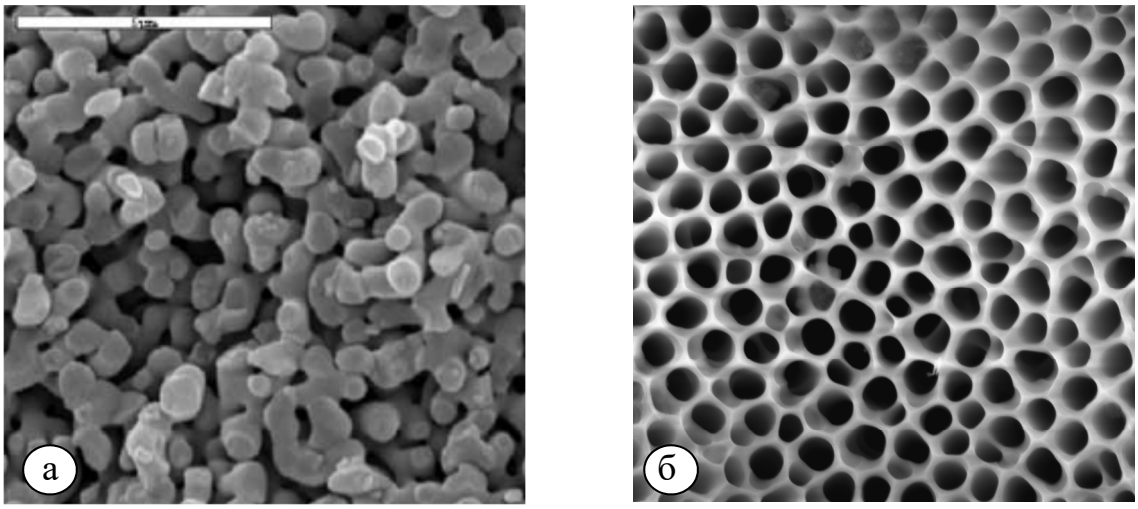


Рис. 2 Изображения поверхностей пористых матриц SiO_2 (а) и Al_2O_3 (б), полученные с помощью сканирующего электронного микроскопа

Внедрение тетрахлорцинката рубидия производилось из насыщенного водного раствора в предварительно отожженые матрицы при температуре 90-100 °С в течение 4-6 часов. Рентгенодифракционный анализ показал, что внедренный материал кристаллизовался в порах в виде кристаллитов со структурой Rb_2ZnCl_4.

Готовые образцы композитов Rb_2ZnCl_4–SiO_2 и Rb_2ZnCl_4–Al_2O_3 представляли собой плоско-параллельные пластины с размерами 10x10x0,1 мм, на поверхности которых, с использованием проводящей серебряной пасты, были нанесены электроды.

Исследование температурных зависимостей диэлектрической проницаемости (ε) композитов проводилось в температурном интервале 100 – 370 К на частоте 10 кГц.

Результаты экспериментов позволили определить температуры T_i и T_C, ограничивающие несоразмерную фазу во внедренных частицах Rb_2ZnCl_4. Обнаружено, что для обоих композитов температура сегнетоэлектрического фазового перехода в частичках Rb_2ZnCl_4 приблизительно на 50 К выше чем в монокристаллическом образце. Смещение T_C предположительно связано с возникновением упругих напряжений в частицах внедренного материала. Наряду с этим выявлено, что температура перехода из параэлектрической в несоразмерную фазу T_i изменяется незначительно ($\Delta T \approx 2$-8 К).

Наряду с аномалиями диэлектрического отклика, наблюдаемыми на температурных зависимостях ε окрестностях T_i и T_C был также обнаружен размытый максимум диэлектрической проницаемости при $T^* \approx 160$ К, которая согласно литературным данным, соответствует температуре замораживания подвижности доменной структуры монокристаллического Rb_2ZnCl_4 [1]. Таким образом, можно констатировать, что T^* практически не зависит от размеров кристаллитов и их взаимодействия со стенками матриц. Данное обстоятельство говорит в пользу того, что замораживание подвижности доменов обусловлено фазовым переходом в доменных стенках.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-90164.

[1] Б.А.Струков, А.А.Белов, С.Н.Горшков, Изв. АН СССР. Сер. физ. **3**, 470 (1991).

Кинетическое и термодинамическое зернограничное фасетирование

В.Г.Сурсаева
Институт физики твердого тела, РАН, Черноголовка, Московская область, 142432, Россия
E-mail: sursaeva@issp.ac.ru

Введение. Образование термодинамических фасеток на движущейся границе определяется зависимостью поверхностной энергией от ориентации, в то время как образование кинетических фасеток при росте зерна определяется анизотропией скорости роста кристаллов в разных направлениях. Термодинамическое зернограничное фасетирование хорошо исследовано. Однако ясно, что кинетические факторы способствуют зернограничному фасетированию так же, как и чисто энергетические факторы. Цель исследования - сравнить движение границы сопровождаемое термодинамическим или кинетическим фасетированием.

Методика. Работы выполнена на индивидуальных специально изготовленных бикристаллах с границами наклона $[11\bar{2}0]$ 35° в форме зернограничной полупетли. Они имели форму пластинки(10*2*100мм), состоящей из двух зерен различно ориентированных, разделенных границей, которая в плоскости бикристалла имеет форму латинской буквы U. Такая форма границы позволяет исследовать ее миграцию под действием постоянной движущей силы, определяющейся шириной внутреннего зерна, которая в данном случае была 300 мкм. (Рис. 1, Рис.2). Отметим, что в движущейся вершине полупетли ориентация плоскости залегания границы меняется на 180°, проходя через все возможные кристаллографические ориентации при данной кристаллогеометрии бикристалла. Двумерные бикристаллы с границей наклона были выращены из высокочистого Zn (99.999 wt.%) с помощью модифицированного Bridgman метода [1]. Наблюдалось и фиксировалось *in-situ* движение и форма границ зёрен в ходе высокотемпературного изотермического отжига в температурном интервале 350C ÷ 410C с использованием поляризованного света в оптическом микроскопе. Каждый изотермический отжиг продолжался 60÷300 сек; температура в высокотемпературной приставке к микроскопу стабилизировалась в течение нескольких секунд. Точность поддержания температуры ±0.5 C. Длительность изотермических отжигов составляла 120 ÷ 180 сек. Стабилизация температуры в высокотемпературной приставке происходила в течение нескольких секунд после изменения температуры. С помощью измерений на видеокадрах определялись смещения полупетли и длина фасетки.. Скорость движения полупетли определялась из зависимости смещения границы от времени, подвижность A определялась как скорость полупетли V, делённая на движущую силу, приведенная

подвижность полупетли определялась как $A_{ГЗ} = A\sigma_{ГЗ}$, где A подвижность, определённая из эксперимента, а $\sigma_{ГЗ}$- поверхностное натяжение границы зерна. Концы подвижного участка границы перемещаются вдоль прямолинейных участков границы. На движущейся части границы наблюдается фасетирование

Результаты. Были изготовлены два бикристалла с границей наклона $[11\bar{2}0]$ и углом разориентации 35° в форме полупетли. В первом бикристалле базисная плоскость во внутреннем зерне параллельна плоским участкам границы, во внешнем зерне базисная плоскость подходит к плоским участкам границы под углом 35°. Такая кристаллогеометрия даёт возможность изучать движение полупетли с одной термодинамически стабильной фасеткой. Во втором бикристалле базисная плоскость во внутреннем зерне расположена под углом в 35° к прямолинейной границе, во внешнем зерне базисная плоскость параллельна прямолинейным границам. Такая кристаллогеометрия способствует появлению кинетических фасеток при движении границы при температурах, когда уже невозможно появление термодинамически стабильных фасеток, т е выше температуры фазового перехода фасетирования - дефасетирования. Экспериментально определённые области существования фасеток в зависимости от температуры и угла, который составляет плоскость фасетки с базисной плоскостью внутреннего зерна, представлены на Рис.3. Разные фасетки появляются, живут и исчезают при различных температурах. Если в первом бикристалле существует единственная фасетка, длина которой уменьшается до нуля при 400С (температура фазового перехода фасетирования-дефасетирования), то во втором бикристалле первая фасетка появляется при 380С и существует в интервале 380-390С, вторая существует в интервале 395-400С, третья в интервале 404-410С, четвёртая появляется и исчезает при 410С. Область появления и существования двух фасеток вблизи температуры фазового перехода, а двух других выше температуры фазового перехода. Экспериментально определенные температурные зависимости длины фасеток представлены на Рис.4. Кинетические фасетки меняют свою длину в ходе изотермического отжига. Зависимость от времени смещения полупетли и длины фасетки, которая существует в интервале 380-390С, представлена на *Рис.5.* Видно, что величина смещения и длина фасетки изменяются с одной и той же скоростью при постоянной температуре. С ростом температуры скорость растёт.

Температурный интервал существования фасеток зависит от решётки совпадающих узлов, которая меняется из-за различных коэффициентов теплового расширения вдоль кристаллографических направлений, связанных со сторонами кристаллической решётки. И, как следствие, будут меняться направления залегания фасеток. Поскольку нами было показано, что энтальпия активации движения фасеток близка к нулю [2], то температурные изменения скорости движения зернограничной системы мы

связываем с температурными изменениями свойств зернограничных рёбер. На Рис. 6 представлена температурная зависимость подвижности границ. Можно сделать вывод, что из-за разности процесса фасетирования температурные зависимости подвижности резко отличается. Кинетическое фасетирование бикристалла приводит к значительному снижению подвижности границы.

Выводы.

1. Миграция границ в форме полупетли предполагает, что существуют плоские участки границ и часть границы в виде полуокружности или дуги окружности. Однако, реальная форма искривлённой части границы состоит из плоских и искривлённых сегментов. Типичный пример фасетированной

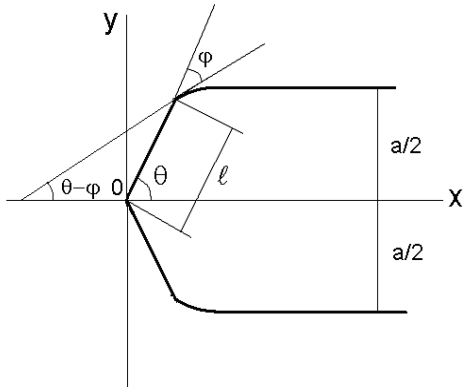


Рис.1. . *Схема бикристалла.*

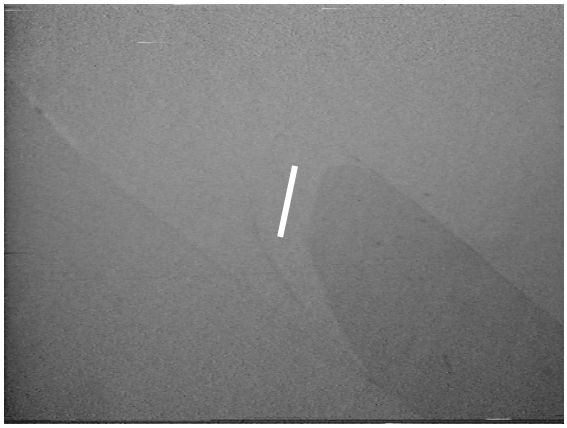


Рис.2. Фото границы наклона $[11\bar{2}0]$ *с термодинамической фасеткой. (белая линия)*

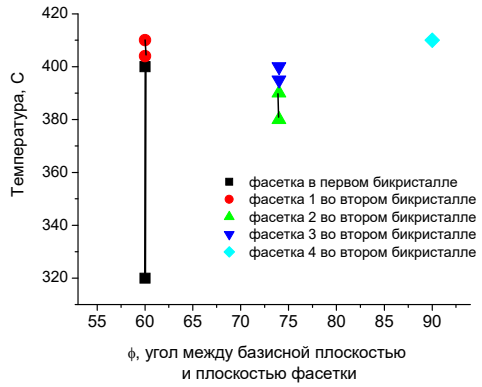


Рис.3. Экспериментально определённые температурные области существования фасеток в зависимости от угла относительно базисной плоскости внутреннего зерна [3]

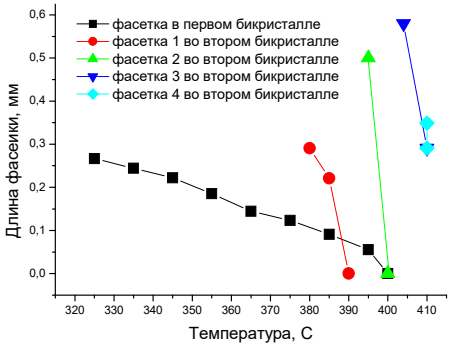


Рис.4. Экспериментально определённые температурные зависимости длины фасеток [3]

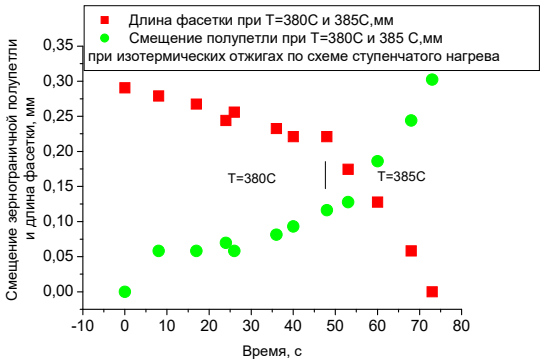


Рис.5. Зависмость смещения полупетли и длины фасетки, которая существует в интервале 360-390С, от времени.

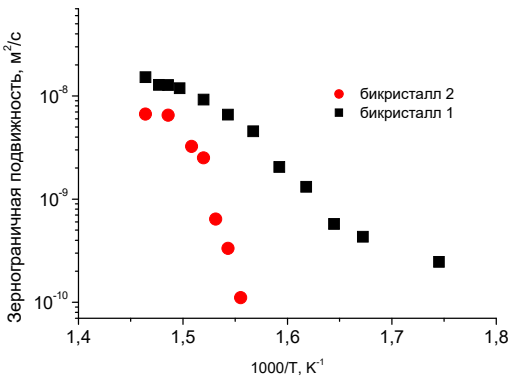


Рис.6 Температурная зависимость подвижности границ наклона $[11\bar{2}0]$ *при термодинамическом и кинетическом фасетировании [3]*

границы представлен на Рис.2. Мы наблюдали значительное многообразие форм нашей границы от искривлено гладкой до полностью фасетированной с множеством разных фасеток. Причем, одна и таже фасетка появлялась и исчезала в разных температурных интервалах, как видно из Рис.2.

2. Мы обнаружили, что как термодинамическое, так и кинетическое фасетирование обратимо: если следить за одной фасеткой, то ее длина укорачивается с ростом температуры, и при определённой температуре она исчезает, форма границы принимает вид полуокружности. При охлаждении от этой температуры фасетка появляется вновь при той же температуре, и её длина растёт.

3. С повышением температуры длина фасеток сокращается в температурном интервале. Для разных фасеток длина температурного интервала разная. Это означает, что скорость роста и исчезновения фасеток неодинаковая.

3. Энтальпия активации движения полупетли с термодинамической фасеткой ниже, чем с кинетическими. Это означает, что наличие кинетических фасеток сильнее тормозит движение границы, чем термодинамических.

[1] В.Г.Сурсаева, С.Г. Протасова, С.Л.Круц. Получение и изучение би и трикристаллов цинка.Труды III Международной конференции «Кристаллы: рост, свойства, реальная структура, применение.», стр143-154, 1997 г.

[2] G.Gottstein, L. S. Shvindlerman, V. G. Sursaeva. Migration of faceted high-angle grain boundaries in Zn. Int. J. Mat. Res. 99 (2008)5

[3] Сурсаева В.Г. Влияние зернограничных дефектов на рост зёрен. В кн. «Актуальные проблемы прочности», т. 1», 2020. 453 с. Стр. 3-18

Работа выполнена в рамках госзаказа и при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 19-03-00168).

Связь комплексного ангармонизма с акустикой в теории устойчивости термодинамического равновесия для изотропной среды

А.В.Христов, Д.А.Червинский, В.В.Шелест
Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина, г. Донецк, ДНР
e-mail: efbji@list.ru

Введение. Развитие нанотехнологий, поиски альтернативных источников энергии, развитие биофизики, физической химии и генетики вызвали интенсивное изучение многокомпонентных систем и высокомолекулярных биологических объектов (миоглобин, геном и т.д.). В связи с этим внимание снова обращено к относительно простым, но эффективным универсальным математическим методам описания свойств вещества, только уже на расширенном базисе и в более продвинутой интерпретации. Такая стратегия теоретического изучения сложных систем в физике конденсированного состояния и химической термодинамике помогает обнаружить общие принципы, скрывающиеся за разнообразием систем и свойств.

С нашей точки зрения в качестве необходимой предпосылки понимания и решения фундаментальных проблем необходимо с самых общих позиций рассматривать ангармонизм. Принципиальным положением, на которое опираются авторы при изучении ангармонизма в конденсированных средах, является то, что ангармонизм как явление имеет комплексный характер и неразрывно связан с устойчивостью равновесного состояния системы. При этом ангармонизм рассматривается именно в комплексном виде, то есть, наряду с гармонической частью гамильтониан осциллятора содержит как линейный член, так и нелинейные составляющие. Более того, линейная часть должна присутствовать обязательно, а нелинейные, по крайней мере, должны быть третьей и четвертой степеней.

Продвинутым методом описания фазовых переходов является теория устойчивости термодинамического равновесия фазового состояния. Формализм устойчивости термодинамического равновесия, описывая классические фазовые переходы I и II родов, предоставляет мощный аппарат описания фазовых переходов, называемых разными авторами «смешанным», «размытым типом», «переходом типа смещение».

Авторами развивается концепция, базирующаяся на понятиях теории устойчивости термодинамического равновесия, описываемых в терминах комплексного ангармонизма [1–3]. При этом величинами, определяющими такую основную величину теории, как детерминант устойчивости, являются параметры комплексного ангармонизма, а именно коэффициенты теплового расширения (изобарический и адиабатический) и параметр Грюнайзена [1–5].

Связь комплексного ангармонизма упруго деформированной среды с акустикой. Согласно теории упруго деформированного континуума [5–10], в среде могут распространяться продольные и поперечные звуковые волны. Скорости их распространения различны и выражаются через коэффициенты Ляме следующим образом:

$$\rho v_{\perp}^2 = \mu, \tag{1}$$

$$\rho v_{\parallel}^2 = \lambda+2\mu. \tag{2}$$

В соотношениях (1) и (2) ρ – плотность, $v_{\perp}$ и $v_{\parallel}$ – соответственно поперечная и продольная скорости звука в среде, λ и μ – коэффициенты Ляме. Из (1) и (2) следует очевидное равенство:

$$\lambda=\rho v_{\parallel}^2 - 2\rho v_{\perp}^2. \tag{3}$$

Упругие волны в сплошной среде распространяются без переноса тепла, то есть адиабатически. Известно, что в кристаллах кубической симметрии могут распространяться три типа волн разной поляризации: одна продольная и две поперечные. Связь звуковых скоростей с адиабатическим модулем упругого объемного сжатия K_S получаем в следующем виде:

$$\frac{K_S}{\rho} = v_{\parallel}^2 - \frac{4}{3} v_{\perp}^2. \tag{4}$$

В то же время средний квадрат скорости распространения звуковых волн в кристалле есть величина инвариантная. Следуя концепции [10,11] и учитывая размерности физических величин, средний квадрат скорости может быть определен через термодинамические коэффициенты следующим образом:

$$\rho \left\langle v^2 \right\rangle = \frac{3}{2} \cdot \frac{C_P}{\alpha_P} \cdot \frac{1}{V}. \tag{5}$$

Данная формула по [11] используется для экспериментального определения среднего квадрата скорости.

Используя соотношение Грюнайзена [1–3,5–9,12,13], можно получить следующее соотношение между параметром Грюнайзена γ_G и коэффициентом теплового расширения α_P, которые как раз и характеризуют комплексный ангармонизм системы:

$$\gamma_G = V\alpha_P \frac{K_S}{C_P}, \tag{6}$$

где C_P – теплоемкость при постоянном давлении.

Авторами получена связь параметров комплексного ангармонизма с акустическими величинами в виде:

$$\gamma_G = \frac{9}{2} \cdot \frac{v_{\parallel}^2 - (4/3)v_{\perp}^2}{v_{\parallel}^2 + 2v_{\perp}^2}, \tag{7}$$

$$\alpha_P = \frac{9}{2} \cdot \frac{C_P}{v_{\parallel}^2 + 2v_{\perp}^2} \cdot \frac{1}{\rho V}. \tag{8}$$

В дальнейшем положим $\rho V = const$. Если учесть, что [1–3,6] теплоемкость при постоянном давлении сама связана с комплексным ангармонизмом согласно формуле

$$C_P = C_V(1+\gamma_G\alpha_P T), \tag{9}$$

то из (5),(8),(9) следует соотношение

$$\alpha_P = \frac{3}{2}\cdot\frac{C_V}{\langle v^2\rangle\rho V}(1+\gamma_G\alpha_P T). \tag{10}$$

Разрешая последнее равенство относительно параметра α_P и используя (8), получаем для коэффициента теплового расширения следующую формулу:

$$\alpha_P = \frac{3}{2}\cdot\frac{C_V}{\langle v^2\rangle\rho V}\left[1-\frac{27}{4}\frac{C_V T}{\rho V\langle v^2\rangle^2}\left(v_\parallel^2-\frac{4}{3}v_\perp^2\right)\right]^{-1}. \tag{11}$$

Связь детерминанта устойчивости с акустикой. Базовое положение теории устойчивости термодинамического равновесия гласит, что необходимым условием устойчивости фазы является положительность детерминанта устойчивости $\mathrm{D_{st}} = \dfrac{\partial(T,-P)}{\partial(S,V)}$ [12,13]. Детерминант устойчивости, выраженный через параметры комплексного ангармонизма, определяется как величина [1–3]:

$$\mathrm{D_{st}} = \frac{T}{V^2}\cdot\frac{\gamma_G}{\alpha_P}. \tag{12}$$

Последнее равенство, согласно соотношению Грюнайзена, перепишем в виде

$$\mathrm{D_{st}} = \frac{T}{V}\cdot\frac{K_S}{C_P} = \frac{T\cdot\rho V}{V^2}\cdot\frac{K_S/\rho}{C_P}. \tag{13}$$

Опираясь на соотношение (4), можно привести детерминант устойчивости к следующему виду:

$$\mathrm{D_{st}} = \frac{T\cdot\rho V}{V^2}\cdot\frac{v_\parallel^2-(4/3)v_\perp^2}{C_P}. \tag{14}$$

Дальнейшая трансформация формулы (14) связана с учетом ангармонизма с помощью формулы $V = V_0(1+\alpha_P T)$ для объема и подобной ей формулы для C_P (9) при условии постоянства удельной массы вещества ρV. В результате простой подстановки получаем

$$\mathrm{D_{st}} = \frac{T\cdot\rho V}{V_0^2 C_V(1+\alpha_P T)^2}\cdot\frac{v_\parallel^2-(4/3)v_\perp^2}{1+\gamma_G\alpha_P T}. \tag{15}$$

Если использовать соотношения (7) и (11), выражение (15), определяющее детерминант устойчивости, примет окончательный вид:

$$\mathrm{D}_{\mathrm{st}}=\frac{T\cdot\rho V}{V_0^2C_V\left\{1+\frac{3}{2}\cdot\frac{TC_V}{\left\langle v^2\right\rangle\rho V}\left[1-\frac{27}{4}\frac{C_VT}{\rho V\left\langle v^2\right\rangle^2}\left(v_{\parallel}^2-\frac{4}{3}v_{\perp}^2\right)\right]^{-1}\right\}}\times$$

$$\times\frac{v_{\parallel}^2-(4/3)v_{\perp}^2}{1+\frac{3}{2}T\cdot\frac{v_{\parallel}^2-(4/3)v_{\perp}^2}{\left\langle v^2\right\rangle}\left\{1+\frac{3}{2}\cdot\frac{TC_V}{\left\langle v^2\right\rangle\rho V}\left[1-\frac{27}{4}\frac{C_VT}{\rho V\left\langle v^2\right\rangle^2}\left(v_{\parallel}^2-\frac{4}{3}v_{\perp}^2\right)\right]^{-1}\right\}}\quad . \qquad (16)$$

С другой стороны, если учесть, что $\mathrm{D}_{\mathrm{st}}=(T/V)(K_S/C_P)=(T/V)(K_T/C_V)$ [1–3], то можно получить термический модуль упругости:

$$K_T=\frac{V}{T}\mathrm{D}_{\mathrm{st}}C_V\,, \qquad (17)$$

который, в принципе, можно выразить, опираясь на использованные выше равенства, в форме, подобной (16).

Выводы. В работе впервые определены связи между детерминантом устойчивости, параметрами комплексного ангармонизма и скоростями упругих волн в сплошной среде, а также в кристаллах.

[1] В.В.Шелест, А.В.Христов, ФТВД **29**, 73 (2019).
[2] В.В.Шелест, А.В.Христов, Д.А.Червинский, ФТВД **30**, 18 (2020).
[3] В.В.Шелест, А.В.Христов, Д.А.Червинский, ФТВД **31**, 5 (2021).
[4] Г.Стенл, Фазовые переходы и критические явления, Мир, Москва (1973).
[5] В.С.Постников, Физика и химия твердого состояния, Металлургия, Москва (1978).
[6] Л.Жирифалько, Статистическая физика твердого тела, Мир, Москва (1975).
[7] А.Анималу, Квантовая теория кристаллических твердых тел, Мир, Москва (1981).
[8] А.А.Кацнельсон, Введение в физику твердого тела, Изд-во Моск. ун-та, Москва (1984).
[9] Ч.Киттель, Введение в физику твердого тела, Наука, Москва (1978).
[10] В.Б.Баскакова, А.В.Головин, М.М.Мартынюк, В.К.Семенченко, Акустический журнал **11**, 30 (1965).
[11] В.Н.Беломестных, Письма в ЖЭТФ **30**, 14 (2004).
[12] И.П.Базаров, Термодинамика, Высшая школа, Москва (1991).
[13] В.К. Семенченко, Избранные главы теоретической физики, Просвещение, Москва (1966).

Структурообразование нативных карбонатов кальция в ходе биоминерализации

Н.А. Захаров[1], Е.В. Шелехов[2], А.Д. Алиев[3], М.Р. Киселев[3], Т.В. Захарова[4], В.В. Матвеев[3], Е.М. Коваль[1], М.А. Орлов[1]

[1] *Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова, РФ, г. Москва*
e-mail: zakharov@igic.ras.ru
[2] *НИТУ «МИСиС», РФ, г. Москва*
[3] *Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина, РФ, г. Москва*
[4] *Российский университет транспорта «МИИТ», г. Москва*

Внимание к изучению кристаллизации и структурообразования карбоната кальция $CaCO_3$ (КК) вызвано широко распространенными природными процессами кальцификации и биоминерализации: от бактерий до млекопитающих [1]. Биоминералы типа органика - неоргиника, являющеиеся биокомпозитами различного типа, включают большую группу биологических объктов [2]. Среди биогенных минералов КК занимает особое место, поскольку он входит в состав костей и панцирей животных. При этом неорганический материал (КК) оказывается связанным с биополимерами [3].

Яичная скорлупа является типичной природной композиционной органоминеральной керамикой, содержащей около 5% органики и 95% компоненов кальцита [4]. Биоминерализация яичной скорлупы происходит под влиянием макромолекул, являющихся полианионными поликислотами, имеющими высокое сродство к кальцию [4]. Панцири морских организмов состоят из КК, обычно в полиморфных модификациях кальцита либо арагонита. Морфологические и структурные свойства КК в ходе биоминерализации контролируются органическими добавками. Так, протеины, выделенные из панцирей морских моллюсков, показали способность оказывать влияние на кристаллическую структуру и морфологию кристаллов КК в ходе биоминерализации даже в пределах различных слоев панциря (внутренние, внешние) [5]. Например, протеины, экстрагированные из слоев перламутра, индуцировали образование КК с морфологией арагонита, тогда как образование призматического слоя контролировалась иными протеинами.

Изучение и моделирование процессов биоминерализации является актуальным направлением материаловедения, связанным с созданием методов синтеза материалов (в частности, КК) с регулируемыми характристиками для различных областей применения.

Как видно (табл. 1), образующиеся в ходе биоминерализации КК нативных объектов, могут отличаться от синтетических по типу структуры и размерам составляющим его кристаллов. При этом параметры элементарной ячейки сходны для обоих типов объектов.

Кристаллы кальцита (тригональная сингония) синтетического КК имеют более правильную, по сравнению с природным кальцитом скорлупы яйца и раковины моллюска (табл. 2), форму. Кристаллам арагонита коралла и покрова морской звезды, даже в наномасштабе, характерна вытянутая игольчатая форма.

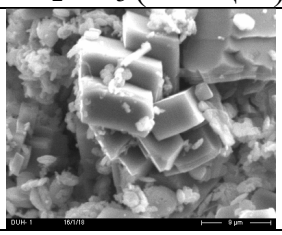
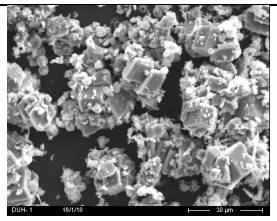
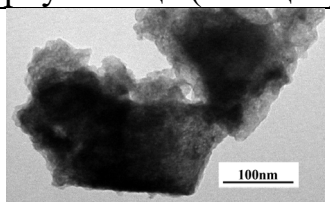
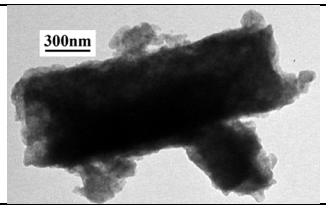
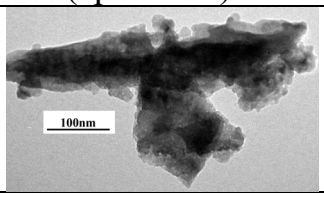
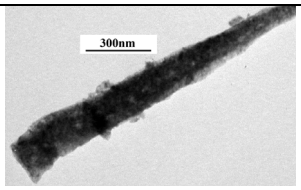
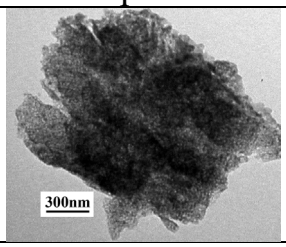
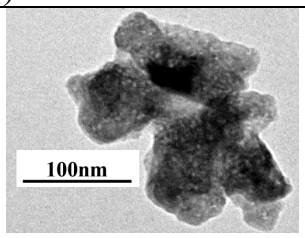
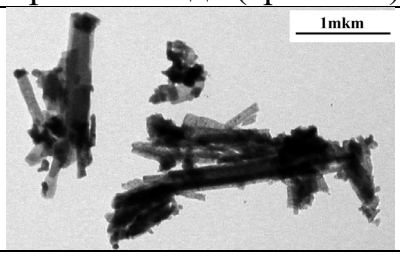
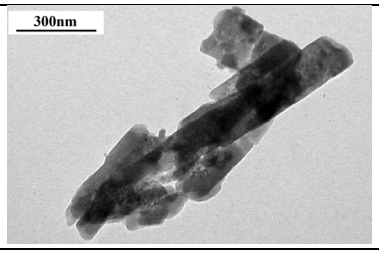
Таблица 1. Сравнительные характеристики синтетических и природных КК.

№ п/п	Тип образца	Состав образца	Кристаллографические характеритики Параметры элементарной ячейки, Å *a*	*b*	*c*	Диаметр блока Коши, нм
1	В нативных увловиях (37°С), сливание растворов $CaCl_2$ и Na_2CO_3.	$CaCO_3$, кальцит 100 %	4.988(1)	-	17.059(1)	283.2
2	Скорлупа яйца 	$CaCO_3$, кальцит 100 %	4.988(5)	-	17.033(6)	115
3	Коралл 	$CaCO_3$, арагонит, 100 %	5.747(8)	4.961(3)	7.966(7)	66
4	Раковина морского моллюска 	$CaCO_3$, кальцит 100 %	4.953(5)	-	16.907(5)	92.6
5	Морская звезда 	$CaCO_3$, арагонит, 100 %	5.747(5)	4.964(1)	7.966(9)	43.9

Кристаллы кальцита (тригональная сингония) синтетического КК имеют более правильную, по сравнению с природным кальцитом скорлупы яйца и раковины моллюска (табл. 2), форму. Кристаллам арагонита коралла и покрова морской звезды, даже в наномасштабе, характерна вытянутая игольчатая форма.

Механические характеристики кальцийфосфатной керамики, к сожалению, не способны обеспечить ее использование в качестве остеозамещающего материала в зонах, работающих под нагрузкой. Растущее в последние десятилетия внимание исследователей в аспекте остеозамещения все чаще привлекают материалы природного происхождения, в частности, скелет натуральных кораллов.

Таблица 2. Картины электронной микроскопии (СЭМ - 1 и ПЭМ - 2, 3, 4, 5) синтетического (1) и природного (2, 3, 4, 5) КК.

1. КК получен в нативных увловиях (37^0C), сливанием растворов $CaCl_2$ и Na_2CO_3 (кальцит).	
	
2. Скорлупа яйца (кальцит).	
	
3. Коралл (арагонит).	
	
4. Раковина морского моллюска (кальцит).	
	
5. Морская звезда (арагонит).	
	

Уникальные свойства этого материала во многом определяются химическим составом, а также и рельефом поверхности: высокой степенью пористости (до 50%), большим размером пор, их взаимосвязанностью и структурной регулярностью. При этом существенно, что скорость биорезорбции коралла практически совпадает со скоростью неоостеогенеза. Отметим, что в литературе описан положительный клинический опыт использования кораллов различных семейств в качестве остеозамещающего

материала при различных патологических состояниях опрно-двигательного аппарата и лицевого скелета.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИОНХ РАН в области фундаментальных научных исследований.

[1] Mann S. Biomineralization principles and concepts in bioinorganic materials chemistry: Oxford University Press; 2001. 401 p.
[2] Dujardin E., Mann S. Advanced Materials. **14**. P. 1 (2002).
[3] Hunter K.G. Current Opinion Solid State & Materials Sci. **1**. P. 430 (1996).
[4] Aras J.L., Fernandes S.M. Materials Characterization. **50**. P. 189 (2003).
[5] Feng L.Q., Pu G., Pei Y. et al. J.Crystal Growth. **216**. P. 459 (2000).

Электропроводность материалов системы Cu-Ge-As-Se

О.П.Щетников, А.Н.Бабушкин
Уральский Федеральный университет, Екатеринбург, Россия
e-mail: o.shchetnikov@yandex.ru

Исследование электрофизических свойств полупроводников и полупроводниковых структур с учетом их микроструктуры является важной и актуальной задачей как фундаментальной, так и прикладной науки.

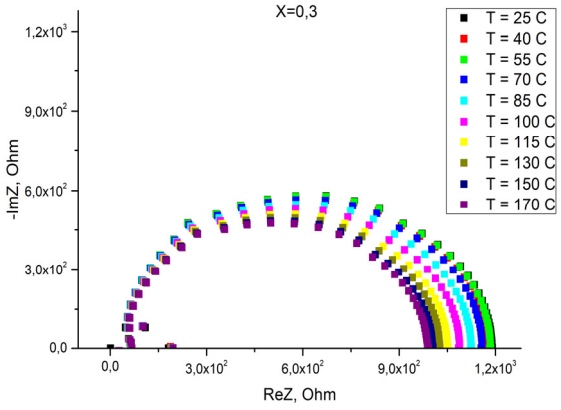
Для материалов системы Cu-Ge-As-Se сообщалось об изучении влияния высоких давлений [1], а также повышенных температур на величину удельной электропроводности (на постоянном токе) [2].

В рамках данной работы с помощью метода импедансной спектроскопии (в частотном диапазоне 1 Гц ÷ 32 МГц) исследована электропроводность полупроводниковых материалов с общей формулой $(GeSe)_x(CuAsSe_2)_x$ (для x = 0.1÷0.9) в условиях повышенных температур 25÷170 °C.

Обнаружено, что для материалов x=0.1÷0.3 годограф импеданса в координатах Найквиста имеет вид полуокружности с мнимой частью (-ImZ) в положительной области значений (рисунок 1а), что соответствует эквивалентной схеме резистор-элемент с постоянным сдвигом фазы (CPE). При этом, фаза напряжения отстает от фазы тока.

Однако, при изменении концентрации x=0.3÷0.4 мнимая часть импеданса (-ImZ) переходит в отрицательную область значений, что свидетельствует о появлении реактивного сопротивления индуктивного элемента (рисунок 1б). При этом, фаза напряжения начинает опережать фазу тока. Начиная с концентрации x=0.4, для данной серии материалов, становится возможным образование тетрагональной кристаллической решетки, в то время как x=0, 0.2 и 0.3 кристаллизуются в орторомбической и кубической сингониях [3]. Ранее было обнаружено, что термоэдс материалов $(GeSe)_x(CuAsSe_2)_x$

а



б

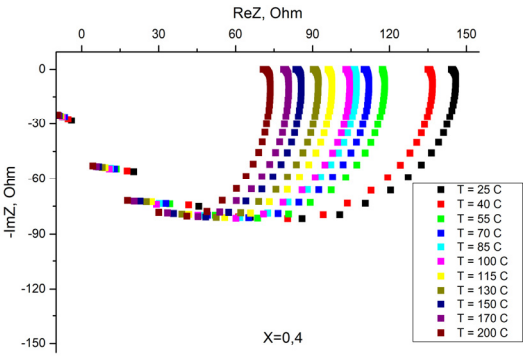


Рис.1 Годограф импеданса для исследуемых образцов: а) для концентрации x=0.3; б) x=0.4

имеющих тетрагональную кристаллическую решетку как минимум на один порядок выше, чем для других фаз [4].

[1] Н.В. Мельникова, А.Н. Бабушкин, О.В. Савина, ФТВД **19**, 63 (2009).
[2] О.П. Щетников, Н.В. Мельникова, А.А. Мирзорахимов, Физ. обр. в ВУЗах **24**, 122 (2018).
[3] Н.В. Мельникова, Л.Я. Кобелев, В.Б. Злоказов, ПЖТФ **21**, 9 (1995).
[4] О.П. Щетников, Н.В. Мельникова, А.Н. Бабушкин, В.М. Кисеев, ЖТФ **91**, 46 (2021).

Модель фазовой диаграммы сверхпроводящих ферропниктидов

А.Е.Каракозов [1], М.В.Магницкая [1,2]
[1] *Институт физики высоких давлений им. П.Н. Верещагина РАН, Москва, Россия*
e-mail: chkara@rambler.ru
[2] *Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия*
e-mail: magnma@yandex.ru

Многозонные железосодержащие сверхпроводники (далее ферропниктиды, ФП) характеризуются универсальной фазовой диаграммой (ФД) [1]. Область оптимального (с максимальной T_c) допирования $x = x_{opt}$ примерно совпадает с областью антиферромагнитного (АФМ) перехода и наиболее сильных межзонных АФМ флуктуаций на векторах $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$, $(0, \pi)$, взаимодействие с которыми в нефононной спин-флуктуационной (СФ) теории сверхпроводимости считается доминирующим [2]. Плотность доступных для сверхпроводящего (СП) спаривания состояний $\gamma_n(x)$ и связанное с ней внутризонное (фононное) спаривание также достигает максимума при x_{opt} [1], поэтому роль фононного и нефононного механизмов в увеличении T_c остается неясной. Анализ механизмов сверхпроводимости в ФП затрудняется разбросом данных из-за того, что в ФП щели от трех до пяти взаимодействующих СП конденсатов заполняют небольшой интервал энергий, сопоставимый с погрешностью большинства экспериментальных методик. К надежно установленным фактам, которые необходимо учитывать в модели структуры СП состояния ФП, можно отнести следующие: сильное отклонение зависимости доминирующей СП щели $\Delta_L(x_{opt}, t)$ от универсальной зависимости в модели БКШ в оптимально допированных ФП (см. обзор [3]), которое не может быть объяснено эффектами сильной связи, а также наблюдаемое в допированных электронами ФП монотонное уменьшение полной плотности состояний $\gamma_n(x)$ при увеличении заполнения электронной зоны, указывающее на малость плотности состояний в электронной зоне, и характерную трансформацию зависимости нормированной электронной теплоемкости $c_s(x, t)$ — увеличение при промежуточных температурах и соответствующее сохранению энтропии уменьшение $c_s(x, t)$ вблизи T_c по мере удаления от АФМ перехода [1]. Симметрия спаривающего электрон-бозонного взаимодействии (ЭББВ) $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ определяется структурой поверхности ферми (ПФ). На рис. 1 схематически показана ПФ трехзонного ФП, состоящая из дырочных (h) карманов (с центром в точке Г) и электронных (e) карманов с центрами в точках X = $(\pi, 0)$ и Y = $(0, \pi)$. В этой системе электронное допирование увеличивает e-карманы и уменьшает h-карманы, а дырочное наоборот. В ФП из-за малой плотности носителей размеры e и h карманов

малы по сравнению с характерными размерами зоны Бриллюэна, поэтому внутризонное ЭБВ $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = uw(\varphi)w(\varphi')$ при малых k и k' в e и h зонах имеет *одинаковую* амплитуду и отличается только разной зависимостью от углов. Для ПФ на рис. 1 внутризонное ЭБВ с s-волновой A_{1g} симметрией в h-зонах не зависит от углов $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \approx u$, а в e-зоне для X и Y карманов имеет вид $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \approx u(1 \pm d\cos 2\varphi_{X/Y})(1 \pm d\cos 2\varphi'_{X/Y})$, где φ и φ' — полярные углы, отсчитываемые от $k_{x/y}$, а d — коэффициент анизотропии. Межзонное e–h взаимодействие $V(\mathbf{k}_e - \mathbf{k}_h' \approx \mathbf{Q})$ при $k, k' \ll Q$ слабо зависит от углов и может считаться постоянным: $V(\mathbf{Q}) \approx g$ [2]. В ФП это взаимодействие связано с сильно зависящей от допинга интенсивностью спиновых флуктуаций на АФМ векторах и, согласно СФ теории, определят масштаб корреляционных эффектов. Из-за большого количества параметров теории для анализа экспериментальных данных обычно используют упрощенные модели. Наиболее простая (так называемая «минимальная») модель на базе уравнений Москаленко с независимыми константами связи λ_{ij} [4] учитывает только две взаимодействующие зоны (e и h). В этой модели, например, удается описать полученные из туннельных характеристик аномальные температурные зависимости $\Delta_L(x_{opt}, t) \gg \Delta_S(x_{opt}, t)$ *слабым* межзонным взаимодействием $\lambda_{SL}, \lambda_{LS} \ll \lambda_{LL}, \lambda_{SS}$ при условии, что плотность состояний в e-зоне много больше, чем в h-зоне ($\gamma_S \gg \gamma_L$) и $\lambda_{LL} \sim \lambda_{SS}$ [5].

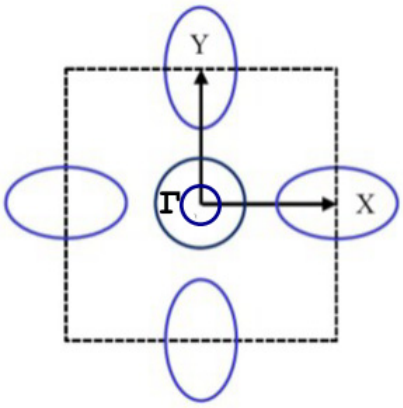


Рис.1 Схема ферми-поверхности ферропниктидов.

Как нами было показано выше, такое соотношение параметров, как и вывод о малости СФ взаимодействия в оптимальном режиме для ФП мало реальны, поэтому, по нашему мнению, формальное применение минимальной модели для определения параметров СП спаривания в ФП не слишком надежно. Для этой цели более пригодна модель двух h-зон, взаимодействующих с e-зоной посредством СФ взаимодействия с перенормированными константами ЭБВ $\lambda_{ij} = \lambda^0_{ij}/R_{ij}$ где $R_{ij} = 1 + \Sigma_j \lambda^0_{ij}$, $\lambda^0_{ij} = V_{ij}\gamma_j$ и анизотропным ЭБВ $u(1 \pm d\cos 2\varphi_{X/Y})(1 \pm d\cos 2\varphi'_{X/Y})$. Система уравнений для этой модели нами получена и исследована. В частности, показано, что анизотропия e-щели $d_R(t)$ из-за перенормировки СФ взаимодействием отличается от анизотропии ЭБВ взаимодействия d (уменьшается и зависит от температуры). Допинговая зависимость $\Delta_j(x)$ и $T_c(x)$ в ФП связана с изменением внутризонного $\lambda^0_{II} \approx V(q \ll Q)\gamma_i(x)$ и межзонного спаривания $\lambda^0_{I \neq J} \approx V(Q,x)\gamma_j(x)$. В ФП это электрон-фононное $V(q \ll Q) \approx u$ и СФ $V(Q, x) \approx g(x)$ взаимодействия, одинаковые для всех зон. Для исследования основных особенностей ФД достаточно рассмотреть зависимость структуры СП состояния от величины $x = g/u$ — отношения

межзонного взаимодействия g к внутризонному u, рассматриваемому как аналог допинговой зависимости в ФП, и различных заполнений зон и анизотропии спаривания. В этом случае в системе возможно ограничиться минимальным набором параметров (далее индексы 1 и 3 обозначают h-зоны с большей и меньшей плотностями состояний ($\gamma_1 > \gamma_3$), а индекс 2 относится к параметрам e-зоны.): λ^0_{11}, γ_2/γ_1, γ_3/γ_1, d, позволяющим вычислять нормированные физические величины, например, $c_s(x, t)$. Качественные особенности допинговой эволюции структуры СП состояния показаны на рис. 2–5. Рис. 2 показывает, что увеличение СФ взаимодействия увеличивает СП щели и приводит к сближению щелей $\Delta_1(0)$ и $\Delta_2(0)$, влияя главным образом на e-щель. Анизотропия e-щели d_R при увеличении СФ взаимодействия уменьшается (рис. 3). Оба эти обстоятельства — сближение щелей Δ_1 и Δ_2 и уменьшение анизотропии — приводят к упомянутой выше характерной трансформации вида $c_s(x, t)$ при изменении допирования как это показано в нашей работе [6]. Рис. 4 показывает температурную зависимость СП щелей (кривые *1, 2, 3*) при $\gamma_1 = 0.5$, $\gamma_2 = 0.2$, $\gamma_3 = 0.3$ и достаточно сильном межзонном взаимодействии ($x \approx 0.9$, $\Delta_1(0) = \Delta_2(0)$, см. также рис. 2) и максимальную и минимальную e-щели $\Delta_{2\pm}(t) = \Delta_2(t)(1 \pm d_R(t))$ (кривые *4, 5*). Отметим, что в трехзонном сверхпроводнике при конечных температурах зависимости обеих «больших» щелей $\Delta_1(t)$ и $\Delta_2(t)$ расположены ниже кривой $\Delta_{БКШ}(t)$, причем, как и можно было ожидать, из-за анизотропии e-щели $d_R(t) \approx 20\%$ (рис. 5) при конечных температурах $\Delta_2(t > 0) < \Delta_1(t > 0)$. В этой работе мы не ставили своей целью количественный анализ экспериментальных данных, так как для этого необходим несколько другой подход [7]. Тем не менее, сравнивая рис. 4 с данными анализа туннельных спектров ФП (см. рис. 7 в [3]), можно убедиться, что найденные из эксперимента «аномальные» температурные зависимости СП щелей (с сильным межзонным взаимодействием в зоне с доминирующей щелью и слабым в зоне с малой щелью) могут быть получены в трехзонной модели с *реалистичным* малым заполнением e-зоны, *сильным* межзонным СФ взаимодействием, анизотропным спариванием в e-зоне и внутризонными

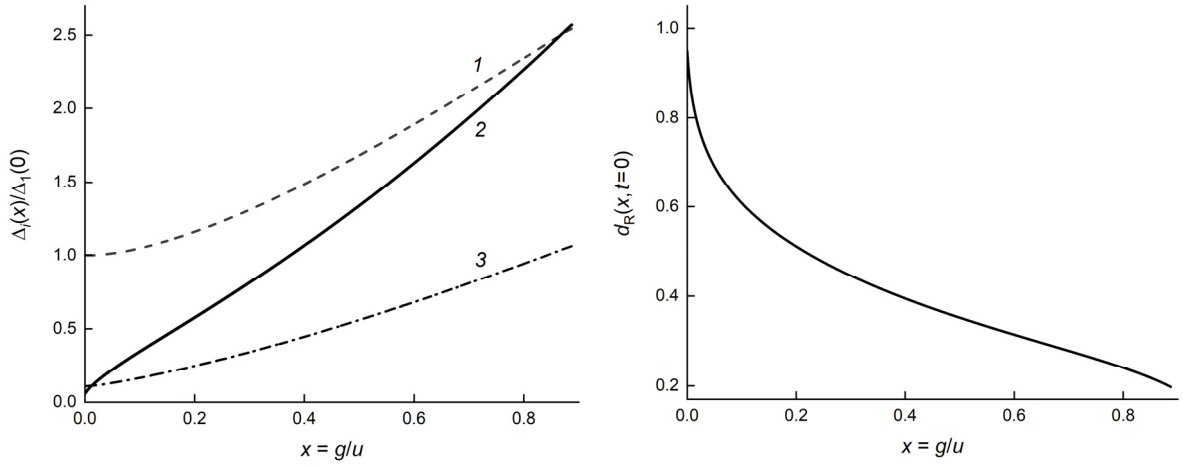


Рис.2 Зависимость нормированных сверхпроводящих щелей $\Delta_i(x)/\Delta_1(0)$ от $x = g/u$ при нулевой температуре.

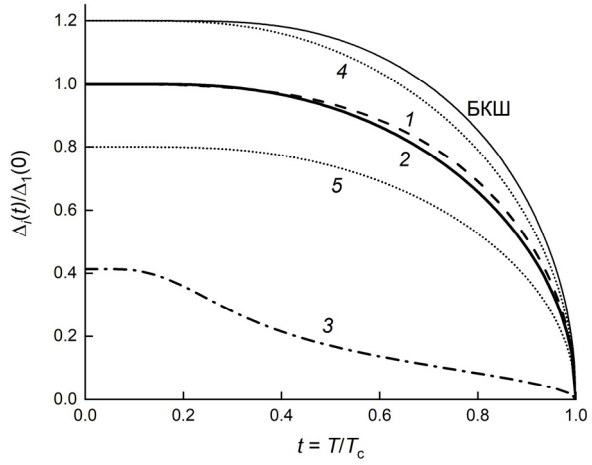


Рис.3 Зависимость коэффициента анизотропии электронной щели $d_R(x)$ от $x = g/u$ при нулевой температуре.

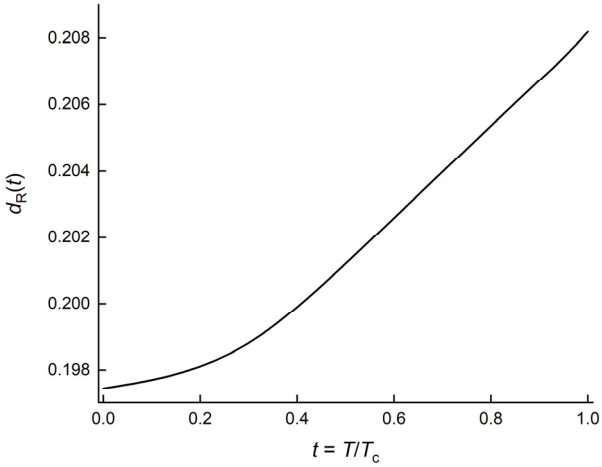


Рис.4 Зависимость сверхпроводящих щелей $\Delta_i(t)/\Delta_1(0)$ — кривые 1, 2, 3 — и $\Delta_{2\pm}(t) = \Delta_2(t)(1 \pm d_R(t))$ — кривые 4 и 5, соответственно.

Рис.5 Изменение коэффициента анизотропии электронной щели $d_R(x, t)$ в зависимости от температуры для $x \approx 0.9$.

взаимодействиями $V(q \ll Q) \approx u$, *одинаковыми* для всех зон. Приведенные примеры показывают, что предложенная нами трехзонная модель с минимальным набором реалистичных параметров описывает допинговую эволюцию свойств ФП и с учетом поправок сильной связи [7] может быть применена для количественной оценки корреляционных эффектов и анализа механизма сверхпроводимости в ферропниктидах.

Авторы благодарны А.А. Михайловскому за ценные консультации. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 19-02-00509-а). М.В.М. благодарна за поддержку численной обработки результатов Российскому научному фонду (грант РНФ 18-12-00438).

[1] F.Hardy, P.Burger, T.Wolf et al., EPL **91**, 47008 (2010).
[2] A.Chubukov, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **3**, 57 (2012).
[3] Т.Е.Кузьмичёва и др., УФН **187**, 450 (2017).
[4] В.А.Москаленко, ФММ **8**, 503(1959).
[5] Т.Е.Кузьмичёва, С.А.Кузьмичёв, М.Г.Михеев и др., УФН **184**, 888 (2014).
[6] A.E.Karakozov, M.V.Magnitskaya, L.S.Kadyrov et al., Phys. Rev. B **99**, 054504 (2019).
[7] A.E.Karakozov, S.Zapf, B.Gorshunov et al., Phys. Rev. B **90**, 014506 (2014).

Фазовые переходы в витлокитоподобных твердых растворах $Sr_{9-x}Ca_xIn(ЭO_4)_7$ ($0 \leq x \leq 9$, Э = V, P)

О.В. Барышникова, Э. М. Галлямов, В.А. Мосунов, Б.И. Лазоряк
Московскаий Государственный Университет, химический факультет, Москва, Россия
e-mail: sheoksana@yandex.ru

Одно из динамично развивающихся направлений современной химии - формирование материалов сочетающих в себе сразу несколько полезных свойств. Поставленная задача требует систематического и фундаментального подхода.

В рамках настоящей работы проводили систематическое исследование механизмов формирования сегнетоэлектрических и антисегнетоэлектрических свойств у новых представителей структурного типа витлокита - $Sr_{9-x}Ca_xIn(ЭO_4)_7$ ($0 \leq x \leq 9$, Э = V, P).

Особенности кристаллического строения представителей структурного типа витлокит позволяют проводить катионные и анионные замещения. Кроме того, в рамках одного состава данного структурного типа возможно проявление сразу нескольких полезных для практического применения физико-химические свойств (нелинейно-оптические и диэлектрические свойства, сегнетоэлектрические и люминесцентные свойства).

В рамках работы методом многоступенчатого высокотемпературного твердофазного синтеза получены твердые растворы составов $Sr_{9-x}Ca_xIn(ЭO_4)_7$ ($0 \leq x \leq 9$, Э = V, P). Однофазность образцов проверена методом рентгенофазового анализа. Обнаружено, что все образцы кристаллизуются в структурном типе витлокит. Расчитаны параметры элементарных ячеек полученных образцов. Показано, что с увеличением содержания катиона кальция в твердых растворах параметры элементарной ячейки закономерно уменьшаются (ионный радиус стронция (r_{VII} = 1.26 Å), ионный радиус кальция (r_{VII} = 1.12 Å)) для обоих серий образцов. Плавный характер изменения параметров элементарных ячеек очевидно связан с постепенным статистическим замещением катионов стронция на кальций в позициях структуры в рядах твердых растворов $Sr_9In(VO_4)_7$ [1] - $Ca_9In(VO_4)_7$ [2], $Sr_9In(PO_4)_7$ [3, 4] - $Ca_9In(PO_4)_7$ [5].

Все образцы изучены методами генерации второй оптической гармоники лазерного излучения (ГВГ) и диэлектрической спектроскопии. Величина сигнела ГВГ при комнатной температуре для всех образцов отлична от нуля. Наличие ненулевого сигнала позволяет сделать вывод о том, что полученные образцы нецентросимметричные. С увеличением содержания кальция в образце значение сигнала ГВГ увеличивается. Однако наблюдается принципиальное отличие диапазонов измеренных значений: $Sr_{9-x}Ca_xIn(VO_4)_7$ (16 – 26 единиц кварцевого эталона), Sr_{9-}

$_x$Ca$_x$In(PO$_4$)$_7$ (0.2 – 0.6 единиц кварцевого эталона), что связано большей поляризацией в тетраэдрах V1O$_4$ по сравнению с тетраэдрами P1O$_4$, аналогично [1].

При изучении твердых растворов $Sr_{9-x}Ca_xIn(VO_4)_7$ ($0 \leq x \leq 9$) методом диэлектрической спектроскопии обнаружено совпадение положения характерных аномалий по температурной оси на кривых диэлектрической проницаемости (ε) и тангенса угла диэлектрических потерь (tg δ). Таким образом во всем диапазоне варьирования x обнаружены сегнетоэлектрические фазовые переходы. Температуры фазового перехода (температура Кюри) снижаются с увеличением содержания кальция в образце и в пределах ошибки метода и совпадают с уже известными значениями для крайних составов [1-2].

При изучении образцов $Sr_{9-x}Ca_xIn(PO_4)_7$ ($0 \leq x \leq 9$) методом диэлектрической спектроскопии обнаружено, что только при полном замещении стронция на кальций кривые диэлектрической проницаемости (ε) и тангенса угла диэлектрических потерь (tg δ) имеют характерные для сегнетоэлектрического фазового перехода аномалии. В других составах наблюдается антисегнетоэлектрический фазовый переход, как и в $Sr_9In(PO_4)_7$ [3] Таким образом во всем диапазоне варьирования x (кроме $x = 0$) обнаружены антисегнетоэлектрические фазовые переходы. Температуры фазового перехода (температура Кюри) снижаются с увеличением содержания кальция в твердых растворах и находятся между значениями для крайних составов, которые были ранее определены [4-5].

Обнаруженное изменение типа фазового перехода с сегнетоэлектрик-параэлектрик на антисегнетоэлектрик-параэлектрик связано с кристалохимическими особенностями строения изученных твердых растворов. Все полученные в работе данные для крайних составов хорошо согласуются с известными литературными данными [1-5].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 20-03-00929).

[1] Alexei A. Belik, Dina V. Deyneko, Oksana V. Baryshnikova, Sergey Yu. Stefanovich, Bogdan I. Lazoryak, RSC Adv., **10**, 10867 (2020)
[2] Lazoryak B.I., Belik A.A., Stefanovich S.Y., Morozov V.A., Malakho A.P., Baryshnikova O.V., Leonidov I.A., Leonidova O.N., Doklady Physical Chemistry, **384**, № 4, 144 (2002).
[3] Yu. Stefanovich, A. A. Belik, M. Azuma, M. Takano, O. V. Baryshnikova, V. A. Morozov, B. I. Lazoryak, O. I. Lebedev, G. Van Tendeloo, Physical Review B **70**, 172103 (2004)
[4] A. Belik, F. Izumi, T. Ikeda, M. Okui, A. P. Malakho, V. A. Morozov, B. I. Lazoryak, J. Solid State Chemistry **168**, 237 (2002)
[5] V. A. Morozov, A. A. Belik, S. Yu. Stefanovich, V. V. Grebenev, O. I. Lebedev, G. Van Tendeloo, B. I. Lazoryak, J. Solid State Chemistry **165**, 278 (2002)

Electron plasma parameters of complex silver iodide crystals

Nadezhda P. Netesova
M.V. Lomonosov Moscow State University, Physics Faculty,
Moscow 119991, Russia
e-mail: npn@mig.phys.msu.ru

The study of superionic conductors is necessary for the development of a microscopic theory of phase transitions and the development of functional devices with optimal parameters.
Within oscillation electron model the superconducting crystal AB is considered consisting of two subsystems for phase separation. Free electrons couple to lower system energy. When molecules are formed from identical atoms, energy is released. The energy balance is carried out by the plasma mechanism. It is necessary, that square electron energy in a local phase Φ_{ab}^2 was essentially much less, than the one Φ_a^2, Φ_b^2 in an initial phase. This is the condition for the superconducting phase transition in the crystal AB.

Model silver iodide crystal was calculated: 2 AgJ = Ag2+J2.

$\Phi^2(AgJ) = 363.36166854 < 0.5\bullet\Phi^2(Ag) = 0.5\bullet 754.76306986 = 377.38153493.$

$\Phi^2(AgJ) = 363.36166854 > 0.5\bullet\Phi^2(J) = 0.5\bullet 266.07841792 = 133.03920896.$

$2\bullet\Phi^2(AgJ) = 726.72333708 < \sum\Phi^2 = \Phi^2(Ag) + \Phi^2(J) = 1020.84148778.$

$q = z\bullet\beta\bullet\Phi^2(AgJ) / \sum\Phi^2 \text{ — } 1 = 726.72333708\bullet\beta / 1020.84148778 \text{ — } 1,$

where q, β are the interaction parameters, z is the molecule number in the cell.

From the literature data, the phase transition temperature T* in AgJ is 420 K. Interaction parameters and the phase transition temperature T*, corresponding to the bond breaking of the silver sublattice, are calculated [1-2] from the curve equation
$T_c = 40.05687q^2 - 234.44056q + 191.51842,$

$T^* = 40.05687\ q^2 - 234.44056\ q + 191.51842 = 420,$

$q^2 - 5.85269293\ q - 5.703929937 = 0,$

$q = 2.926346465 \pm 3.77722564,$
$q1 = \text{ — } 0.850879175, \qquad q2 = 6.703572105,$

726.72333708●β1 / 1020.84148778 ▬ 1 = ▬ 0.850879175,

β1 = 0.20947273,

726.72333708●β2 / 1020.84148778 ▬ 1 = 6.703572105,

β2 = 10.82134783.

The AgJ compound consists of two sublattices — Ag silver and iodine J. The valence bonds between the sublattices are broken at a temperature T*. The Ag sublattice is destroyed and Ag2 molecules are formed. The sublattice J is not destroyed under normal pressure conditions and the J2 molecules are not formed, since the energy balance is not satisfied.

The Ag4RbI5 = 4AgJ + RbI crystal consists of 4 sublattices: silver, iodine, rubidium, and iodine, for RbJ, the valence bonds are not broken, because the energy balance is not satisfied. At low temperatures, phase transitions take place according to the literature data at 122 K and 208 K.

Ag4RbI5 = 4AgJ + RbJ = 2 Ag2 + 0.5 Rb2 + 2.5 J2,

Φ^2 (Ag4RbI5) = 315.45703439 < 2●754.76306986,

Φ^2 (Ag4RbI5) = 315.45703439 < 2.5●266.07841792,

Φ^2 (Ag4RbI5) = 315.45703439 > 0.5●14.87764982.

T* = 122, T* = $40.05687q^2$-234.44056 q + 191.51842 = 122,

q^2 - 5.85269293 q + 1.73549306 = 0,

q = 2.926346465 ± 2.61304622,

q1 = 0.313300245, q2 = 5.539392685,

2●315.45703439 β1 / 2182.16100943 ▬ 1 = 0.313300245,

β1 = 4.542350107,

2●315.45703439 β2 / 2182.16100943 ▬ 1 = 5.539392685,
β2 = 22.617989435.

$T^* = 208$, $T^* = 40.05687q^2 - 234.44056\ q + 191.51842 = 208$,

$q^2 - 5.85269293\ q - 0.41145451 = 0$,

$q = 2.926346465 \pm 2.995823449$,
$q1 = -0.069476984$,
$q2 = 5.922169914$,

$2 \bullet 315.45703439\ \beta 1 / 2182.16100943 - 1 = -0.069476984$,
$\beta 1 = 3.218427269$,

$2 \bullet 315.45703439\ \beta 2 / 2182.16100943 - 1 = 5.922169914$,
$\beta 2 = 23.94191227$.

For the solid electrolyte $Ag_{26}\ J_{18}\ W_4\ O_{16}$ three transitions occur, two first order (198.5 and 248.6K) and another more gradual transition producing a lambda-shaped peak at 275.6K take place according to the literature data [3].

Electron parameters of crystal $Ag_{26}\ J_{18}\ W_4\ O_{16}$ were calculated (Table 1),
where M is molecule mass , ρ is density, s, z are the electron and molecule numbers, respectively.

$Ag_{26}J_{18}W_4O_{16} = 18\ AgJ + 4\ Ag_2WO_4 = 18\ AgJ + 4\ Ag_2O + 4\ WO_3 =$
$= 13\ Ag_2 + 9J_2 + 2\ W_2 + 8\ O_2$

$\Phi^2\ (Ag) = 830 \bullet 10.491 \bullet 1 / 107.8682 = 80.72379070$,
$13 \bullet 80.72379070 = 1049.4092791$.

Table 1. Electron parameters of crystal $Ag_{26}\ J_{18}\ W_4\ O_{16}$.

	Ag	J	AgJ	W	O	Ag_2WO_4	$Ag_{26}J_{18}W_4O_{16}$
M	107.8682	126.9045	234.7727	183.85	15.9994	463.57	6080.2446
ρ	10.491	4.94	5.68	19.3	1.46	8	6.2310 99567
				$5d^46s^2$			
s	1	7	8	6	6		272
z	4		4	2			
Φ^2	80.7237 9070	226.1653 44806	160.6455 9465	522.7848 78977	454.4420 41576		231.3612 57776

$\Phi^2\ (J) = 830 \bullet 4.94 \bullet 7 / 126.9045 = 226.165344806$,
$9 \bullet 226.165344806 = 2035.488103254$,

Φ^2 (W) = 830●19.3●6 / 183.85 = 522.784878977,
2●522.784878977 = 1045.569757954,

Φ^2 (O) = 830●1.46●6 / 15.9994 = 454.442041576,
8●454.442041576= 3635.536332608,

The density ρ_{ab} ($Ag_{26}J_{18}W_4O_{16}$) is calculated by the equation
100/ $\rho_{ab} = X_a / \rho a + X_b / \rho b$, M ($Ag_{26}J_{18}W_4O_{16}$) = 6080.2446 → 100,
M (18 AgJ) = 4225.9086 → Xa = 69.50227956,
M (4 Ag_2WO_4) = 1854.336 → Xb = 30.497720437,
100/ ρ_{ab} = 69.50227956 / 5.68 + 30.497720437 / 8 = 12.23631682+3.81221505
= 16.04853187, ρ_{ab} = 6.231099567.

Φ^2 ($Ag_{26}J_{18}W_4O_{16}$) = 231.361257776 < 13 Φ^2 (Ag) = 1049.4092791,

Φ^2 ($Ag_{26}J_{18}W_4O_{16}$) = 231.361257776 < 9 Φ^2 (J) = 2035.488103254,

Φ^2 ($Ag_{26}J_{18}W_4O_{16}$) = 231.361257776 < 2 Φ^2 (W) = 1045.569757954,

Φ^2 ($Ag_{26}J_{18}W_4O_{16}$) = 231.361257776 < 8 Φ^2 (O) = 3635.536332608,

$\sum\Phi^2$ ($Ag_{26}J_{18}W_4O_{16}$) = 1049.4092791+2035.488103254+1045.569757954+
3635.536332608 = 7766.003472916,

q = (v●Φ^2 / $\sum\Phi^2$ – 1 = 2●231.361257776 / 7766.003472916 – 1 =
2●231.361257776 / 7766.003472916 = 0.05958309.

T_c = 0.14220768 ▬ 13.968692986 + 191.51842 = 177.691934694.

Three phase transitions in crystal can be calculated by selecting parameters. Additional experimental results are needed to fully describe the phase transitions.

[1] Nadezhda P. Netesova. Oscillation electron model superconductors: phase diagram, temperature transition, isotopic shift, Proceedings of SPIE, **10533**, 105330Z, 1-11 (2018).
[2] Н.П. Нетесова. Электронная плазменная модель кристалла TGS. Сборник Трудов международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах», Махачкала, 159-162 (15-20 сентября 2019).
[3] P.G. Hall, D.A. Armitage, R.G. Linford. Heat capacity of the solid electrolyte $Ag_{26}I_{18}W_4O_{16}$, J. Phys. C: Solid State Phys., 16, L835-L837 (1983).

Структурный и термический анализ $CuInZnSe_3$

С.Г.Джабаров [1], С.И. Ибрагимова [2]
[1] *Институт радиационных проблем НАНА, Баку, Азербайджан*
e-mail: sakin@jinr.ru
[2] *Институт физики НАНА, Баку, Азербайджана*
e-mail: sevinc.ibr.amea@gmail.com

Среди полупроводниковых соединений особое место занимают халькогениды A^2B^2 и $A^1B^2{}_2$ [1]. A_2Se (A = Cu, In, Zn) являются наиболее изученными халькогенидами из-за их различных оптических и электрических свойств [2]. Структурные исследования методом рентгеновской дифракции показывают, что в этих соединениях наблюдаются орторомбическая, тетрагональная, гексагональная и кубическая симметрия [3]. При структурных исследованиях халькогенидных полупроводников обнаруживаются многие интересные структуры. При структурных исследованиях соединения AgCuSe получены различные фазы: тетрагональная, ромбическая, кубическая и твердый раствор Ag_2Se-Cu_2Se [4]. Исследования показали, что при частичной замене атомов Cu на атомы Zn и Cd в бинарных халькогенидах наблюдаются изменения кристаллической структуры, что объясняется различием ионных радиусов атомов [5]. Это явление также наблюдалось в перовскитах во время предыдущих исследований и показало образование химического давления в соединениях из-за разницы ионных радиусов [6]. Предыдущие структурные исследования показывают, что в бинарных и тройных халькогенидных соединениях существуют разные структурные фазы.

В данной работе впервые синтезировано соединение $CuInZnSe_3$, изучены структура (методом рентгеновской дифракции) и термические свойства (методом ДСК) поликристаллических образцов.

Структурный анализ объекта исследования проводился рентгеноструктурным методом. Рентгеновская дифракция образцов проведена на D8 Advance - порошковом дифрактометре (Bruker) со следующими параметрами: 40 kV, 40 mA, CuKα-излучение (λ = 1.5406 Å).

Тепловые свойства объекта исследования были выполнены методом дифференциального сканирующего калориметрического анализа (ДСК). ДСК проводили на приборе марки «Jupiter» STA 449F3 (Netzsch, Германия). Анализ был проведен в динамическом режиме в инертной атмосфере (гелий) на термоанализаторе при скорости нагрева 5 град/мин, с использованием термопара Pt-Pt/Rh. Прибор работает под управлением программного обеспечения "Proteus". Эксперименты проводились в интервале температур T = 30-900 °C.

Структурные исследования соединения $CuInZnSe_3$ при комнатной температуре показали, что это соединение имеет кубическую

симметричную кристаллическую структуру с пространственной группой F-43m (216). В результате термического анализа в области высоких температур было определено, что в интервале температур T = 30-900 ºC в этом соединении отсутствует структурный фазовый переход и сохраняется кубическая симметрия. При более высоких температурах структурные фазовые переходы не происходят, а происходят физические явления, такие как разложение и плавление. Эффекты линейного увеличения теплового потока соединения $CuInZnSe_3$ в указанном диапазоне температур и небольшого изменения центральных пиков при температурах 492 °C, 596 °C и 753 °C характеризуются резонансом тепловых колебаний атомов в кристаллической решетке и выделением относительно слабосвязанных атомов.

[1] Н.А.Алиева, Г.Г.Гусейнов, В.А.Гасымов, Ю.И.Алыев, Т.Р.Мехтиев, Неорганические Материалы **51**, 726 (2015).
[2] V.Milman, Acta Cryst. B **58**, 437 (2002).
[3] Ю.Г.Асадов, Ю.И.Алыев, А.Г.Бабаев, Физика элементарных частиц и атомного ядра **46**, 812 (2015).
[4] S.G.Asadullayeva, T.G.Naghiyev, G.A.Gafarova, Advanced Physical Research **1**, 81 (2019).
[5] Ю.И.Алыев, А.Г.Бабаев, Ю.Г.Асадов, Г.Ф.Ганизаде, Р.Д.Алыева, С.Г.Джабаров, А.В.Труханов, Кристаллография **62**, 626 (2017).
[6] S.H.Jabarov, A.V.Trukhanov, E.A.Kornieva, R.Z.Mehdiyeva, S.E.Kichanov, A.I.Mammadov, E.V.Lukin, R.E.Huseynov, Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques **8**, 1198 (2014).

Структурные фазовые переходы в $AgCuSe_{0.5}(S,Te)_{0.5}$ кристаллах

Ю.И.Алыев
Азербайджанский государственный педагогический университет, Баку, Азербайджан
e-mail: fizik-3@mail.ru

Соединение AgCuSe образуется при соотношении компонентов Ag_2Se : Cu_2Se = 1 : 1 по перитектической реакции при температуре 1033 K. Структура низкотемпературной фазы AgCuSe в [1] определена как тетрагональная с параметрами решетки a = 4.083 Å, c = 6.30 Å, Z = 2, пространственная группа (пр. гр.) P4/nmm, плотность ρ = 7.91 г/см^3. Позднее в [2] кристаллическая структура AgCuSe определена как орторомбическая с параметрами решетки a = 4.105 Å, b = 20.350 Å, c = 6.310 Å, Z = 10, ρ = 7.885 г/см^3. Последняя является сверхструктурой тетрагональной решетки. Параметр b орторомбической решетки кратен 5 параметрам b тетрагональной решетки. По данным [2], в орторомбической структуре AgCuSe атомы Ag находятся в плоскостях, перпендикулярных оси c. Около каждого из них располагаются 4 атома Ag на расстоянии 2.96 Å и 6 атомов Se на расстояниях 2.67 Å (4Se), 3.59 Å (1Se), 3.64 Å (1Se). Атомы Se образуют вытянутые тетраэдры, в центре которых находятся атомы Cu. Расстояния Se - Se равны 3.03 Å, расстояния Cu - Se равны 2.06 - 2.50 Å, наименьшее расстояние Cu - Ag составляет 2.98 Å. В [3] показано, что орторомбическая модификация при 504 K превращается в высокотемпературную гранецентрированную кубическую (ГЦК) модификацию с параметром элементарной ячейки a = 6.0694 Å. Превращения в AgCuSe - обратимые. В данной работе рассмотрены полиморфные превращения в $AgCuSe_{0.5}S_{0.5}$ и $AgCuSe_{0.5}Te_{0.5}$.

Для формирования указанных составов выбрали метод прямого синтеза. В качестве реактора были применены двухстенные ампулы с внутренним диаметром 1 см и длиной 10 см из высококачественного кварца, который обладает большой термической стойкостью, в результате была обеспечена высокая герметичность, что исключает загрязнение и окисление синтезируемых веществ в случае растрескивания одной из двух ампул. Ампулы заполнялись исходными веществами Ag, Cu, Se, S или Te в количествах, необходимых для каждого состава, эвакуировались до давления 10^{-3} Па, а затем запаивались. Участвующие исходные компоненты имели следующую чистоту: Cu - электролитическая, Ag - 99.999, S, Se и Te - марки B5. Ампулы с компонентами составов $AgCuSe_{0.5}S_{0.5}$ и $AgCuSe_{0.5}Te_{0.5}$ помещали в печь и для предотвращения взрыва, а также для полной диффузии расплавленных селена, серы или теллура с серебром и медью температуру печи медленно повышали сначала до температуры плавления серы (T_m = 391 K), потом селена (T_m = 493 K), потом теллура (T_m = 725 K),

ампулы выдерживали при этой температуре 4 ч. После этого температуру печи повышали со скоростью 50 K/ч выше температуры плавления AgCuSe (T_m = 1039 K). После выдержки в течение 3 ч при этой температуре с циклическим вибрированием ампулы с образцами медленно охлаждали до 400 K, и при этой температуре с целью гомогенизации полученные образцы отжигались в течение 200 ч. Для установления структуры синтезированных образцов был проведен микроструктурный и рентгенофазовый анализ.

Методом высокотемпературной рентгеновской дифрактометрии проведено исследование кристаллов состава $AgCuSe_{0.5}(S,Te)_{0.5}$. Показано, что состав $AgCuSe_{0.5}S_{0.5}$ при комнатной температуре состоит из $Cu_{1.96}S$ и AgCuSe. Эти фазы при 695 K превращаются в единую гранецентрированную кубическую фазу, превращение обратимо. Состав $AgCuSe_{0.5}Te_{0.5}$ при комнатной температуре трехфазный, включает Cu_2Te, AgCuSe и кубическую фазу. При 444 K обе орторомбические фазы одновременно превращаются в алмазоподобную кубическую фазу, при превращении кубическая фаза играет роль затравки. Из температурной зависимости параметров решетки рассчитаны коэффициенты теплового расширения существующих фаз в обоих составах по основным кристаллографическим направлениям.

[1] N.N.Bikkulova, G.N.Asylguzhina, A.N.Skomorokhov, Yu.M.Stepanov, Bull. Rus. Acad. Sci. Phys. **70**, 641 (2006).
[2] Y.G.Asadov, Y.I.Aliyev, A.G.Babaev. Phys. Part. Nucl. **46**, 452 (2015).
[3] R.B.Baikulov, Yu.G.Asadov. Inorg. Mater. **41**, 338 (2005).

Magnetodielectric effects in Co-implanted $TlInS_2$ and $TlGaSe_2$

В.Б.Алиева
Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан
e-mail: vafa_neymatova@mail.ru

The search for new and development of the existing technologies of obtaining composite materials with suitable multiferroic and magnetoelectric characteristics is currently an important task. Among the different techniques, ion implantation is a very attractive and prospective preparation method, due to easy control of the metal distribution and concentration, the availability of almost arbitrary metal-dielectric compositions, and the ability to surpass the solubility limits constrained by the chemical and thermodynamic equilibrium of the host matrix and metal impurities [1].

In this work the results of investigation of magnetoelectric properties of multiferroic composites obtained by Co implantation of ferroelectric layered chalcogenides $TlInS_2$ and $TlGaSe_2$ are presented. There is also a continuous interest in the ternary layered ferroelectric $TlInS_2$ and $TlGaSe_2$ compounds due to the coexistence of ferroelectric and semiconductor properties, as well as the presence of successive structural phase transformations in these crystals. As is known, on cooling $TlInS_2$ and $TlGaSe_2$ crystals undergo a sequence of structural phase transitions, including the transitions into the incommensurate (IC) and commensurate (C) ferroelectric phases [2]. The initial paraelectric phase of TlInS2 and $TlGaSe_2$ is characterized by the space symmetric group of C^6_{2h} [3]. The phase transition into IC phase is accompanied by soft mode condensation (at T_i = 216 and 120 K, respectively) with the wave vector $\overrightarrow{q_i}$ = (δ, δ, 0.25) in the Brillouin zone, where d is the incommensurate parameter. At $T_c \approx 201$ and 107 K, respectively, the d value jumps to zero and the crystals $TlInS_2$ and $TlGaSe_2$ exhibit a structural phase transition to commensurate ferroelectric phase with the wave vector of $\overrightarrow{q_c}$ = (δ, δ, 0.25). In this case the spontaneous polarization lies in the plane of layers [4].

The possibility of magnetoelectricity in ternary layered thallium chalcogenide compounds was considered in [5], which presents the first results of study of magnetoelectricity and multiferroicity in paramagnetic Co-doped $TlInS_2$ and $TlGaSe_2$ and is aimed to study the possibility of the reasonable variation of the factual chemical composition of $TlIn_{1-x}Co_xS_2$ and $TlGa_{1-x}Co_xSe_2$ compounds and phase relations for magnetoelectric ternary layered single crystals. The first investigation of Co-implanted $TlInS_2$ and $TlGaSe_2$ ferroelectrics was reported in [6] recently. In that work the results of investigations of magnetic properties of Co-implanted $TlInS_2$ and $TlGaSe_2$ crystals are presented. It was concluded that the implantation with Co produces a granular composite film in the surface layer of $TlInS_2$ and $TlGaSe_2$ substrates, which exhibits remarkable ferromagnetic behaviour. Hence, the formation of this layer allows to offer Co-implanted $TlInS_2$

and $TlGaSe_2$ compounds as new multiferroic composite structures exhibiting interesting magnetoelectric properties at the temperature region of successive phase transitions in $TlInS_2$ and $TlGaSe_2$. Here we report the results of study of magnetodielectric (magnetocapacitance) phenomena in these structures in a wide temperature range.

The results of investigations of dielectric and magnetodielectric properties of ternary layered $TlInS_2$ and $TlGaSe_2$ ferroelectric crystals implanted with 40 keV Co^+ ions at the fluency of 1.0×10^{17} ion/cm^2 are presented. The temperature dependences of the dielectric susceptibility of Co-implanted samples showed that the formation of metal nanoparticulate composite layer in the near-surface irradiated region as a result of high-fluency Co implantation causes considerable shifts of well-known successive structural phase transition points to high temperatures in heating regime. It has been revealed that the application of the magnetic field in the direction perpendicular to implanted surface results in shifting of the phase transition points to low temperature region. The observed peculiarities are considered as magnetocapacitance (magnetodielectric) effects, which appeared as a result of magnetoelectric lock-in interaction between domains of ferroelectric and ferromagnetic substances of the composite structure.

[1] G. Dearnaley, J.H.Freeman, R.S. Nelson, Ion implantation. Amsterdam: North-Holland (1973).
[2] F.A.Mikailov, E.Basaran, E.Şentürk, Phase Transit. **76**, 1057 (2003).
[3] F.A.Mikailov, B.Z.Rameev, S.Kazan, Solid State Commun. **133**, 389 (2005).
[4] F.A.Mikailov, S.Kazan, B.Z.Rameev, Phys. Status. Solidi. A **203**, 1580 (2006).
[5] M.Y. Seyidov, E.M. Kerimova, R.K.Veliyev, J. Alloys Compounds. **453**, 503 (2008).
[6] F.Mikailzade, A.G.Sale, S.Kazan, Solid State Commun. **152**, 407 (2012).

Рассеяние фононов на редкоземельных ионах Sm^{3+}иEu^{3+} в феррите висмута

Р.Г.Митаров [1],С.Н.Каллаев [2], А.М.Бакмаев [2], С.А.Резниченко [3], А.Т.Темиров [1]

[1] Дагестанский государственный технический университет, Махачкала, Россия
[2] Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
e-mail: kallaev-s@rambler.ru
[3] Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, Ростов на Дону, Россия

Исследована температурная зависимость температуропроводности и теплопроводности мультиферроиков $BiFeO_3$, $Bi_{0,90}Sm_{0,10}FeO_3$ и $Bi_{0,90}Eu_{0,10}FeO_3$.Определена величина $\Delta\lambda_{res}$ - уменьшение теплопроводности кристаллической решетки за счет резонансного рассеяния фононов на мультиплетных уровнях ионов европия и самария.

Объектами исследования являлись керамические образцы твердых растворов $Bi_{0,90}Sm_{0,10}FeO_3$ и $Bi_{0,90}Eu_{0,10}FeO_3$. Керамики были получены по обычной керамической технологии, путем твердофазного синтеза с последующим спеканием без приложения давления в воздушной атмосфере [1]. Рентгеноструктурный анализ проводился на установке ДРОН-3 на $Fe_{K\alpha}$ и $Cu_{K\alpha}$ излучении. Определялся фазовый состав, параметры ячейки, степень совершенства кристаллической структуры при различных температурах. Полученные твердые растворы обладали достаточно высокими значениями экспериментальной и относительной (89-94)% плотностей и соответствовали предельно достижимым по обычной керамической технологии (90-95)%, что свидетельствует о достаточно хорошем качестве керамик.

Измерение температуропроводности (термодиффузии) проводилось на установке LFA-457 MicroFlash фирмы NETZSCH методом лазерной вспышки. Образец для измерения термодиффузии представлял собой пластину диаметром 12,5 мм и толщиной 1 мм. Погрешность измерения термодиффузии не выше 5%. Теплопроводность рассчитывалась по формуле $\lambda = \eta C_p \rho$ *(где* η – температуропроводность, ρ - плотность образца, C_p - теплоёмкость). Результаты исследования теплоемкости C_p этих образцов, полученные на дифференциальном сканирующем калориметре DSC 204 *F1 Phoenix*® фирмы NETZSCH, приведены в [1,2].

На рис.1 приведены температурные зависимости термодиффузии и теплопроводности мультиферроиков $BiFeO_3$, $Bi_{0,90}Sm_{0,10}FeO_3$, $Bi_{0,90}Eu_{0,10}FeO_3$ в интервале температур 300-620К. При замещении диамагнитных ионов висмута редкоземельными ионами самария и европия теплопроводность феррита висмута уменьшается (рис.1б). Это может быть обусловлено рассеянием фононов на парамагнитных уровнях РЗ ионов.

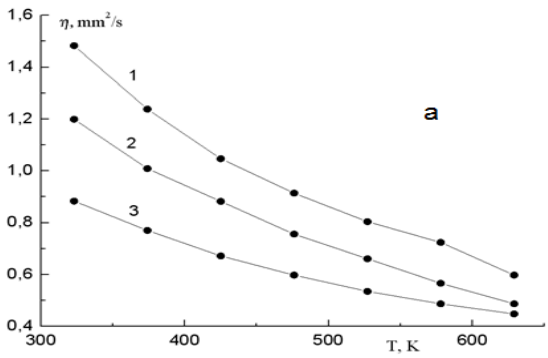


Рис.1a. Температурные зависимости η мультиферроиков $BiFeO_3$, $Bi_{0,90}Sm_{0,10}FeO_3$, $Bi_{0,90}Eu_{0,10}FeO_3$.

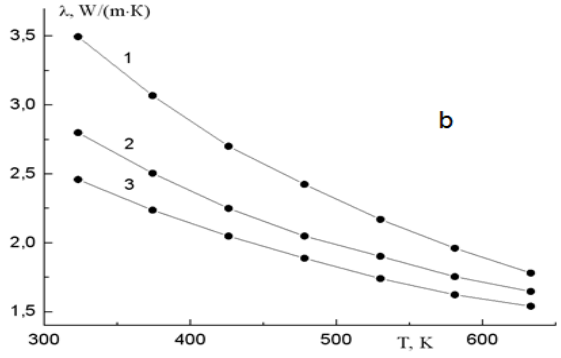


Рис.1b. Температурные зависимости λ мультиферроиков $BiFeO_3$, $Bi_{0,90}Sm_{0,10}FeO_3$, $Bi_{0,90}Eu_{0,10}FeO_3$.

Главной особенностью редкоземельных ионов является наличие в них внутренних 4f - оболочек, которые заполнены частично. 4f - оболочки в РЗЭ лежат глубоко в атоме, поэтому кристаллическое поле решетки расщепляет их уровни на небольшую величину (~ 100К и меньше) [5]. Т.е. энергия расщепленных уровней соответствует энергиям фононов, спектр которых заключен в интервале 100-300К. При более высоких температурах имеет место переходы между мультиплетными уровнями РЗ ионов. Колебания кристаллической решетки могут переводит ионы с одного уровня на другой и это приводит к поглощению фононов и, как следствие, к уменьшению теплопроводности кристаллической решетки и увеличению теплоемкости. Таким образом, парамагнитные РЗ ионы являются дефектами, рассеивающими фононы за счет резонансного рассеяния фононов, и это приводит к уменьшению теплопроводности соединений, содержащих РЗ ионы ($-\Delta\lambda_{res}$) и увеличению теплоемкости (C_p), благодаря термическому возбуждению 4f-электронов РЗЭ (эффект Шоттки) [3,4]. Абсолютная величина и температурная зависимость $-\Delta\lambda_{res}(T)$ зависят от концентрации РЗ ионов, расположения этих ионов в кристаллической решетке, относительного вклада того или иного механизма рассеяния фононов и температурного интервала [5]. Для ионов европия Eu^{3+} и самария Sm^{3+} основными состояниями являются $^7F_0$ и $^6H_{5/2}$ соответственно. Для мультиплетного терма этих состояний характерно относительно небольшой энергетический зазор между основным и первым возбужденным состоянием ионов европия и самария $^7F_1$ и $^6H_{7/2}$ соответственно (≈ 300 и 1000 $см^{-1}$) [6]. Такие расстояния между уровнями мультиплетов сравнимы с энергий фононов при достаточно низких температурах и колебания кристаллической решетки могут переводит ионы европия и самария на более высокие уровни мультиплета и это приводит к поглощению фононов и как следствие, к уменьшению теплопроводности ($-\Delta\lambda_{res}$).

Есть два способа выделения $-\Delta\lambda_{res}$: теоретический [7,8] и экспериментальный [3]. Для выделения $-\Delta\lambda_{res}$ мы воспользовались

экспериментальным методом. При этом $-\Delta\lambda_{res}$ определяется как разность теплопроводностей:

$$-\Delta\lambda_{res} = \lambda_1 - \lambda_2 \quad (1)$$

где λ_1,λ_2 - теплопроводности $Bi_{0,90}Re_{0,10}FeO_3$ (Re – редкоземельные элементы Eu, Sm) и $BiFeO_3$, соответственно.

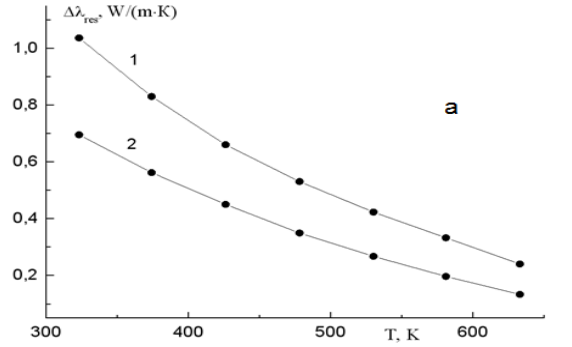


Рис.2. Температурные зависимости $\Delta\lambda_{res}$ для мультиферроиков $Bi_{0,90}Sm_{0,10}FeO_3$ и $Bi_{0,90}Eu_{0,10}FeO_3$ $-\Delta\lambda_{res}(T)$

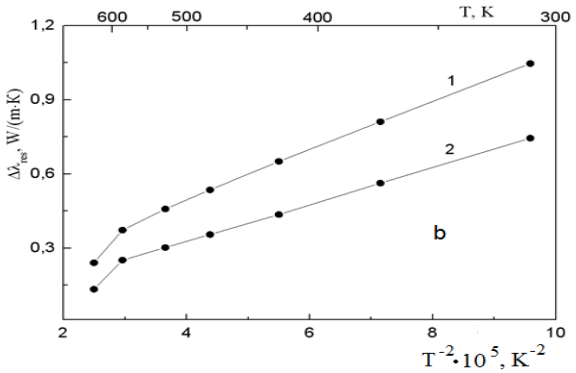


Рис.2. Температурные зависимости $\Delta\lambda_{res}$ для мультиферроиков $Bi_{0,90}Sm_{0,10}FeO_3$ и $Bi_{0,90}Eu_{0,10}FeO_3$ $\Delta\lambda_{res}(T^{-2})$.

Такая процедура выделения $-\Delta\lambda_{res}$ не должна вносит заметной погрешности в определение этой величины. Это обусловлено тем, что исследованные составы близки между собой по массе, химическим связям, они кристаллизуются в одной и той же структуре, имеют близкие параметры кристаллической решетки, плотности, температуры плавления, а радиусы ионов самария Sm^{3+} и европия Eu^{3+} очень близки [9]. Поэтому можно считать, что рассеяние фононов в них отличается только рассеянием на мультиплетных уровнях РЗ элементов. На рис.2 приведена рассчитанная согласно формуле (1) величина $-\Delta\lambda_{res}$ и ее зависимость от температуры для $Bi_{0,90}Eu_{0,10}FeO_3$ и $Bi_{0,90}Sm_{0,10}FeO_3$. Оказалось, что $-\Delta\lambda$ пропорциональна T^{-2} (рис.2б), как и предсказывает теория: $-\Delta\lambda_{res} \sim T^{-2}$ [8,9]. При приближении температуры к точке Нееля (T_N=643K) наблюдается отклонение от этой зависимости. Абсолютная величина $-\Delta\lambda$ зависит от концентрации РЗ ионов и это находит экспериментальное подтверждение. С увеличением концентрации РЗ ионов термодиффузия (соответственно и теплопроводность) $Bi_{1-x}Eu_xFeO_3$ уменьшается (рис.3) и это обусловлено резонансным рассеянием фононов на мультиплетных уровнях ионов европия.

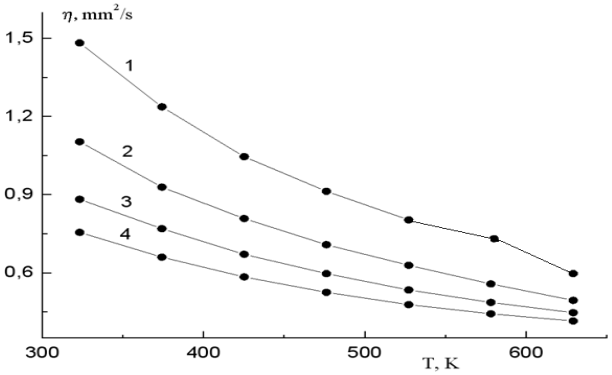


Рис.3. Температурные зависимости η мультиферроиков $Bi_{(1-x)}Eu_xFeO_3$: x=0 (1), 0.05 (2), 0.10 (3) и 0.20 (4).

Таким образом, на основании экспериментального исследования термодиффузии и теплопроводности феррита висмута, легированного европием и самарием можно сделать следующие выводы:

1) уменьшение теплопроводности феррита висмута при легировании РЗ ионами самария и европия обусловлено рассеянием фононов на мультиплетных уровнях этих ионов;

2) экспериментально определена величина $-\Delta\lambda_{res}$ - уменьшение теплопроводности кристаллической решетки за счет резонансного рассеяния фононов на мультиплетных уровнях ионов европия и самария - $\Delta\lambda_{res}$ и ее температурная зависимость: $-\Delta\lambda_{res} \sim T^{-2}$.

[1] S.N.Kallaev, A.G.Bakmaev, S.M.Omarov, R.G.Mitarov, A.R.Bilalov, L.A.Reznichenko. Journal of Alloys and Compounds. **695**, 3044 (2017).
[2] С.Н.Каллаев, С.А.Садыков, З.М.Омаров, А.Я.Курбайтаев, Л.А.Резниченко, С.В.Хасбулатов. ФТТ**58**, 664 (2016).
[3] Р.Г.Митаров, Л.С.Парфеньева, В.В.Попов, И.А.Смирнов. ФТТ**42**, 2147 (2000).
[4] В.П.Жузе. Физические свойства халькогенидов редкоземельных элементов. Наука, Л. (1973). 304 с.
[5] Р.Г.Митаров. ТВТ**46**, 951 (2008).
[6] G.H. Dieke. Intersciens Publ., N.Y. 457 (1968).
[7] I.A.Smirnov, V.S.Oskotskii, L.S.Parfeneva. High Temp. High Pressure **21**, 237 (1989).
[8] Л.Н.Васильев, Н.И.Джабаров, В.С.Оскотский, Л.С.Пафеньева, И.А.Смирнов. ФТТ**26**, 2710 (1984).
[9] К.П. Андрюшин, А.А. Павелко, А.В. Павленко, И.А. Вербенко, Л.А. Шилкина, С.П. Кубрин, Л.А. Резниченко. Письма в ЖЭТФ**37**, 54 (2011).

Термостимулированное излучение полупроводников в магнитном поле

И.В.Бычков [1], Д.А.Кузьмин [1], В.Г.Шавров [2]
[1] *Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия*
[2] *ИРЭ РАН им. В.А. Котельникова, Москва, Россия*
e -mail: bychkov@csu.ru

Вопросы, связанные с тепловым излучением твердых тел активно исследовались, в частности, в середине прошлого века [1-3] и в настоящее время [4, 5 и ссылки в них]. Обычно, термоизлучение обладает общими характеристиками: излучение обычно некогерентное, широкополосное, неполяризованное, а диаграмма излучения почти изотропна. Они подчиняются ряду фундаментальных ограничений: спектральная плотность теплового излучения ограничена сверху законом теплового излучения Планка. Тепловые излучатели обычно подчиняются закону Кирхгофа, т.е. угловая спектральная поглощающая способность и излучательная способность (ИС) должны быть равны друг другу. Все это накладывает серьезные ограничения на возможности управления тепловым излучением. С другой стороны, в последнее время значительное внимание исследователей привлекают новые материалы: 2D-материалы и структуры на их основе, материалы, претерпевающие фазовые переходы, материалы, в которых наблюдается взаимодействие подсистем (например, магнитооптические, магнитоакустические эффекты и т.д.). Все это заставляет пересмотреть прошлые результаты и применить их к новым материалам и структурам.

Мы исследовали особенности термостимулированного излучения в анизотропной среде на примере полупроводника, помещенного в магнитное поле. Электродинамические характеристики такого материала могут быть описаны антисимметричным тензором диэлектрической проницаемости с компонентами: $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = 1 - \omega_P^2/(\omega^2 - \omega_H^2)$; $\varepsilon_{zz} = 1 - \omega_P^2/\omega^2$; $\varepsilon_{xy} = -\varepsilon_{yx} = -\omega_H \omega_P^2 / [\omega (\omega^2 - \omega_H^2)]$. Здесь ω_P и ω_H плазменная и циклотронная частоты, соответственно. Для данного тензора, магнитное поле направлено по оси *z*. В такой среде может распространяться 2 типа волн. Поэтому ИС будет складываться из трех слагаемых [3] $\eta_\omega = \eta_{\omega,1} + \eta_{\omega,2} + \eta_{\omega,12}$, где $\eta_{\omega,i}$ – ИС на волнах типа *i*, $\eta_{\omega,12}$ – интерференционный член. Как было показано ранее [3], последнее слагаемое не играет существенной роли. Для определенности выберем диоксид ванадия VO_2, в котором при температурах, близких к комнатной происходит фазовый переход металл-полупроводник. Для полупроводниковой фазы характерные параметры следующие: $\omega_P \sim 10^{13}$ рад/с, $\omega_H \sim 10^8$ *H* рад/с. Основным вопросом в настоящей работе является изучение влияния внешнего магнитного поля на ИС анизотропной среды.

Рассмотрим для определенности излучение ТГц диапазона частот ($\omega = 5\ 10^{13}$ рад/с). Результаты расчетов представлены на рис. 1.

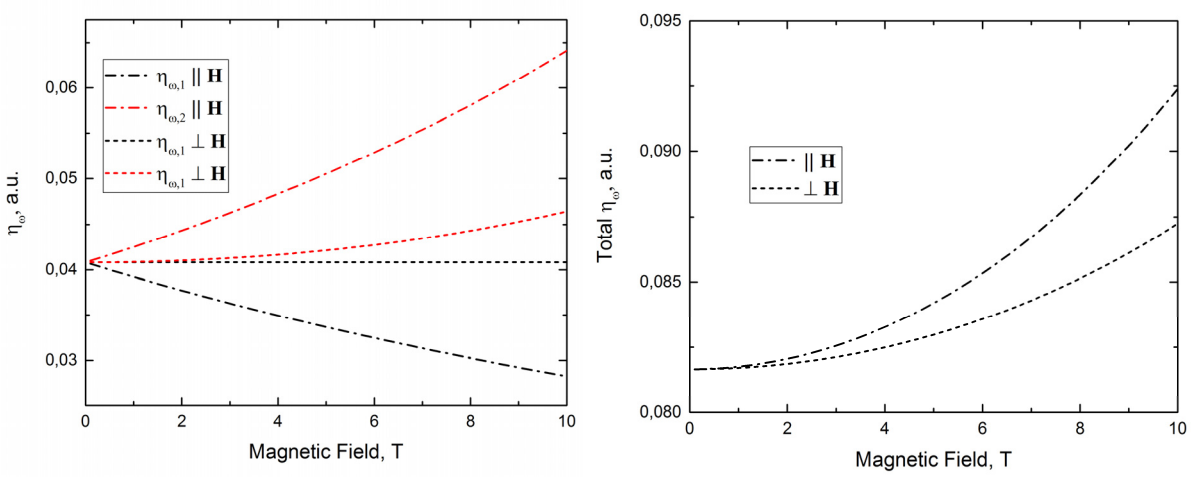


Рис.1 Излучательная способность полупроводника в магнитном поле.

Можно отметить, что отличие в ИС для разных типов волн сильнее в направлении вдоль магнитного поля, поперек магнитного поля ИС одной из волн не зависит от величины поля, в то время как для второй волны – незначительно растет. Суммарная ИС для двух типов волн растет с ростом магнитного поля, однако при разумных магнитных полях до 1 Т этот рост незначительный. Поляризационный состав излучения в магнитном поле будет существенно отличаться от поляризации излучения в отсутствии магнитного поля. Полученные результаты пробуждают интерес к дальнейшему исследованию данных эффектов в многослойных наноструктурах, когда важную роль будут играть не только дальнеполевое излучение, но и ближнеполевые взаимодейсвия.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 20-37-70038, 19-07-00246, 20-47-740004), РНФ (грант № 20-19-00745). Численные расчеты произведены при поддержке Министерства Науки и Высшего Образования РФ в рамках госзадания проект № 075-00992-21-00.

[1] С.М. Рытов, Электрические флуктуации и тепловое излучение, УФН **55** 299 (1955).

[2] С.М. Рытов, Корреляционная теория электрических флуктуаций и теплового излучения, УФН **63** 657 (1957).

[3] Ф.В. Бункин, Тепловое излучение анизотропной среды, ЖЭТФ **32**(4), 811 (1957).

[4] Е.А. Виноградов, И.А. Дорофеев, Термостимулированные электромагнитные поля твердых тел. М.: Физматлит. 2010. – 484с.

[5] А.И. Волокитин, Б.Н.Дж. Перссон, Радиационная передача тепла и бесконтактное трение между наноструктурами,УФН **177** 921 (2007).

Секция B2

Топологические материалы, магнитотранспорт и спинтроника

Электрический магнитокиральный эффект и кинетический магнитоэлектрический эффект, индуцированные киральным обменным полем в геликоидальных магнетиках

В.В. Устинов, И.А. Ясюлевич
Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: ustinov@imp.uran.ru; yasyulevich@imp.uran.ru

Теоретически рассмотрены особенности спинового и зарядового транспорта в проводящих гелимагнетиках, обусловленные эффектами действия на спин электронов проводимости сил, создаваемых пространственно-неоднородными внутренними полями квантового обменного происхождения [1,2]. В гелимагнетиках роль неоднородного внутреннего поля играет эффективное поле обменного происхождения, действующее на электроны проводимости со стороны спинов, формирующих киральный геликоидальный магнитный порядок.

Описание кинетики выполнялось с использованием квантового кинетического уравнения для квантовой функции распределения $\hat{f}\,(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$:

$$\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\frac{\partial \hat{f}}{\partial \boldsymbol{r}}+\left\{e\boldsymbol{E}+\frac{e}{c}[\boldsymbol{v}\times\overline{\boldsymbol{B}}]-\mu\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\widetilde{\boldsymbol{B}}\right)\right\}\cdot\frac{\partial \hat{f}}{\partial \boldsymbol{p}}+\mu\frac{i}{\hbar}\left(\overline{\boldsymbol{B}}+\widetilde{\boldsymbol{B}}\right)\cdot\left[\hat{\boldsymbol{\sigma}},\hat{f}\right]+ +\hat{\mathcal{R}}=0. \quad (1)$$

Квантовая функция распределения представляет собой одноэлектронную матрицу плотности, записанную в представлении Вигнера, усредненную по всем конфигурациям рассеивающего потенциала: $\hat{f}\,(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)=\sum_{\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}/\hbar}\langle\hat{\rho}_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{k}/2\;\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k}/2}\rangle$. Математический аппарат квантового кинетического уравнения позволяет естественным образом совместить последовательное квантово-механическое описание динамики спина электронов проводимости и квазиклассический подход к описанию их орбитального движения. Было показано, что учёт квантового характера движения спина при наличии неоднородного магнитного поля $\widetilde{\boldsymbol{B}}$ приводит к возникновению квантовой добавки к классической силе Лоренца $\widehat{\boldsymbol{F}}=e\boldsymbol{E}+\frac{e}{c}[\boldsymbol{v}\times\overline{\boldsymbol{B}}]-\mu\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\widetilde{\boldsymbol{B}}\right)$.

Из квантового кинетического уравнения была получена замкнутая система уравнений для плотности электронов N, спиновой плотности $\boldsymbol{S}$, потока электронов $\boldsymbol{I}$ и спинового тока $\mathbf{J}$ [1,2]:

$$\frac{\partial}{\partial t}N+\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{I}=0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{S}+\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\cdot\overleftrightarrow{\mathbf{J}}+\gamma\left[\boldsymbol{S}\times(\overline{\boldsymbol{B}}+\widetilde{\boldsymbol{B}})\right]+\frac{1}{\tau_{\mathrm{S}}}\delta\boldsymbol{S}=0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{I}+\frac{v_{\mathrm{F}}^2}{3}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\delta N-\frac{e}{m_e}\boldsymbol{E}N-\frac{|e|}{m_e c}[\overline{\boldsymbol{B}}\times\boldsymbol{I}]+\frac{\mu}{m_e}\left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\otimes\widetilde{\boldsymbol{B}}\right)\cdot\boldsymbol{S}+\frac{1}{\tau_{\mathrm{O}}}\boldsymbol{I}+ +\frac{1}{\tau_{\mathrm{SO}}}\,{}^{3}\overleftrightarrow{\boldsymbol{\epsilon}}\cdot\cdot\overleftrightarrow{\mathbf{J}}=0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\overleftrightarrow{\mathbf{J}} + \frac{v_F^2}{3}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}} \otimes \delta \boldsymbol{S} - \frac{e}{m_e}\boldsymbol{E} \otimes \boldsymbol{S} - \frac{|e|}{m_e c}\left[\overline{\boldsymbol{B}} \times \overleftrightarrow{\mathbf{J}}\right] + \gamma\left[\overleftrightarrow{\mathbf{J}} \times (\overline{\boldsymbol{B}} + \widetilde{\boldsymbol{B}})\right] + \\ + \frac{\mu}{m_e}\left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}} \otimes \widetilde{\boldsymbol{B}}\right)\delta N + \frac{1}{\tau_O}\overleftrightarrow{\mathbf{J}} + \frac{1}{\tau_{SO}}\,{}^3\overleftrightarrow{\boldsymbol{\epsilon}} \cdot \boldsymbol{I} = 0. \quad (5)$$

Здесь $\overline{\boldsymbol{B}}$ – внешнее (однородное) магнитное поле, $\widetilde{\boldsymbol{B}}$ – внутреннее (неоднородное) обменное поле, τ_S – время спин-решеточной релаксации, τ_O – время релаксации импульса, τ_{SO} – время релаксации из-за ассиметричного спин-орбитального рассеяния. В уравнениях (4) и (5) величина ${}^3\overleftrightarrow{\boldsymbol{\epsilon}}$ есть абсолютно антисимметричный единичный тензор 3-го ранга, знак " $\otimes$ " обозначает тензорное произведение векторов, а знак " $\cdot\cdot$ " – двойное скалярное произведение тензоров. Система уравнений (2)-(5) описывает весь круг гальваномагнитных явлений в неоднородно намагниченных металлах и полупроводниках, обусловленных наличием электрического заряда и спинового момента у электронов проводимости. Следует отметить, что квантовая добавка к классической силе Лоренца $-\mu\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\left(\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \widetilde{\boldsymbol{B}}\right)$ приводит к появлению в уравнении для потока электронов $\boldsymbol{I}$ слагаемого $\frac{\mu}{m}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}} \otimes \widetilde{\boldsymbol{B}} \cdot \boldsymbol{S}$ описывающего изменение потока электронов в неоднородном магнитном поле.

Система уравнений (2)-(5) была применена к описанию спинового и зарядового транспорта в проводящих геликоидальных магнетиках. В результате было показано, что взаимодействие спинов электронов проводимости с пространственно-неоднородными эффективными магнитными полями обменного происхождения в киральных гелимагнетиках дает естественное объяснение двум спин-транспортным эффектам, получившим названия: электрический магнитокиральный эффект Штерна-Герлаха и кинетический магнитоэлектрический эффект Штерна-Герлаха [2].

Электрический магнитохиральный эффект Штерна-Герлаха – это эффект зависимости сопротивления гелимагнетика от его киральности K и взаимной ориентации магнитного поля и электрического тока вдоль оси спиновой спирали. Сопротивление гелимагнетика ρ отражающее влияние электрического магнитохирального эффекта может быть записано в виде:

$$\rho = \rho_0 + \rho_{HM} R_B\left(1 + K A_B(\boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{i})\right), \quad (7)$$

где ρ_0 – сопротивление гелимагнетика в поле перехода в ферромагнитное состояние, ρ_{HM} – абсолютная величина магнитосопротивления гелимагнетика, R_B – относительное магнитосопротивление в поле $\bar{B}$, $A_B \leq 1$ – коэффициент магнитокиральной анизотропии, зависящий от величины электрического тока и поля $\bar{B}$, для перечисленных величин были найдены конкретные выражения в терминах скоростей релаксации и характеристик гелимагнетика. $\boldsymbol{b} = \overline{\boldsymbol{B}}/\,\bar{B}$ – единичный вектор в направлении внешнего магнитного поля, $\boldsymbol{i} = -\boldsymbol{j}/j$ – единичный вектор в направлении потока электронов, $\boldsymbol{j}$ – плотность электрического тока.

Кинетический магнитоэлектрический эффект Штерна-Герлаха – это эффект возникновения намагниченности электронов проводимости вдоль оси спирали, пропорциональной приложенному току, имеющей разные направления относительно направления приложенного тока для гелимагнетиков с разной киральностью. Продольная компонента полной намагниченности гелимагнетика $\boldsymbol{\mathcal{M}}^{||}$ отражающая влияние кинетического магнитоэлектрического эффекта может быть записана в виде:

$$\boldsymbol{\mathcal{M}}^{||} = -m_B K \boldsymbol{i} + M_B \boldsymbol{b}, \quad (8)$$

где M_B – величина характеризующая намагниченность локализованных электронов и электронов проводимости зависящую от направления внешнего магнитного поля $\bar{B}$, m_B – вклад, зависящий от характеристик гелимагнетика, величины электрического тока и поля $\bar{B}$, для перечисленных величин были найдены конкретные выражения в терминах скоростей релаксации и характеристик гелимагнетика.

Электрический магнитокиральный эффект и кинетический магнитоэлектрический эффект в гелимагнетиках приводят к существованию магнито-киральной анизотропии и эффектам невзаимности в спиновом и зарядовом транспорте. Эффект магнито-киральной анизотропии выражается в том, что как сопротивления, так и продольные компоненты полной намагниченности двух гелимагнетиков с разной киральностью будут разными при прочих равных условиях. Эффект невзаимности в спиновом и зарядовом транспорте выражается в том, что как сопротивление, так и продольная компонента полной намагниченности гелимагнетика будет меняться при изменении направления протекания электрического тока относительно направления магнитного поля.

Предсказано резонансное усиление обнаруженных эффектов до гигантских величин в условиях нового физического явления, получившего название магнитокиральный кинетический резонанс. Магнитокиральный кинетический резонанс — это явление, при котором прецессия магнитных моментов электронов, возникающая из-за действия внешнего магнитного поля, происходит синфазно с изменением поперечной намагниченности геликоиды при движении электронов с дрейфовой скоростью вдоль оси геликоиды. Явление магнитокирального кинетического резонанса очень похоже на явление спинового резонанса электронов проводимости. Но вместо циркулярного внешнего магнитного поля, применяемого для наблюдения спинового резонанса, в гелимагнетиках сама спираль намагниченности действует как циркулярное магнитное поле на движущиеся вдоль оси спирали электроны проводимости.

Обнаружено возникновение эффективного времени спиновой релаксации в гелимагнетиках из-за наличия дополнительных механизмов спиновой релаксации.

Численные оценки полученных величин указывают на экспериментальную возможность наблюдения обнаруженных эффектов.

Разработаны методики определения киральности проводящих гелимагнетиков по результатам гальваномагнитных экспериментов, основанные на электрическом магнитокиральном эффекте Штерна-Герлаха и кинетическом магнитоэлектрическом эффекте Штерна-Герлаха.

Наличие в гелимагнетиках эффектов невзаимности спинового и зарядового транспорта, описанных в работе, предрасполагает к использованию их в качестве перспективных элементов новых типов невзаимных спинтронных устройств.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Спин», No. АААА-А18-118020290104-2) при частичной поддержке РФФИ (проект No. 19-02-00057).

[1] В.В.Устинов, И.А.Ясюлевич, ФММ **121**, 257 (2020).
[2] V.V.Ustinov, I.A.Yasyulevich, Phys. Rev. B **102**, 134431 (2020).

Магниторезистивный эффект в $CdAs_2$ при давлениях до 50 ГПа

Л.А.Сайпулаева[1], М.М.Гаджиалиев[1], А.Г.Алибеков[1], А.В.Тебеньков[2], Н.В.Мельникова[2], А.Н. Бабушкин[2], А.И. Риль[3], С.Ф. Маренкин[3,4], В.С. Захвалинский[5]

[1] Институт физики ДФИЦ РАН, г. Махачкала, Россия
e-mail: luizasa11@mail.ru
[2] Уральский федеральный университет, Институт естественных наук и математики, Екатеринбург Россия
[3] Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия
[4] Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия
[5] Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород, Россия

В данной работе представляем результаты исследования магниторезистивного эффекта в n-$CdAs_2$ при давлениях до 50 ГПа. Монокристаллы диарсенида кадмия получены методом направленной кристаллизации расплава по методу Бриджмена [1].

Влияние магнитного поля на электросопротивление $CdAs_2$ изучали в полях до 1 Тл. Поперечное магнитное поле прикладывали после выдержки образца под давлением до установления, не меняющегося во времени электросопротивления измерительной ячейки. Принцип создания давлений до 50 ГПа, технические характеристики и градуировка КВД описаны в деталях в [1-4].

На рисунке 1 а представлены барические зависимости относительного магнитосопротивления (MR) в различных магнитных полях для первого цикла роста давления. Для каждого фиксированного значения давления MR оценивали по следующей формуле

$$MR = 100 \cdot \frac{R(B) - R(0)}{R(0)}$$

здесь $R(B)$ и $R(0)$ –электросопротивления в поперечном магнитном поле B и в отсутствии магнитного поля соответственно (при одном и том же заданном фиксированном значении давления).

Видно (рис. 1 а), что во всём диапазоне давлений наблюдалось ОМС. По графику можно выделить две области наибольшего изменения электросопротивления в магнитном поле (отмечены стрелками). Первый пик при 26 ГПа и соответствует магниторезистивному эффекту почти 8% в

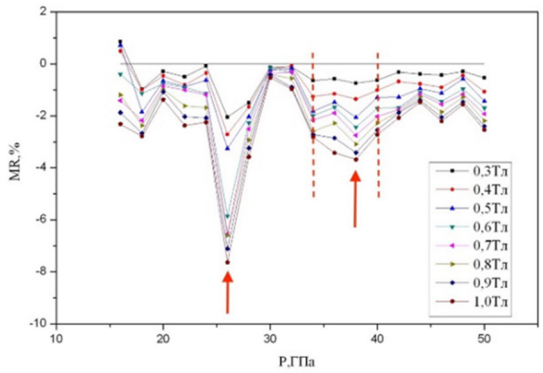


Рис.1а Зависимость магнитосопротивления от давления при различных магнитных полях, первый цикл увеличения давления

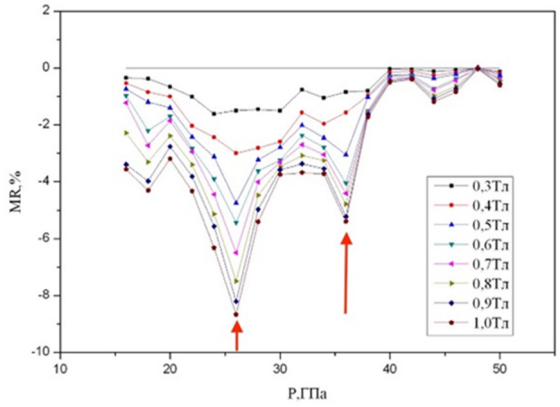


Рис.1б Зависимость магнитосопротивления от давления второй цикл увеличения давления

поле 1 Тл. Второй пик более широкий и плавный в диапазоне давлений 34-40 ГПа и значением ОМС около 4%. При втором цикле увеличения давления (рисунок 1.б) два пика сохраняются (отмечены стрелками), но меняется их форма. Первый пик, соответствующий давлению 26 ГПа становится более широким, но сохраняет свое положение и не смещается в область более низких давлений. Величина ОМС составила 9%.

Иное поведение показал второй пик. Он локализовался и стал более широким и сместился в более низкие давления до 36 ГПа. Величина ОМС выросла до 6%. Во всех экспериментах по измерению магниторезистивного эффекта $CdAs_2$ положение первого пика не менялось при циклировании давления, тенденцию к смещению в область низких давлений имел только второй пик.

В ходе экспериментов, действительно, удалось наблюдать резкое увеличение ОМС в областях давлений, предшествующих структурным изменениям в исследуемом образце. Однозначно определить природу описанного явления пока сложно. С одной стороны, мы имеем в качестве объекта исследования сильно дефектную структуру с большим градиентом механических напряжений, вызванный сжатием на наковальнях.

В отсутствие магнитного поля $CdAs_2$ переходит в низкоомное состояние при давлении порядка 25-30 ГПа (рисунок 2). После снижения давления электросопротивление образцов не возвращается в исходное состояние, что связано с необратимыми изменениями в структуре материалов.

Экспериментальное изучение ОМС в полупроводниках показало, что уменьшение сопротивления в магнитном поле не связано с такими случайными факторами, как свойства контактов, неоднородности,

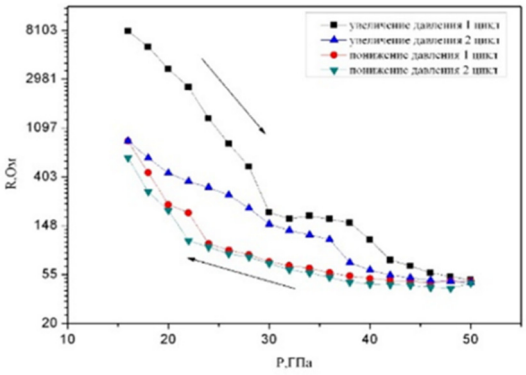


Рис. 2. Барическая зависимость электросопротивления

поверхностные свойства, наличие дислокаций и т. д., а определяется концентрацией носителей тока в нем, температурой и напряженностью магнитного поля, а в сильно легированных кристаллах и степенью компенсации примеси [5].

Согласно развитой Тояцавой модели [6], уменьшение сопротивления в магнитном поле связано с локализацией электронов в примесной зоне полупроводника вблизи водородоподобного центра. Согласно Тояцава некоторая часть уединенно расположенных примесных атомов может захватить лишний электрон и тем самым приобрести магнитный момент - так называемый локализованный спин. Между локализованными спинами и электронами проводимости возможно обменное взаимодействие. Так как спины взаимодействующих электронов могут быть и не параллельны, то при рассеянии возможна и переориентация спина, т.е. наряду с обычными механизмами появляется дополнительный неупругий механизм рассеяния. Во внешнем магнитном поле происходит ориентация спинов по полю, причем доля ориентированных по полю спинов возрастает с увеличение поля и уменьшением температуры.

А в нашем случае высокое давление действует так же, как низкая температура. Неупругий механизм рассеяния как бы частично выключается магнитным полем, что и приводит к уменьшению сопротивления кристалла и появлению ОМС и росту ОМС с ростом магнитного поля.

[1] Маренкин С.Ф., Раухман А.М., Маймасов А.Б., Попов В.А. Неорган.Материалы Т.33. №12. С.1439(1997).
[2] L.F. Vereshchagin, E.N. Yakovlev, B.V. Vinogradov, G.N. Stepanov, K.Kh. Bibaev, T.I. Alaeva, V.P. Sakun. High Temperature. –High Press. 6, 499 (1974).
[3] A.N. Babushkin, G.I. Pilipenko, F.F. Gavrilov. J. Phys.: Condens. Matter. 5, 8659 (1993).
[4] A.N. Babushkin. High Press. Res. 6, 349 (1992).
[5] Ю.В.Шмарцев, Е.Ф.Шендер, Т.А.Полянская. Физика и техника полупроводников. Т.4, N 12. С. 2311. (1970).
[6] J. Toyozawa, Phys. Jpn., 17. 986 (1962)

Влияние начальных состояний на неравновесные свойства магнитосопротивления мультислойных наноструктур

Ю.К.Евстафьева, М.В.Мамонова, В.В.Прудников, П.В.Прудников
Омский государственный университет им.Ф.М.Достоевского, Омск, Россия
e-mail: evstafievaiuk@stud.omsu.ru

Наномасштабная периодичность создает в магнитных мультислойных структурах мезоскопические эффекты сильной пространственной спиновой корреляции с медленной релаксационной динамикой намагниченности при замораживании системы в неравновесном состоянии. Экспериментальные [1] и численные [2, 3] исследования релаксации намагниченности и временного повеления корреляционных функций выявили в магнитных структурах Co/Cr и Co/Cu эффекты старения, которые характеризуются замедлением релаксационных и корреляционных свойств системы с ростом времени ожидания и проявляются не только вблизи критической температуры T_c магнитного упорядочения, как в объемных системах, но и в широком температурном интервале с $T \leq T_c$. Показано [3,4], что медленная спиновая динамика в данных структурах приводит к сложному двухвременному поведению магнитосопротивления.

Мы представляем Монте-Карло исследование неравновесного поведения наноструктур Pt/Co/Cu(001)/Co/Pt с намагниченностью, перпендикулярной плоскости пленок, с выделением особенностей влияния на их магнитосопротивление различных начальных состояний. Были рассмотрены трехпленочные магнитные структуры с толщинами ферромагнитных пленок $N = 3, 5, 7, 9$ в единицах моноатомных слоев (МС). Моделирование осуществлялось для структур с ферромагнитными пленками размером $L \times L \times N$ и наложенными периодическими граничными условиями в плоскости пленки. Значения обменных интегралов внутрислоевого взаимодействия задавались как $J_1/k_BT=1$, а межслоевого взаимодействия $J_2/J_1 = -0.1$. Температура T системы измеряется в единицах обменного интеграла J_1/k_B. Отрицательный знак J_2 указывает на антиферромагнитную (антипараллельную) ориентацию намагниченностей ферромагнитных пленок относительно друг друга, что достигается соответствующим подбором толщины немагнитной медной прослойки.

Магнитные свойства наноструктур описываются анизотропной моделью Гейзенберга [5], задаваемой для структуры с намагниченностью, перпендикулярной плоскости пленки, гамильтонианом

$$H = -\sum_{<i,j>} J_{ij}\{(1-\Delta(N))(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z\}. \qquad (1)$$

В выражении (1) $\boldsymbol{S_i} = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ – трехмерный единичный вектор спина, зафиксированный в i-ом узле ГЦК-решетки ферромагнитной пленки

(кобальта), $\Delta(N)$ – параметр, учитывающий эффективное влияние магнитной анизотропии, создаваемой межфазным взаимодействием пленок, в зависимости от ее толщины N [5].

Моделирование транспортных свойств мультислойных структур с током перпендикулярным плоскости пленок (ТПП) с использованием разработанной в [6] методики позволяет рассчитать как температурную зависимость равновесного магнитосопротивления $\delta^{(eq)}(T,N)$ [7], так неравновесную двухвременную зависимость магнитосопротивления $\delta(t, t_w)$ [3,4]. В данной работе мы изучим влияние различных начальных состояний на двухвременную зависимость ТПП магнитосопротивления.

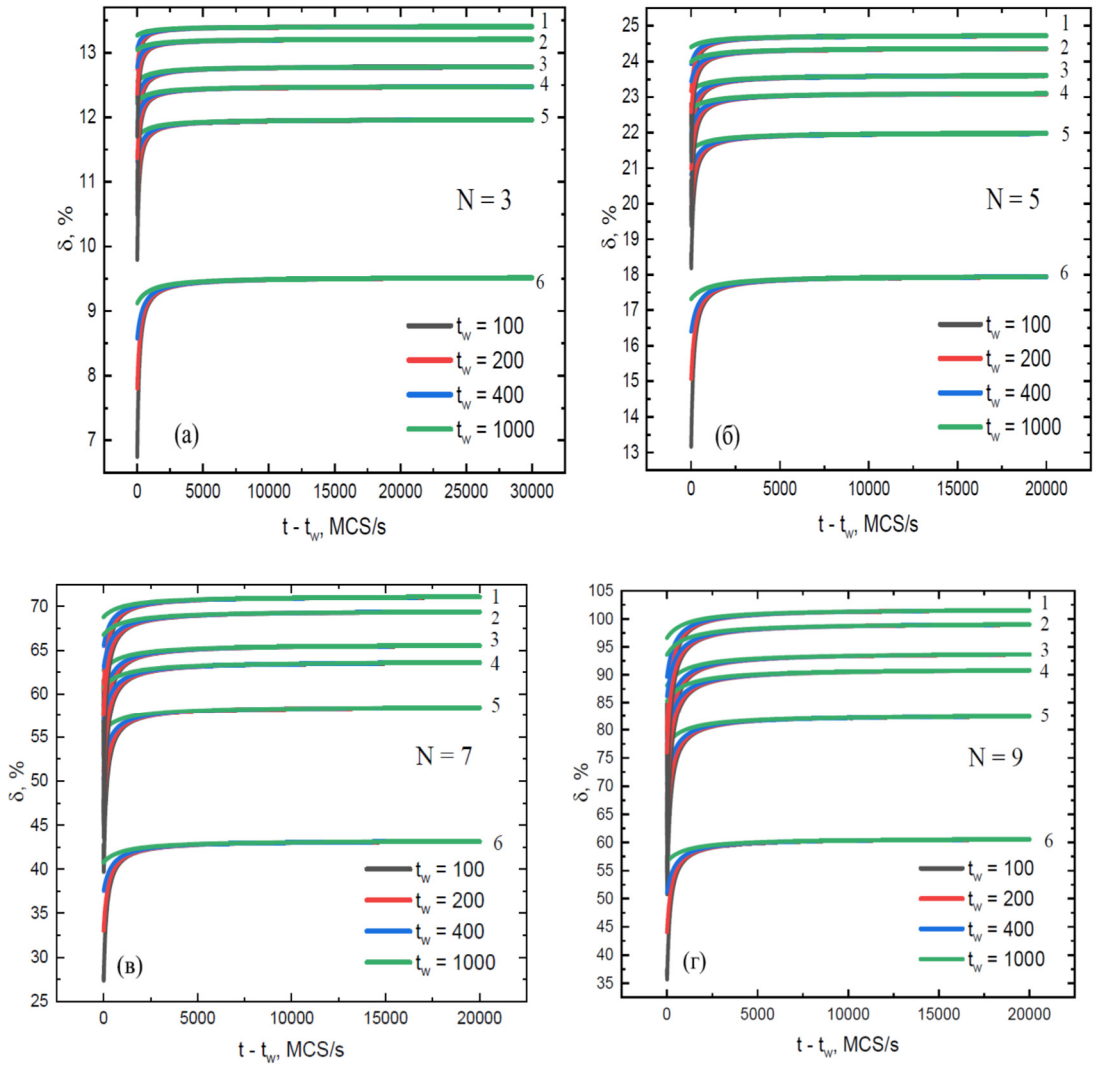


Рис. 1. Временная зависимость ТПП-магнитосопротивления в Pt/Co/Cu/Co/Pt с толщинами пленок кобальта (а) N=3, (б) N=5, (в) N=7, (г) N=9 МС при температурах $T_s=T_c(N)/4$ для времен ожидания t_w=100, 200, 400, 1000 MCS/s при эволюции из начальных состояний с температурами: 1 - $T_0=0$, 2 - $T_0(N)=T_c(N)/8$, 3 - $T_0(N)=3T_c(N)/8$, 4 - $T_0(N)=T_c(N)/2$, 5 - $T_0(N)=3T_c(N)/4$, 6 - $T_0(N) >> T_c(N)$.

В теории неравновесного поведения систем с медленной динамикой [8] выделяют высокотемпературные начальные состояния с начальной

температурой $T_0 > T_s$, где T_s – температура замораживания, при которой проводится определение характеристик системы, и низкотемпературные начальные состояния с $T_0<T_s$. Для структур с намагниченностью, перпендикулярной плоскости пленки, и толщинами ферромагнитных пленок N=3 - 9 МС были рассчитаны следующие температуры магнитного упорядочения: $T_c(N=3)$=2.5590(14), $T_c(N=5)$=3.0340(15), $T_c(N=7)$=3:1820(13) и $T_c(N=9)$=3.2784(15). В качестве температур замораживания были выбраны $T_s(N)=T_c(N)/4$, а в качестве начальных температур T_0=0 и $T_0(N)=T_c(N)/8$, задающие низкотемпературные начальные состояния, и $T_0(N)=3T_c(N)/8$, $T_0(N) = T_c(N)/2$, $T_0(N) = 3T_c(N)/4$, и $T_0(N) >> T_c(N)$, задающие высокотемпературные начальные состояния.

В результате проведенных расчетов (рис. 1) выявлено существенное влияние начальных состояний с различными температурами T_0 на временные зависимости магнитосопротивления $\delta(t, t_w)$ с проявлением в них эффектов старения, а именно зависимости магнитосопротивления от времени ожидания t_w - начала измерения магнитосопротивления. Показано, что временная зависимость магнитосопротивления в долговременном режиме выходит на плато с асимптотическими значениями $\delta^\infty(N,T_0,T_s)$, зависящими от температур T_0 начального состояния, температур замораживания T_s, толщины ферромагнитных пленок N и типа магнитной анизотропии в наноструктурах. Наибольшими асимптотическими значениями магнитосопротивления $\delta^\infty(N,T_0,T_s)$ для структур с фиксированными N и T_s характеризуются случаи, полученные при эволюции системы из полностью упорядоченного начального состояния с T_0=0, а наименьшими $\delta^\infty(N,T_0,T_s)$ - из неупорядоченного начального состояния с $T_0(N) >> T_c(N)$. Случаи с промежуточными начальными температурами $T_0(N)=T_c(N)/8$, $3T_c(N)/8$, $T_c(N)/2$ и $3T_c(N)/4$ характеризуются значениями $\delta^\infty(N,T_0,T_s)$, лежащими в интервале между значениями, соответствующими предельным начальным состояниям, и последовательно уменьшающимися с ростом $T_0(N)$.

Отметим, что времена выхода магнитосопротивления $\delta(t, t_w)$ на плато уменьшаются с ростом времени ожидания t_w и увеличиваются с ростом толщины ферромагнитных пленок N в структуре, характеризуясь для t_w = 100 MCS/s значениями t - t_w выхода на плато равными 4000 MCS/s для структур с N=3 МС и 6000 MCS/s для структур с N = 9 МС, в то время как для t_w = 1000 MCS/s эти значения соответственно равны 3000 MCS/s для структур с N=3 МС и 5000 MCS/s для структур с N = 9 МС.

Введем в рассмотрение абсолютную шкалу температур, задаваемую через величину интеграла обменного взаимодействия $J_1= 4.4\cdot10^{-14}$ эрг для кобальта, рассчитанного в приближении среднего поля. На рис. 2 представлены результаты исследования влияния начальной неравновесности $|\Delta T|= |T_s – T_0| = 100$ K на асимптотические значения магнитосопротивления $\delta^\infty(N,T_0,T_s)$ при T_s = 100 K и 300 K для структуры с

N=5 МС. Видно, что изменения $\Delta\delta^{\infty} \approx 6$ % для T_s = 100 K и $\Delta\delta^{\infty} \approx 1$ % для T_s= 300 K, т.е. $\Delta\delta^{\infty}$ заметно уменьшаются с ростом T_s.

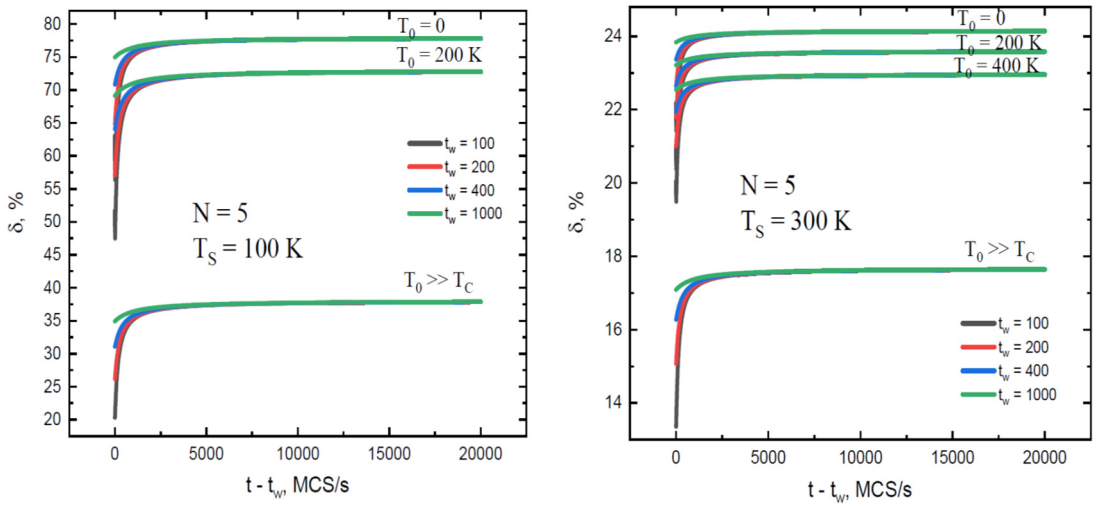


Рис. 2. Временная зависимость ТПП-магнитосопротивления в Pt/Co/Cu/Co/Pt с толщинами пленок кобальта N=5 МС при температурах T_s=100 K (слева) и T_s=300 K (справа) при эволюции из начальных состояний с T_0=0, 100, 200, 400 K и T_0 >> T_c.

Существование данных неравновесных эффектов несомненно надо учитывать при практическом использовании магнитных наноструктур в качестве элементов приборов спинтроники с эффектом ГМС.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ.

[1] T.Mukherjee, M.Pleimling, C.Binek, Phys. Rev. B **82**, 134425 (2010).
[2] В.В.Прудников, П.В.Прудников, А.Н.Пуртов, М.В.Мамонова, Письма в ЖЭТФ, **104**, 797 (2016).
[3] V.V.Prudnikov, P.V.Prudnikov, M.V.Mamonova, M.M.Firstova, A.A. Samoshilova, J. Phys. Commun., **3**, 015002 (2019).
[4] В.В. Прудников, П.В. Прудников, М.В. Мамонова, ЖЭТФ. **154**, 855 (2018).
[5] P.V.Prudnikov, V.V.Prudnikov, M.A.Menshikova, N.I.Piskunova, JMMM **387**, 77 (2015).
[6] В.В. Прудников, П.В. Прудников, Д.Е.Романовский, Письма в ЖЭТФ **102**, 759 (2015).
[7] P.V.Prudnikov, V.V.Prudnikov, M.V.Mamonova, N.I.Piskunova, JMMM **482**, 201 (2019).
[8] В.В. Прудников, П.В.Прудников, М.В. Мамонова, УФН **187**, 817 (2017).

Кинетические эффекты в гольмий марганцевых сульфидах

О.Б.Романова [1], М.Н. Ситников [2] ,С.С.Аплеснин [1,2], Л.В.Удод [1,2]
[1]*Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия*
[2]*Сибирский государственный университет науки и технологий им. ак. М.Ф. Решетнева, Красноярск, Россия*
e-mail: rob@iph.krasn.ru

Халькогениды марганца Mn(S, Se, Te) и синтезированные на их основе твердые растворы являются перспективными материалами для исследования таких явлений, как переход металл-диэлектрик, магниторезистивный эффект, магнитоимпеданс и термоэдс [1-2]. И находят широкое практическое применение в химической промышленности, интенсивно развивающейся спинтронике, и используются, при создании энергосберегающих устройств. Исследования, проведенные ранее [3] показали, что замещение ионов марганца редкоземельным элементом приводит к электронному допированию и вырождению t_{2g} орбиталей, которое снимается за счет сильных электронных корреляций.

Цель данной работы установить влияние катионной подсистемы в области протекания по концентрации иона гольмия на кинетические свойства твердых растворов $Ho_XMn_{1-X}S$ с ($0.1 \le X \le 0.2$).

В работе проводился анализ механизма проводимости по Мотту, Пула-Френкеля и Ома на основании вольт - амперных характеристик (ВАХ), измеренных в интервале температур 80-500 К в нулевом магнитном поле и в поле 12 кЭ. Выше 360К для концентрации X=0.1 механизм проводимости описывается законом Мотта. Зависимости *I(U)* становятся линейными и подчиняются закону Ома для X=0.2.

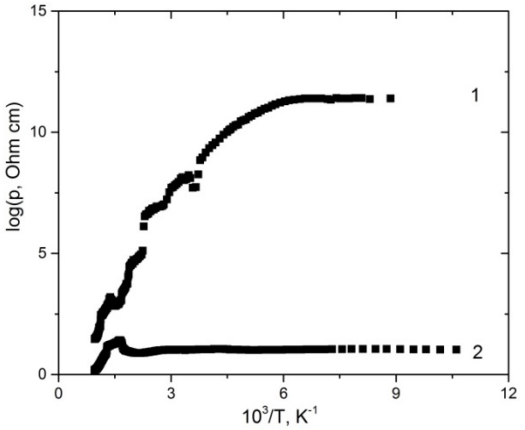


Рис.1 Температурные зависимости удельного электросопротивления образцов $Ho_XMn_{1-X}S$ с X=0.1(1) и X=0.3 (2)

Исследована температурная зависимость удельного сопротивления в интервале температур 77-1000К в нулевом магнитном поле при разных концентрациях замещения (Рис.1). Величина удельного сопротивления $Ho_XMn_{1-X}S$ с ростом содержания гольмия уменьшается в шесть раз. Обнаруженные скачки в сопротивлении по температуре, возможно обусловленные движением уровня Ферми в запрещенной зоне в результате локальных деформаций октаэдров.

Обнаружено влияние магнитного поля на величину удельного электросопротивления системы $Ho_xMn_{1-x}S$, которое с ростом концентрации усиливается. Относительное изменение сопротивление (ΔR) в магнитном поле вычислено по формуле $\delta_H = \frac{R(H)-R(0)}{R(0)} 100\%$, где $R(H)$ – электросопротивление в магнитном поле, а $R(0)$- без поля и представлено на рис. 2. Отрицательное магнитосопротивление наблюдается в области магнитного фазового перехода. С ростом температуры значения магнитосопротивления увеличивается и меняет знак на положительный.

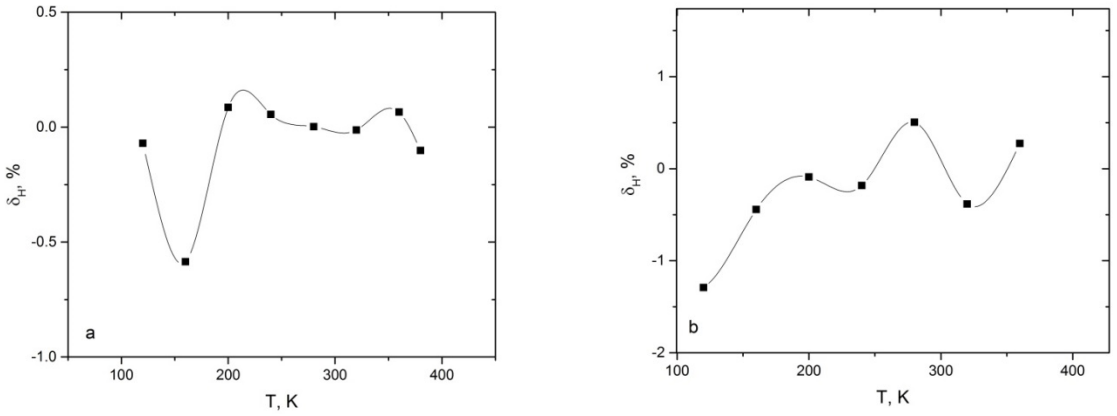


Рис.2 Температурные зависимости магнитосопротивления образцов $Ho_XMn_{1-X}S$ с X=0.1(a) и X=0.2 (b).

Максимальное изменение импеданса в магнитном поле для $Ho_{0.1}Mn_{0.9}S$, наблюдается в высокотемпературной области. Так при температуре 270К ΔZ имеет положительные значения с максимальным значением 5%, а при 300К знак магнитоимпеданса меняется на отрицательный и ΔZ составляет -4%.

Таким образом, в системе $Ho_XMn_{1-X}S$ обнаружены эффекты магнитосопротивления и магнитоимпеданса в области протекания по концентрации редкоземельного иона и изменение типа проводимости.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Красноярского края, в рамках научного проекта № РФФИ № 20-42-243002 р_мол_а «Управление транспортными характеристиками в полупроводниках под действием индуцированной электрической поляризации».

[1] S.S. Aplesnin, O.B. Romanova, et. al., J. Appl. Phys. **121**, 075701 (2017).
[2] O.B. Romanova, S.S. Aplesnin, et. al, J. Appl. Phys. **125**, 175706 (2019).
[3] О.Б. Романова, С.С. Аплеснин, М.Н. Ситников, Л.В. Удод, ЖЭТФ **159**, 1 (2021).

Магниторезистивные и магнитоимпедансные эффекты в $Mn_{1-x}Yb_xS$

А.М. Харьков, М.Н. Ситников, А.В. Гельгорн, О.С. Никитинский
Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М.Ф. Решетнева, Красноярск, Российская Федерация,
e-mail: kineru@mail.ru

В настоящее время активно исследуются полупроводники, обнаруживающие эффект магнитосопротивления и магнитоимпеданса для спинтронных устройств и сенсорных датчиков. В качестве перспективных материалов исследуем магнитные полупроводники на основе сульфидов марганца замещенных редкоземельными элементами с переменной валентностью, например ион иттербия в зависимости от локального окружения и типа решетки может находится в двух и трех валентном состоянии. Влияние магнитного поля на транспортные характеристики обусловлено как на зарядовые, так и на спиновые степени свободы электрона [1].

Цель исследования установить магниторезистивные и магнитоимпедансные эффекты при замещении катионов марганца ионами иттербия.

Влияние магнитного поля на транспортные характеристики исследовалось на основе ВАХ, измеренных без магнитного поля H=0 и в магнитном поле H=12kOe приложенном перпендикулярно образцу $Mn_{1-x}Yb_xS$, с x=0.2 при T=120K, 240K, 280K [2].

Соединения, содержащие элементы с переменной валентностью, обнаруживают электронные фазовые переходы. В окрестности электронного фазового перехода возможна смена механизма проводимости Мотта на механизм проводимости Пула-Френкеля, который можно установить из ВАХ. В области температур, где наблюдается зарядовое упорядочение, проводимость описывается в модели токов, ограниченных пространственным зарядом и описывается квадратичным законом Мотта [3]:

$$j = \frac{9}{8}\tau_\mu \sigma_0 \mu \frac{U^2}{L^3} \qquad (1)$$

где, j – плотность тока, τ_μ– Максвелловское время релаксации, σ_0 – электропроводность в объеме материала в отсутствии инжекции носителей заряда, μ – подвижность носителей заряда, U – приложенное напряжение, L – толщина образца.

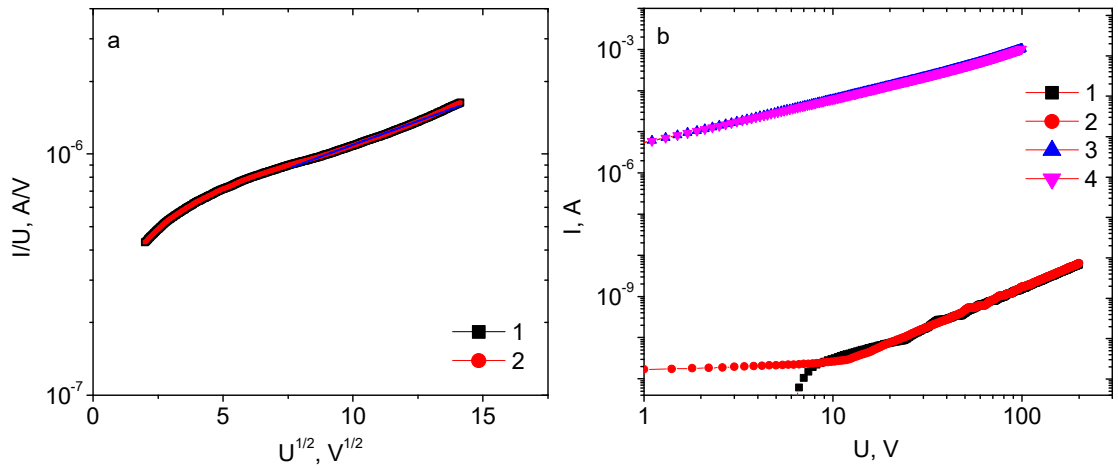


Рис. 1. (a) – Логарифмическая зависимость I(U) от $U^{1/2}$ для образца $Mn_{0.8}Yb_{0.2}S$ без поля H=0 (1) и в магнитном поле H=12kOe (2) при T=240K. (b) – Логарифмическая зависимость тока от приложенного напряжения для образца $Yb_{0.2}Mn_{0.8}S$ без поля H=0 (1) и магнитном поле H=12kOe (2) при T=120K; без поля H=0 (3) и магнитном поле H=12kOe (4) при T=280K.

На рис.1b представлены экспериментальные данные ВАХ без поля и в магнитном поле в логарифмических координатах, которые хорошо описываются законом Мотта (1) при T=120K, а на рис.1a при T=240K преобладает механизм проводимости Пула-Френкеля (2), согласно которому сильное электрическое поле, приложенное к образцу, меняет вид потенциальных барьеров для носителей заряда между атомами кристаллической решетки [4]. Это приводит к увеличению количества электронов в образце за счет преодоления потенциального барьера. Ток в этом случае экспоненциально зависит от напряжения:

$$I = e\mu n_0 \frac{U}{L} \exp \frac{\beta U^{1/2}}{kTL^{1/2}} \qquad (2)$$

где, e – заряд электрона, μ – подвижность носителей заряда, n_0 – концентрация электронов в зоне проводимости в отсутствии поля, U – приложенное напряжение, k – постоянная Больцмана, β – постоянная Пула-Френкеля, зависящая от ε – диэлектрической проницаемости полупроводника. Обнаружено, магнитное поле не влияет на смену механизма проводимости и на величину электросопротивления.

На рис. 2 приведена температурная зависимость реактивного сопротивления на двух частотах 10 и 100 kHz, которые испытывают корреляции с диэлектрическими измерениями.

В соединениях $Mn_{1-x}Yb_xS$ находятся два типа носителей тока: электроны и дырки, которые формируют зарядовое упорядочение, изменение которого по температуре определили из импеданса и сопротивления на переменном токе.

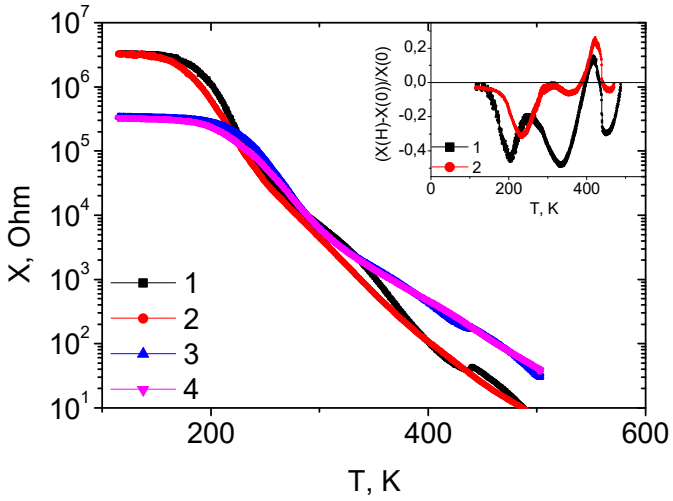


Рис. 2. Температурные зависимости реактивного сопротивления X для образца $Mn_{0.8}Yb_{0.2}S$ измеренные в нулевом магнитном поле на частотах ω=10 kHz (1), 100 kHz (3) и в магнитном поле H=12 kOe на частотах ω=10 kHz (2), 100 kHz (4). Вставка: Температурные зависимости относительного изменения реактивной части импеданса (X(H)–X(0))/X(0) в магнитном поле H = 12 kOe на частотах: 10 kHz (1), 100 kHz (2).

На рис. 2 представлена реактивная часть импеданса X(T) от температуры для x=0.2. Обнаружено два скачка в импедансе при T=124 K для частот ω ≥ 5 kHz и T=156 K для частот ω ≥ 100 kHz. В этом интервале температур в результате конкуренции обменного и спин-орбитального взаимодействия меняется волновой вектор зарядового упорядочения, что приводит к уменьшению емкости. В области высоких температур импеданс обусловлен активным сопротивлением. При T=478 K небольшой максимум R(T) не зависит от частоты и вызван рассеянием носителей тока на структурных деформациях областей с ионами иттербия. Проводимость на переменном токе является релаксационной и имеет максимумы сопротивления при температурах, зависящих от частоты. Локализация примесных электронов в 3d- оболочке ниже 350 K формирует электронно-релаксационную поляризацию. Время релаксации данного механизма поляризации определим из компонент импеданса в модели Дебая:

$$\mathrm{Re}\, Z(\omega) = \frac{A}{1+(\omega\tau)^2} \qquad Im\, Z(\omega) = \frac{A\omega\tau}{1+(\omega\tau)^2} \tag{3}$$

где время релаксации τ удовлетворяет закону Аррениуса $\tau=\tau_0 \exp(-\Delta E/kT)$ с ΔE =0.19 eV, τ_0 = 3 GHz. Импеданс имеет активационную зависимость $Z=Z_0\exp(-\Delta E/kT)$ в интервале температур 240-350 K с энергией активации ΔE=0.218 eV. Реактивная часть импеданса при низких температурах убывает по степенному закону $\mathrm{Im}(Z(T=100K))/\mathrm{Im}(Z(T=400K))=\omega_c/\omega$, где $\omega_c = 3\cdot10^6$ Hz. Электронно-релаксационная поляризация отсутствует на частотах $\omega > \omega_c$ и соответственно исчезают коррелированные зарядовые флуктуации [4].

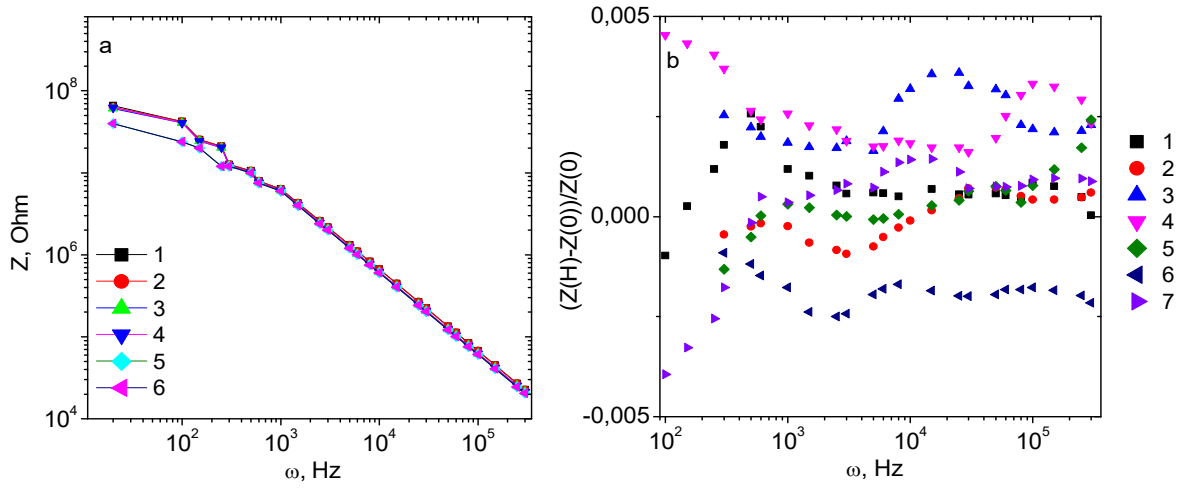


Рис. 3. (a) – Логарифмическая зависимость импеданса Z от частоты ω без магнитного поля H=0 при T = 120K (1), 240K (3), 320K (5) и в магнитном поле H=12kOe при T = 120K (2), 240K (4), 320K (6). (b) – Зависимость магнитоимпеданса (Z(H)–Z(0))/Z(0) от частоты ω при T = 80K (1), 120K (2), 160K (3), 200K (4), 240K (5), 280K (6), 320K (7) (b) для образца $Mn_{0.8}Yb_{0.2}S$.

Обнаружено, что магнитное поле не влияет на смену механизма проводимости и на величину электросопротивления.

На рис. 3a показана логарифмическая зависимость импеданса Z от частоты ω без магнитного поля H=0 и в магнитном поле H=12kOe в области температур 80K–360K. Импеданс хорошо описывается степенной функцией $Z=1/\omega^nC$, где n – показатель степени, который практически не зависит от температуры, n=1±0.05 [5]. В магнитном поле импеданс незначительно возрастает и величина магнитоимпеданса δ(Z)=(Z(H)–Z(0))/Z(0) составляет 0.5% (рис. 3b).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 20-42-243002 р_мол_а и гранта Президента РФ № МК-620.2021.1.2.

[1] S.S. Aplesnin, A.M. Kharkov et al., JMMM., **352**, 1 (2014).
[2] S.S. Aplesnin, M.N. Sitnikov et al., Bulletin of the RAS, Physics, **77**, 1252 (2013).
[3] N.F. Mott, E.F. Davis. Electronic Processes in Non-Crystalline Materials, Oxford (1971).
[4] S.S. Aplesnin, M.N. Sitnikov et al., JMMM., **513**, 167104 (2020).
[5] J.R. Macdonald, Electrochimica Acta. **35**, 1483 (1990).

Магнитосопротивление в электрически неоднородных твердых растворах $Lu_xMn_{1-x}S$

М.Н. Ситников, А.М. Харьков, О.Б. Бегишева, Н.А. Черемных
Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М.Ф. Решетнева, Красноярск, Российская Федерация
e-mail: kineru@mail.ru

Для современной микроэлектроники актуальна оптимизация средств записи-считывания информации на носитель. Одним из методов записи-считывания информации основывается на магниторезистивном эффекте, который наблюдается в магнитоупорядоченных материалах. Магниторезистивный эффект существует в материалах с волной зарядовой плотности [1], в Пайерловских системах. Разновалентные замещение в полупроводниках может также индуцировать волну зарядовой плотности, пиннинг которой зависит от магнитного поля и плотности дисклинаций, доменных границ. Подобная ситуация может реализоваться в твердых растворах $Lu_xMn_{1-x}S$, где ион Mn^{2+} заменяется Lu^{3+}. Заряженные доменные границы определим из импедансной спектроскопии [2]. Время релаксации носителей заряда из годографа импеданса.

Влияние магнитного поля на транспортные характеристики исследовалось на основе ВАХ, измеренных без поля и в магнитном поле H=12 кЭ. Электросопротивление, измеренное четырехзондовым методом, в интервале температур 80-400 К имеет максимум в области 260-276 К. В этой области температур исчезает поглощение на частоте 3400 $см^{-1}$, которая связывается с заряженной вакансией в анионной подсистеме. На Рис.1 представлено магнитосопротивление $\Delta R=(R(H)-R(0))/R(0)$ для двух составов $Lu_xMn_{1-x}S$.

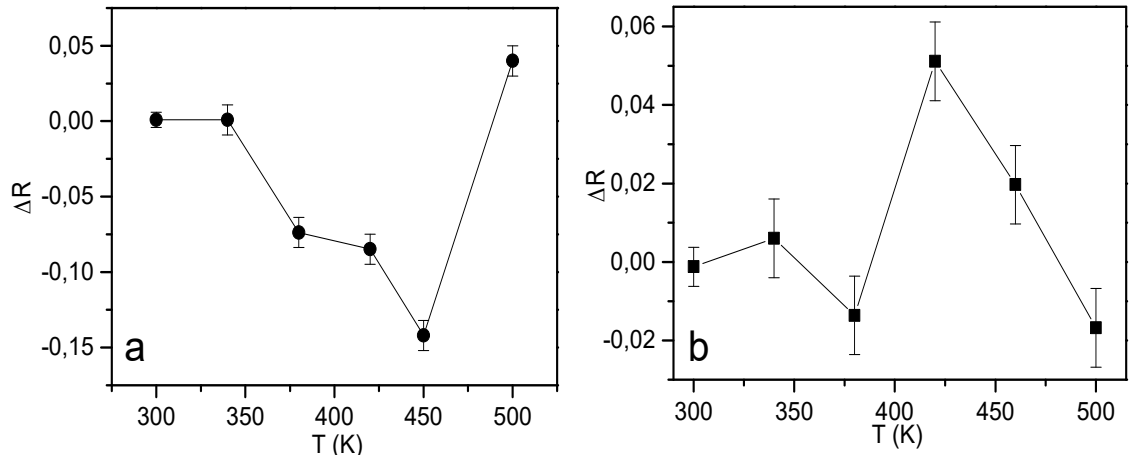


Рис. 1. Относительное изменение магнитосопротивления от температуры для твердого раствора $Lu_xMn_{1-x}S$ для концентрации x=0.1(a) при напряжении U=195V и для концентрации x=0.2(b) при напряжении U=100-195V.

Для образцов с меньшей концентрацией протекания x_c=0.17 для ГЦК решетки сопротивление возрастает в магнитном поле на 5-7% и в области температур 420-460 К. Для x=0.2 сопротивление уменьшается на 15% в магнитном поле. Это связано с образованием химического электронного фазового расслоения в области температур 400-450 К, где импеданс от температуры имеет максимум, который смещается в область высоких температур с ростом частоты.

Образование фазового расслоения приводит к сжатию решетки и к росту потенциального барьера. Появление областей с разной проводимостью являются причиной роста сопротивления в магнитном поле на основе эффекта Максвелла-Вагнера. Неоднородность играет аналогичную роль в dc магнитотранспортных свойствах в неупорядоченных средах, так как здесь смешиваются Холловское сопротивление с продольными компонентами проводимости, что приводит к линейной зависимости магнетосопротивления от магнитного поля. Система электрически неоднородна с локальной электрической поляризацией, которая компенсируется свободными носителями тока и вызывает волну зарядовой плотности в образце. В магнитном поле скорость скольжения волны уменьшается и соответственно уменьшается рассеяние носителей тока на волне зарядовой плотности в $Lu_{0.2}Mn_{0.8}S$.

Основной вклад в импеданс обусловлен реактивной частью и зависимость импеданса от частоты обратно пропорционально частоте в интервале 10^2 -10^6 Hz. Магнитоимпеданс $\Delta Z=(Z(H)-Z(0))/Z(0)$ от частоты представлен на (Рис. 2). И в интервале температур 420-450 К магнитоимпеданс меняет знак при нагревании, с отрицательного на положительный (Рис. 2 b).

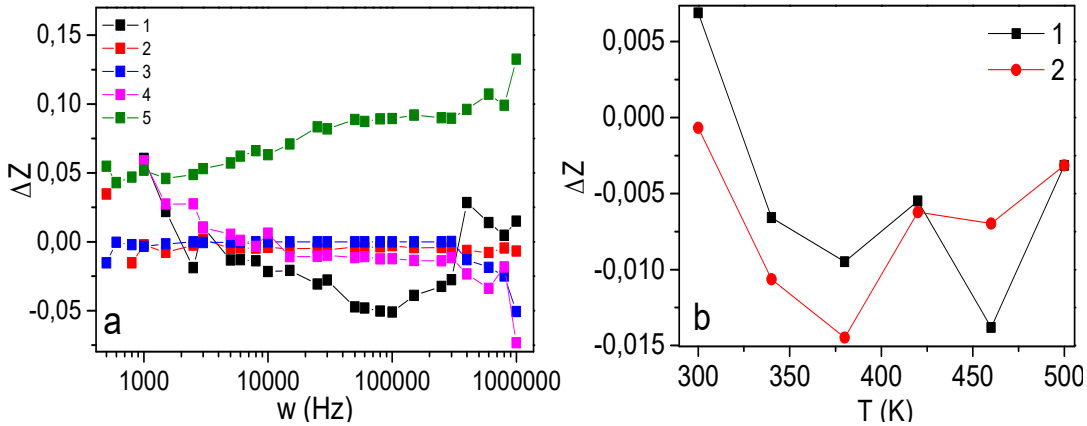


Рис. 2. Относительное изменение импеданса в магнитном поле от частоты (a) для x=0.2 при температуре T=300(1), 340(2), 380(3), 420(4), 460(5). Изменение магнитоимпеданса dZ для концентрации x=0.1 для частот ω=1 kHz(1) и ω=10 kHz(2).

Годограф импеданса описывается в модели эквивалентных схем с колебательным контуром, состоящим из сопротивления и емкости, где емкость обусловлена нанокластерами LuS. В области высоких частот, для

x=0.2, добавляется линейный вклад в импеданс. Этот элемент моделирует импеданс линейного диффузионного процесса, протекающего в однородном слое с конечной толщиной. Импеданс при этом процессе зависит от сопротивления, коэффициента диффузии частиц и толщины диффузионного слоя Нернста. При высоких частотах экспериментальные данные хорошо аппроксимируется линейной диаграммой импеданса Варбурга. Диффузионный вклад приводит к уменьшению импеданса в магнитном поле. Выше 420 К диффузионный вклад исчезает.

Для концентраций $X < X_c$ найден гистерезис электрической поляризации, остаточная поляризация, которая исчезает при $T > 280$ К. Поляризация связана с накоплением заряда на интерфейсе Lu-S. Гистерезис поляризации проявляет зависимость от внешнего магнитного поля.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ № МК-620.2021.1.2

[1] R.V. Coleman, M.P. Everson, H.-A. Lu, A. Johnson, L.M. Falicov, Phys. Rev. B **41**, 460-489 (1990).
[2] S.S. Aplesnin, L.V. Udod, M.N. Sitnikov et al., Materials Research Express **5**, 115202 (2018).

Низкотемпературная проводимость и намагниченность полупроводниковых твердых растворов $(Pb_zSn_{1-z})_{0.84}In_{0.16}Te$

Д.В.Денисов, Н.Ю.Михайлин, Д.В.Шамшур, Р.В.Парфеньев
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021 Политехническая 26, Санкт-Петербург, Россия
e-mail: d-shamshur@yandex.ru

Исследованы низкотемпературные особенности магнитополевых и температурных зависимостей намагниченности m(H, T) и удельного сопротивления ρ(H, T) в полупроводниковых твердых растворах $(Pb_zSn_{1-z})_{0.84}In_{0.16}Te$ с различным содержанием свинца z = 0.3 и 0.6. Из анализа экспериментальных данных было выдвинуто предположение об изменении характера проводимости в материале с увеличением количества свинца в твердом растворе: в $(Pb_{0.3}Sn_{0.7})_{0.84}In_{0.16}Te$ при T < 4.2 K наблюдается объемная сверхпроводимость (СП), в то время как зависимости ρ(H) и m(H) для $(Pb_{0.6}Sn_{0.4})_{0.84}In_{0.16}Te$ характерны для материалов с поверхностной проводимостью.

Примесь In в непрерывном ряде полупроводниковых твердых растворов $Pb_zSn_{1-z}Te$:In образует полосу глубоких примесных квазилокальных состояний E_{In} в зонном спектре соединения, фиксирующую положение уровня Ферми E_F носителей заряда [1]. Увеличение количества свинца в твердом растворе приводит к смещению примесной полосы E_{In} (и уровня Ферми E_F) из валентной зоны SnTe в зону проводимости PbTe; в $(Pb_zSn_{1-z})_{1-x}In_xTe$ при легировании $N_{In} \approx 1$ - 2 ат. % и содержании свинца $0.78 < z < 0.72$ реализуется бесщелевое состояние [2, 3].

Необходимо отметить, что в $(Pb_zSn_{1-z})_{1-x}In_xTe$ СП переход осуществляется при критических параметрах - температуре T_c и магнитном поле СП перехода H_{c2} - на порядок больших, по сравнению с другими полупроводниковыми соединениями [1] при сравнимых концентрациях носителей заряда. Соединения $(Pb_zSn_{1-z})_{1-x}In_xTe$ при определенных условиях могут проявлять свойства топологических кристаллических изоляторов, что обуславливает дополнительный интерес к данному материалу [4].

На рисунке 1а представлены температурные зависимости удельного сопротивления ρ(T) в образцах с содержанием свинца z = 0.3 и 0.6 при T < 4 K. В твердом растворе $(Pb_{0.3}Sn_{0.7})_{0.84}In_{0.16}Te$ наблюдается переход в СП состояние с температурой перехода T_c = 3.64 K, определенной на уровне $\rho(T) = 0.5\rho_N$, где ρ_N – сопротивление в нормальном состоянии перед СП переходом. На этом же графике представлена зависимость ρ(T) для образца $(Pb_{0.6}Sn_{0.4})_{0.84}In_{0.16}Te$, в котором наблюдается падение сопротивления до величины ρ = 0.004 Ohm*cm, по характеру схожее с СП переходом при температуре $T_c \sim 2.89$ K, размытым на $\Delta T(0.1\rho_N - 0.9\rho_N) \sim 1.4$ K. Зависимости удельного сопротивления в магнитном поле ρ(H), представленные на

рисунке 1б для $(Pb_{0.3}Sn_{0.7})_{0.84}In_{0.16}Te$, подтверждают наличие СП перехода в образце. В то же время рост удельного сопротивления в зависимости ρ(H) для твердого раствора $(Pb_{0.6}Sn_{0.4})_{0.84}In_{0.16}Te$ характерен для материалов с проводимостью по поверхностным состояниям [4].

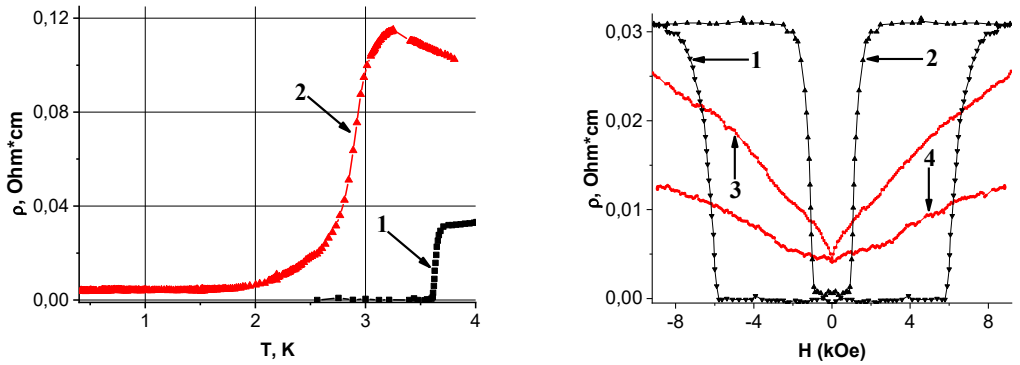


Рис. 1, а. Температурные зависимости удельного сопротивления ρ(T) в образцах $(Pb_zSn_{1-z})_{0.84}In_{0.16}Te$ с различным содержанием свинца z = 0.3 (1) и 0.6 (2); б. Магнитополевые зависимости удельного сопротивления ρ(H) при T = 3 K (1), T = 3.5 K (2) в образце $(Pb_{0.3}Sn_{0.7})_{0.84}In_{0.16}Te$ и при T = 0.4 K (3), T = 1.5 K (4) в образце $(Pb_{0.6}Sn_{0.4})_{0.84}In_{0.16}Te$

Также, нами были исследованы низкотемпературные зависимости намагниченности от магнитного поля (рис. 2а, б; 3а, б) и температуры m(H, T) (рис. 4) в изученных материалах. В образце $(Pb_{0.3}Sn_{0.7})_{0.84}In_{0.16}Te$ в СП состоянии, помимо гистерезиса при вводе-выводе магнитного поля H, связанного с захватом магнитного потока образцом, наблюдается дополнительный экстремум вблизи H_{c2} на зависимости m(H) - пик-эффект, подробно изученный в работе [5].

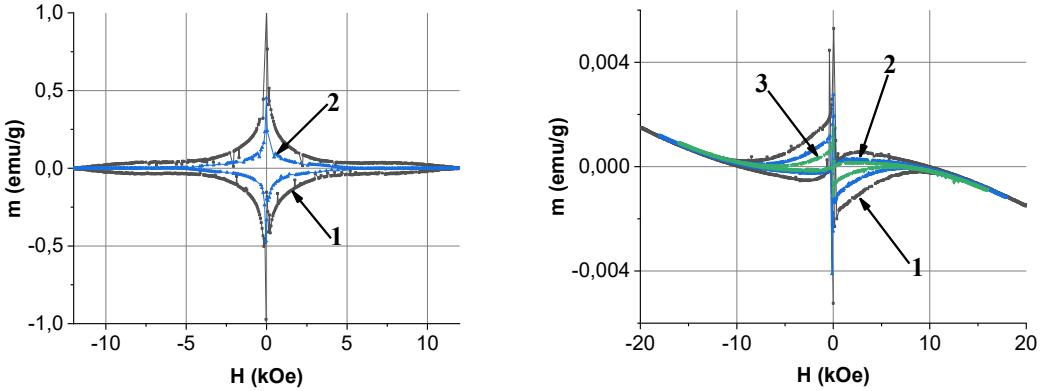


Рис. 2а. Магнитополевые зависимости намагниченности m(H) при температурах T = 2 K (1) и T = 2.8 K (2) в образце $(Pb_{0.3}Sn_{0.7})_{0.84}In_{0.16}Te$; б. Магнитополевые зависимости намагниченности m(H) при температурах T = 2 K (1), T = 2.2 K (2), T = 2.4 K (3) в образце $(Pb_{0.6}Sn_{0.4})_{0.84}In_{0.16}Te$

Как следует из экспериментальных данных рисунка 2а, б, на магнитополевых зависимостях намагниченности m(H) в

$(Pb_{0.6}Sn_{0.4})_{0.84}In_{0.16}Te$ наблюдается уменьшение магнитного отклика образца на 3 порядка по сравнению с $(Pb_{0.3}Sn_{0.7})_{0.84}In_{0.16}Te$.

Зависимость m(H) в образце$(Pb_{0.6}Sn_{0.4})_{0.84}In_{0.16}Te$ при T = 300 K носит диамагнитный характер, который сохраняется при понижении температуры

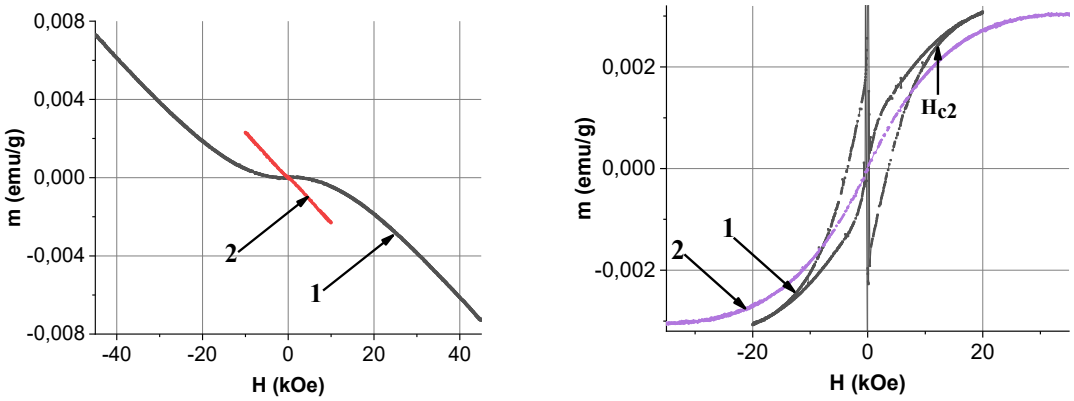


Рис. 3а. Магнитополевые зависимости намагниченности m(H) при температурах T = 3 K (1), T = 300 K (2) в образце $(Pb_{0.6}Sn_{0.4})_{0.84}In_{0.16}Te$. б. Магнитополевые зависимости намагниченности m(H) после вычитания диамагнитного вклада при различных температурах T = 2 K (1), T = 3 K (2) в образце $(Pb_{0.6}Sn_{0.4})_{0.84}In_{0.16}Te$

до T < 3 K в полях H > 26 kOe. На рисунке 3б представлены кривые, полученные после вычитания диамагнитного вклада (кривая 2 рис. 3а) из низкотемпературных зависимостей m(H). На графиках можно выделить два эффекта: парамагнитный вклад, выходящий на насыщение, который может быть вызван влиянием поверхностных состояний, и гистерезис, возможно, связанный с поверхностной сверхпроводимостью $(Pb_{0.6}Sn_{0.4})_{0.84}In_{0.16}Te$.

На рисунке 4 представлены температурные зависимости намагниченности m(T), полученные в магнитном поле H = 0.5 kOe в режиме охлаждения в нулевом магнитном поле (ZFC). В образце $(Pb_{0.3}Sn_{0.7})_{0.84}In_{0.16}Te$ с понижением температуры ниже критической $T_c(H)$ наблюдается характерная для сверхпроводника второго рода картина – увеличение абсолютного значения диамагнитного отклика образца. Зависимость m(T) для твердого раствора $(Pb_{0.6}Sn_{0.4})_{0.84}In_{0.16}Te$ ведет себя схожим образом, однако величина намагниченности уменьшается на 3 порядка, что также может говорить о наличии поверхностной сверхпроводимости.

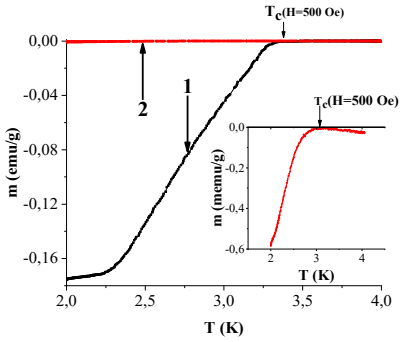


Рис. 4 Температурные зависимости намагниченности m(T) при фиксированном магнитном поле H = 0.5 kOe в образцах с различным содержанием свинца z = 0.3 (1) и 0.6 (2)

Исходя из предположений, что на представленных выше графиках

наблюдается переход соединений в СП состояние, были определены его критические параметры в образцах $(Pb_{0.3}Sn_{0.7})_{0.84}In_{0.16}Te$ и $(Pb_{0.6}Sn_{0.4})_{0.84}In_{0.16}Te$. На рисунке 5 представлены зависимости их критического магнитного поля от температуры при $T < T_c$. Зависимость $H_{c2}(T)$, экстраполированная к H = 0 kOe использовалась для определения критической температуры СП перехода T_{cm}, и критического магнитного поля H_{c2}, экстраполированного к T = 0 K в соответствии с формулой $H_{c2}(0) = 0.69*T_c*|dH_{c2}/dT|\,\big|_{T\to Tc}$. Полученные из обработанных экспериментальных зависимостей данные приведены в таблице 1.

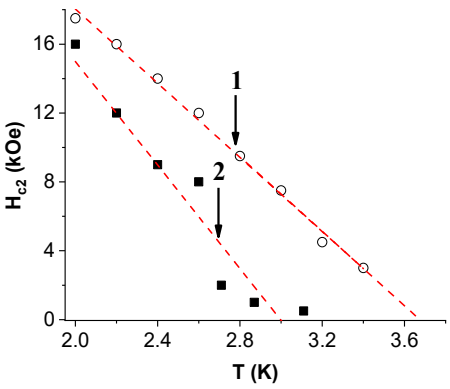


Рис. 5 Зависимости критического магнитного поля от температуры $H_{c2}(T)$ в образцах $(Pb_zSn_{1-z})_{0.84}In_{0.16}Te$ с различным содержанием свинца z = 0.3 (1) и 0.6 (2).

Таблица 1. T_c и T_{cm}, – температура СП перехода $(Pb_zSn_{1-z})_{0.84}In_{0.16}Te$ с различным содержанием свинца z = 0.3 и 0.6 из резистивных и магнитных измерений, соответственно; $H_{c2}(0)$ – экстраполяция критического магнитного поля к T = 0 K.

	T_c, K	T_{cm}, K	$\lvert dH_{c2}/dT\rvert_{T\to Tc}$, kOe/K	$H_{c2}(0)$, kOe
z=0.3	3.64	3.67	10.8	27.3
z=0.6	2.89	3.02	14.9	31.1

Т.о., в твердом растворе $(Pb_{0.3}Sn_{0.7})_{0.84}In_{0.16}Te$ наблюдается объемная сверхпроводимость с высокими значениями T_c и H_{c2} обусловленными нахождением примесной полосы In глубоко в валентной зоне соединения, что приводит к эффективному обмену между примесными и зонными состояниями (резонансное рассеяние) [5]. Увеличение содержания свинца до z = 0.6 в образце $(Pb_{0.6}Sn_{0.4})_{0.84}In_{0.16}Te$ приводит к смещению примесной полосы E_{In} к потолку валентной зоны, в следствии чего происходит уменьшение интенсивности резонансного рассеяния носителей, подавление объемной СП и в материале наблюдается переход к проводимости по поверхностным состояниям (включая СП).

[1] Р.В. Парфеньев, Д.В. Шамшур, С.А. Немов, ФТТ **43**, 1772 (2001).
[2] Волков Б.А., Рябова Л.И., Хохлов Д.Р. УФН, **172**, 8, 875 (2002).
[3] В.И. Кайданов, Ю.И. Равич. УФН **145**, 51 (1985).
[4] Ruidan Zhong, et al., Crystals, **7**, 55 (2017)
[5] N.Yu. Mikhailin et al., Low Temperature Physics **45**, 189 (2019)

Процессы перемагничивания магнитоодноосных плёнок с колумнарным дефектом в плоскостном поле

Р.М.Вахитов, Р.В.Солонецкий, А.А.Ахметова, М.А.Филиппов
Физико-технический институт, Башкирский государственный университет, Уфа, Россия
e-mail: vakhitovrm@yahoo.com

В последние годы ведутся активные исследования магнитных скирмионов, которые за счёт их уникальных свойств могут найти применение в устройствах записи информации нового поколения. Магнитные скирмионы—это вихреподобные магнитные неоднородности, несущие топологический заряд, которые наблюдаются в киральных магнетиках [1]. Устойчивость скирмионных состояний в них обеспечивается взаимодействием Дзялошинского-Мория (DMI), которое проявляется в основном только при низких температурах. В случае же ультратонких многослойных плёнок, в которых реализуется межфазное DMI, магнитные скирмионы наблюдаются уже при комнатных температурах, но и здесь имеются проблемы с их стабильностью, что создаёт определённые трудности для их практического применения [2,3].

В тоже время о в ряде исследований было показано [3,4], что существуют магнитные материалы, в которых стабилизацию скирмионных состояний можно достичь и в отсутствии DMI. Одним из возможных способов решения данной проблемы является метод, рассмотренный в [3]. Суть этого подхода состоит в создании в одноосной ферромагнитной плёнке колумнарного дефекта (с отрицательным значением константы одноосной анизотропии Ku), на котором при определённых значениях материальных параметров будут зарождаться магнитные скирмионы. В работе [4] было экспериментально показано, что путём сфокусированного облучения поверхности магнетика ионами He^+ можно получить наноструктуированные плёнки Co/Pt с локально изменёнными участками, в которых константа одноосной анизотропии будет иметь пониженное значение. На образовавшейся решётке “потенциальных ям” были обнаружены магнитные скирмионы, устойчивость которых не нарушалась и в ненулевом магнитном поле.

Теоретический анализ микромагнитных структур, возникающих на колумнарных дефектах типа потенциальная яма в магнитоодноосных плёнках [2], показал, что они бывают разных типов (всего четыре), два из которых представляют собой не топологический солитон, а два — магнитный скирмион. Они различаются ориентацией кора и направлением намагниченности на периферии (вне дефекта). Однако они имеют и общие топологические особенности; в их структуре можно выделить три участка вращения магнитных моментов: кор, промежуточный и граничный участки.

Наложение магнитного поля **H**, направленного вдоль лёгкой оси анизотропии, приводит к трансформации их структуры, в частности, магнитный солитон с ориентацией кора, противоположной полю **H**, перемагничивается в три этапа: вначале уменьшаются размеры кора, затем при его критическом значении H_c переключается ориентация кора и скирмион превращается в не топологический солитон. Последний с увеличением **H** уменьшается в размерах, он как бы “испаряется” [2] и исчезает.

При действии плоскостного магнитного поля на плёнку, его перемагничивание сопровождается возникновением асимметрии распределения магнитных моментов в скирмионе: часть области промежуточного участка, в которой киральность спинов совпадает с направлением **H**, расширяется за счёт уменьшения размеров области, в которой киральность спинов противоположна полю. При этом происходит сдвиг скирмиона в сторону уменьшающейся области Рис.1 При критическом значении поля H_c скирмион скачком перемагничивается по направлению поля.

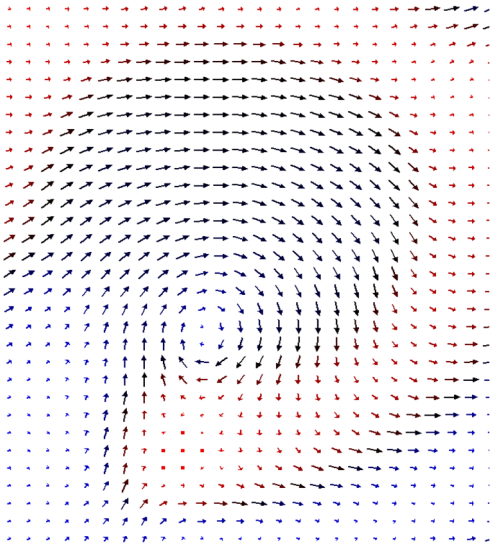


Рис. 1 Структура магнитного скирмиона в магнитном поле $\boldsymbol{H_c}$=15.460 мТ. Поле направлено вправо.

Микромагнитное моделирование процессов перемагничивания феррмагнитной плёнки (взятой в форме диска) с колумнарным дефектом было осуществлено с помощью пакета программ открытого доступа OOMMF [5]. Устойчивые состояния скирмиона без поля были обнаружены при следующих параметрах: диаметр диска 600 нм, толщина диска 30 нм, диаметр дефекта 60 нм, $Ku_1=3\times10^4$Дж/м^3 (вне дефекта), $Ku_2=-0.5\times10^4$Дж/м^3 (на дефекте), $Ms=6.6\times10^5$А/м, $A=2.5\times10^{-13}$Дж/м., а критическое поле H_c=15.460÷15.465 мТ.

[1] K.Everschor-Sitte, J.Masell, R.M.Reeve, M.Kläui, Perspective: Magnetic skyrmions, J. Appl. Phys. 124, 240901 (2018)
[2] R.M.Vakhitov, R.V.Solonetsky, A.A.Akhmetova, J. Appl. Phys. 128, 153904. (2020)
[3] D.Navas, R.V.Verba, A.Hierro-Rodriguez, S.A.Bungaev, X. Zhou, A.O.Adeyeye, O.V.Dobrovolskiy, B.A.Ivanov, K.Y.Guslienko, G.N.Kakazei, APL Mater. 7, 081114. (2019)
[4] M.V.Sapozhnikov, S.N.Vdovichev, O.L.Ermolaeva, N.S.Gusev, A.A.Fraerman, S.A.Gusev, Yu.V.Petrov, J. Appl. Phys. 109, 042406 (2016)
[5] M.J.Donahue, D.G.Porter, OOMMF User’s Guide, Version 2.0a2. (2019)

Сплавы Гейслера Mn_2VGe с переключаемым поведением металл-полуметалл при конечной температуре

Д.Р.Байгутлин [1], В.В.Соколовский [1,2], О.Н. Мирошкина [1,3], В.Д.Бучельников [1,2]

[1] Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

[2] Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС", Москва, Россия

[3] Университет Дуйсбурга-Эссена, Дуйсбург, Германия

e-mail: d0nik1996@mail.ru

В настоящее время требования к производительности компьютеров резко возросли. Однако современная электроника почти приблизилась к своим физическим пределам, поэтому исследования в области спинтроники становятся все более и более актуальными. Полуметаллические материалы привлекли большое внимание из-за их потенциального использования в спинтронике: новые спиновые устройства, термоэлектрики, спиновые фильтры, устройства хранения данных [1-3]. Полуметаллические соединения являются проводниками для электронов с одним направлением спина и полупроводниками/диэллектриками для другого на уровне Ферми E_F. Полуметаллическое поведение было предсказано для многих магнитных материалов, таких как магнитные оксиды [4], разбавленные полупроводники на основе магнитных соединений III-V группы периодической системы химических элементов [5] и сплавы Гейслера [6]. Среди перечисленных вариантов одними из наиболее привлекательных являются сплавы Гейслера X_2YZ, благодаря их высокой спиновой поляризацией на уровне Ферми E_F и температуре Кюри выше комнатной температуры.

Геометрическая оптимизация решетки проведена в рамках теории функционала плотности с использованием подхода присоединенных плоских волн, реализованного в программном пакете VASP [7, 8]. Обменно-корреляционные эффекты учитываются с помощью функционалов GGA-PBE [9] и meta-GGA SCAN [10]. k-сетка генерировалась автоматически по схеме Монхорста-Пака и составляла 11×11×11 k-точек для релаксации, и 25×25×25 k-точек для точных вычислений плотности электронных состояний (DOS). Энергия обрезания плоских волн составляла 800 eV, а параметр сходимости по энергии равнялся 10^{-8} eV/атом.

На первом этапе работы была проведена геометрическая оптимизация решетки для $L1_2$ и X_A структур, имеющих ферромагнитное (FM), ферримагнитное (FIM) или антиферромагнитное упорядочение (AFM), показанных на Рис. 1.

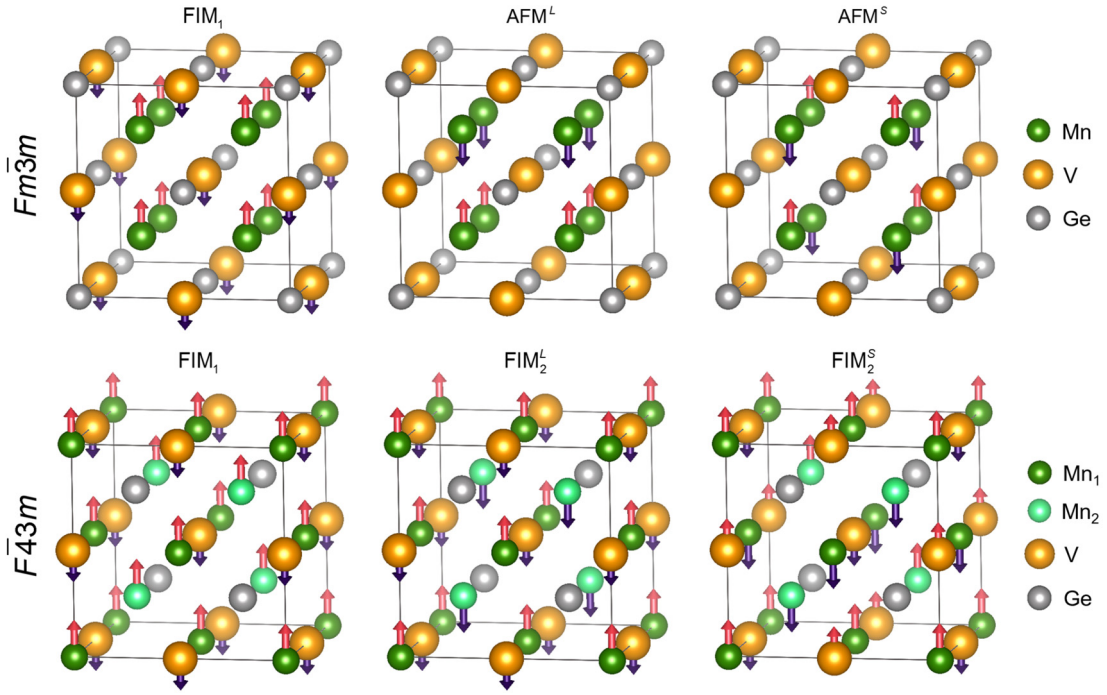


Рис. 1. Магнитные упорядочения для $L1_2$ решетки (верхняя панель) и для X_A решетки (нижняя панель).

Полная энергия как функция постоянной решетки, представлена на рис. 2 (а, б) для GGA и SCAN, соответственно. Структура $L1_2$ с магнитной конфигурацией FIM_1 является наиболее энергетически выгодной как для GGA, так и для SCAN. Интересно, что GGA дает почти вырожденную немагнитную (NM) фазу при том же параметре решетки ($a_0 \approx 5{,}75$Å), что и в основном состоянии FIM_1. Расчетное значение ΔE составляет около 11 мэВ/атом. Этот результат согласуется с расчетами LSDA [11] проведенными ранее. Для SCAN состояние NM на 45 мэВ/атом выше по энергии, чем состояние FIM_1.

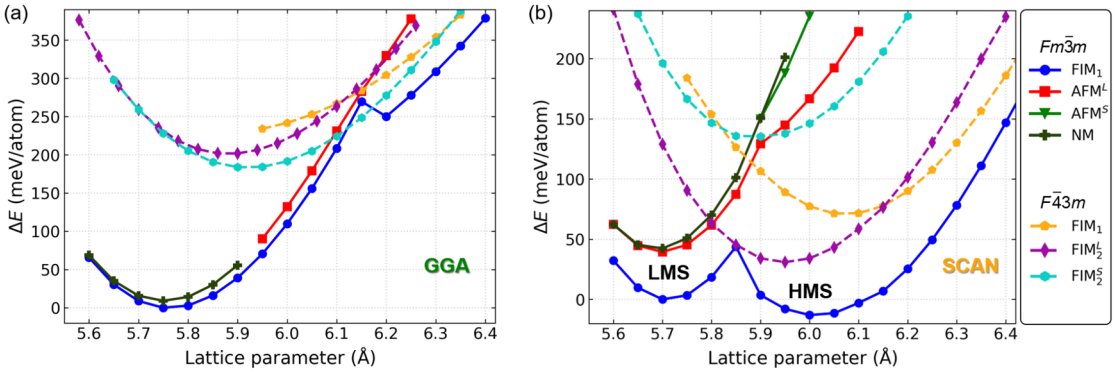


Рис. 2. Полная энергия, нормированная на энергию LMS состояния Mn_2VGe как функция параметра решетки, рассчитанная в рамках GGA и SCAN.

Другой особенностью является то, что решение SCAN для FIM_1 демонстрирует почти вырожденные минимумы при $a_0 \approx 5{,}7$ и 6,0 Å. В случае

GGA функционала такой особенности не наблюдается. Левый минимум энергии соответствует состоянию FIM_1 с небольшим, но целочисленным магнитным моментом (μ_{tot} = 1.0 μ_B/ф.е.), а правый - состоянию FIM_1 с большим магнитным моментом (μ_{tot} = 4.778 μ_B/ф.у.), обозначим эти состояния как LMS и HMS, соответственно. Кроме того, значение магнитного момента μ_{tot} рассчитанное SCAN в LMS подчиняются правилу Слейтера-Поллинга (μ_{tot} = $|N_e$-24|), где N_e - общее количество валентных электронов в элементарной ячейке.

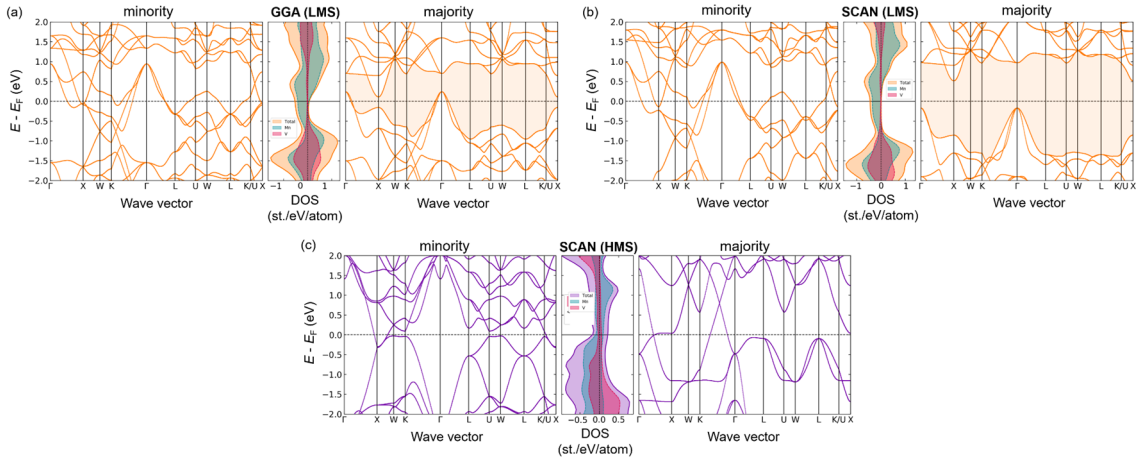


Рис. 3. Спин-вверх и спин-вниз зонные структуры, полные и поэлементные DOS для Mn_2VGe. (a) Рассчитанные в рамках GGA для LMS, рассчитанные в рамках SCAN для (b) LMS и (c) HMS, для равновесного объема.

Для изучения электронной структуры Mn2VGe, были рассчитаны спин-поляризованные зонные структуры, а также плотности электронных состояний фаз LMS и HMS при равновесных постоянных решетки, полученных в рамках GGA и SCAN. В случае фазы LMS оба функционала GGA, и SCAN предсказывают металлический характер. В отличие от случая спин-вниз электронов, зонная структура для спин-вверх электронов немного отличается для GGA и SCAN. GGA дает поведение, близкое к полуметаллическому, однако не предсказывает идеальной полуметалличности из-за наличия максимума валентной зоны в Г точке, который на ≈ 0,25 эВ/атом выше E_F. Тем не менее, спиновая поляризация в данном случае составляет около 90%. В случае использования SCAN для спин-вверх электронов наблюдается запрещенная зона со значениями $E_{Г–Г}$ = 1,104 эВ, $E_{X–X}$ = 1,201 эВ и $E_{Г–X}$ = 0,580 эВ. Примечательно, что энергия Ферми расположена в центре запрещенной зоны, что указывает на стабильность полуметалличности при приложении давления. Величина запрещенной зоны в основном определяется вкладом энергетических уровней Mn. Можно также отметить, что pDOS (поэлементная плотность электронных состояний) для атомов V достаточно симметричны и,

следовательно, V имеет малый магнитный момент относительно атомов Mn. При увеличении объема ячейки как спин-вниз, так и спин-вверх зоны пересекают уровень Ферми, что говорит о металлической природе HMS-фазы.

Присутствие как полуметаллической, так и металлической фаз, соответствующих разным объемам решетки, позволяет переключаться от спин-поляризованного тока (спин-вверх) к спин-неполяризованному под действием внешнего давления. Данный механизм может быть полезен для разработки спинтронных устройств, таких как спиновые фильтры, датчики, переключатели и логические вентили.

[1] A. Fert, Rev. Mod. Phys **80**, 1517 (2008).
[2] B. Dieny, I. L. Prejbeanu, K. Garello, P. Gambardella, P. Freitas, R. Lehndorff, W. Raberg, U. Ebels, S.O. Demokritov, J. Akerman и др., Nature Electronics **3**, 446 (2020)
[3] J. Puebla, J. Kim, K. Kondou, and Y. Otani, Communications Materials **1**, 1 (2020).
[4] S. P. Lewis, P. B. Allen, T. Sasaki, Phys. Rev. B **55**(16), 10253 (1997).
[5] H. Akai, Phys. Rev. Lett. **81**, 14, 3002 (1998).
[6] C. Felser, G. H. Fecher, B. Balke, Angew. Chem. Int. Ed. **46**(5), 668-699 (2007).
[7] G. Kresse, J. Furthmüller, Phys. Rev. B. **54**, 11169 (1996).
[8] G. Kresse, D. Joubert, Phys. Rev. B. **59**, 1758 (1999)
[9] J. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
[10] J. Sun, A. Ruzsinszky, J. P. Perdew. Phys. Rev. Lett. **115**, 3, 036402 (2015).
[11] K. Özdogan, I. Galanakis, E. Şaşioglu, B. Aktaş, J. Phys.Condens. Matter **18**, 2905 (2006).

Свойства сплава Mn_3Ge в кубической фазе Fm-3m

В.Д.Бучельников [1,2], В.В.Соколовский [1,2], Д.Р.Байгутлин [1], О.Н. Мирошкина [1,3]

[1] Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

[2] Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС", Москва, Россия

[3] Университет Дуйсбурга-Эссена, Дуйсбург, Германия

e-mail: buche@csu.ru

В некоторых тройных сплавах Гейслера наблюдается полуметаллическое состояние в одном из спиновых каналов. Магнитные полуметаллические материалы привлекли большое внимание из-за их потенциального использования в спинтронике [1-3]. Полуметаллические соединения являются проводниками для электронов с одним направлением спина и диэлектриками для другого спина на уровне Ферми E_F. Полуметаллическое поведение было предсказано, в частности, для некоторых сплавов Гейслера X_2YZ, благодаря их высокой спиновой поляризации на уровне Ферми E_F и температуре Кюри выше комнатной температуры [4]. В данной работе теоретически исследованы фазовые переходы в сплаве Mn_3Ge, который является граничным случаем сплавов $Mn_{2+x}Y_{1-x}Ge$.

Геометрическая оптимизация решетки проведена в рамках теории функционала плотности с использованием подхода присоединенных плоских волн, реализованного в программном пакете VASP [5, 6]. Обменно-корреляционные эффекты учитывались с помощью функционалов GGA-PBE [7] и meta-GGA SCAN [8]. k-сетка генерировалась автоматически по схеме Монхорста-Пака и составляла 11×11×11 k-точек для релаксации. Энергия обрезания плоских волн составляла 650 eV, а параметр сходимости по энергии равнялся 10^{-6} eV/атом.

В работе проведена геометрическая оптимизация для решетки Fm-3m в ферримагнитном упорядочении, в которой 8 и 4 атомов Mn имеют противоположные направления магнитных моментов.

Полная энергия на атом для сплава Mn_3Ge как функция постоянной решетки представлена для SCAN функционала на рис. 1. Видно, что в данном соединении реализуется два минимума энергии в зависимости от постоянной решетки, которые отвечают двум значениям величины магнитного момента: 4 магнетона Бора для левого минимума и ~ 12 магнетонов Бора для правого минимума на ячейку из 16 атомов. Разница в энергии между двумя состояниями составляет 23.51 meV/atom. Таким образом из представленных данных следует, что в данном соединении возможна реализация двух магнитных состояний с различными значениями величины магнитного момента. Поскольку в первом состоянии наблюдается целочисленное значение магнитного момента, то это говорит о том, что

данное состояние является полуметаллическим. В связи с этим в рассматриваемом сплаве возможны два состояния: полуметаллического и металлического ферромагнетика с возможностью перехода между ними. Этот переход может быть применим в устройствах спинтроники.

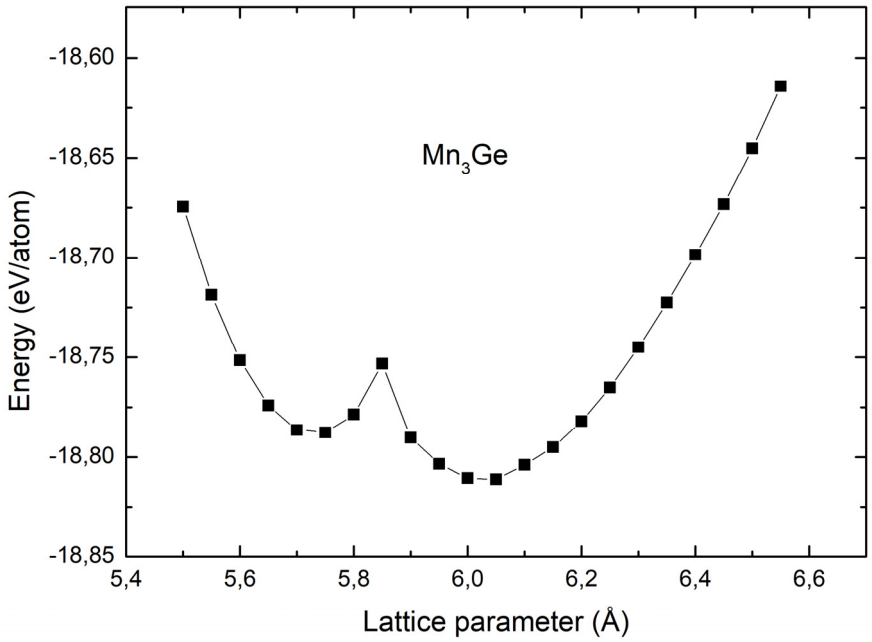


Рис. 1. Зависимость энергии сплава Mn3Ge от параметра решетки Fm-3m при расчетах с помощью функционала SCAN.

Для уменьшения разницы энергий между двумя магнитными состояниями было предложено легировать данный сплав атомами кремния. На рис. 2 показана зависимость энергии сплава $Mn_3Ge_{0.75}Si_{0.25}$ от параметра решетки в случае расчетов с функционалом SCAN. Видно, что в этом случае разница энергии между минимумами составляет 3.6 meV, что говорит о том, что легирование сплава Mn3Ge атомами Si может привести к тому, что минимумы между низкомагнитным и высокомагнитным состояниями буду одинаковыми по энергии. Данное свойство может быть использовано в устройствах спинтроники. Отметим, что расчеты, проведенные с помощью функционала GGA PBE не приводят к наличию двух почти вырожденных по энергии состояний, что говорит о том, что функционал SCAN более точно определяет свойства материалов при применении к ним первопринципных вычислений. В данной работе также проведены вычисления тетрагональных искажений сплавов. Показано, что кубические состояния данных сплавов являются метастабильными.

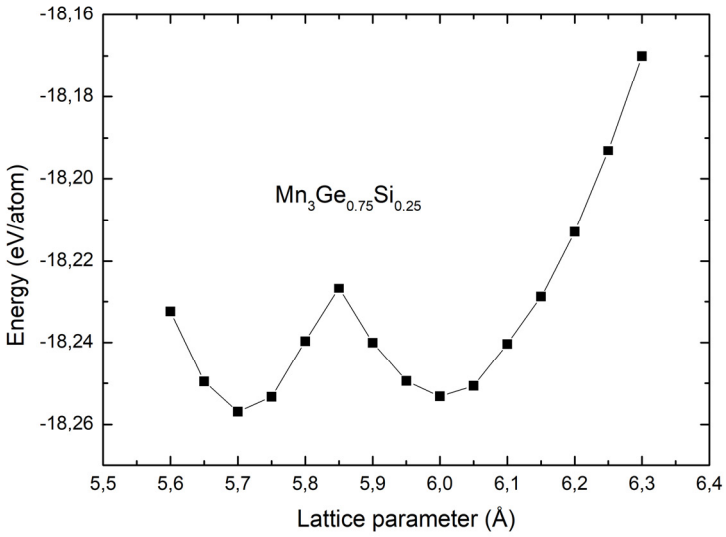


Рис. 2. Зависимость энергии сплава $Mn_3Ge_{0.75}Si_{0.25}$ от параметра решетки Fm-3m при расчетах с помощью функционала SCAN.

Отметим, что наличие как полуметаллической, так и металлической фаз соответствующих разным объемам решетки позволяет переключаться от спин-поляризованного тока (спин-вверх) к спин-неполяризованному под действием внешнего давления. Данный механизм может быть полезен для разработки спинтронных устройств, таких как спиновые фильтры, датчики, переключатели и логические вентили.

[1] A. Fert, Rev. Mod. Phys. 80, 1517 (2008).
[2] B. Dieny, I. L. Prejbeanu, K. Garello, P. Gambardella,P. Freitas, R. Lehndorff, W. Raberg, U. Ebels, S. O.Demokritov, J. Akerman,et al., Nature Electronics3, 446(2020)
[3] J. Puebla, J. Kim, K. Kondou, and Y. Otani, Communi-cations Materials1, 1 (2020).
[4] C. Felser, G. H. Fecher, B. Balke. Angew. Chem. Int. Ed. 46, 5, 668-699 (2007).
[5] G. Kresse, J. Furthmüller, Phys. Rev. B. 54, 11169 (1996).
[6] G. Kresse, D. Joubert, Phys. Rev. B. 59, 1758 (1999)
[7] J. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996).
[8] J. Sun, A. Ruzsinszky, J. P. Perdew. Phys. Rev. Lett. 115, 3, 036402 (2015).

Магниторезистивный эффект в гетероструктурах ферромагнетик-сверхпроводник-ферромагнетик на основе сильно разбавленного сплава PdFe

Л.Н.Карелина [1], Ш.А.Эркенов [1,2,3], В.В.Больгинов[1]
[1] *Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия*
e-mail: lkarelina@issp.ac.ru
[2] *Московский Физико-Технический институт, г. Долгопрудный, Россия*
[3] *Сколковский институт науки и технологий, г. Москва, Россия*

Разработка и внедрение спинтронных устройств на основе эффекта гигантского магнитосопротивления (GMR) является важной областью в науке и технологии (см. например [1]). GMR-эффекты в сверхпроводящих гетероструктурах связаны с интереснейшим физическим явлением: спиновым антагонизмом ферромагнетизма и сверхпроводимости. Действительно, обменное взаимодействие стремится выстроить все локальные магнитные моменты в одном направлении, тогда как сверхпроводящие электроны согласно теории БКШ связаны в куперовские пары с противоположным направлением импульса и спина. Взаимодействие двух коллективных явлений приводит к возникновению пространственно-неоднородных сверхпроводящих состояний (LOFF-состояния), которые могут наблюдаться в магнитных сверхпроводниках или гетероструктурах сверхпроводник-ферромагнетик.

Функционирование сверхпроводящих GMR-устройств (спиновых вентилей или клапанов) основано на подавлении критической температуры тонкой сверхпроводящей пленки (S), находящейся в контакте с двумя тонкопленочными ферромагнитиками ($F_{1,2}$). В случае сонаправленных намагниченностей $\mathbf{M_1}$ и $\mathbf{M_2}$ (P-состояние) критическая температура сверхпроводящего слоя T_c сильно подавляется за счет спиновой поляризации электронов в сверхпроводнике, тогда как в противоположном случае (AP-состояние) воздействия F-слоев частично компенсируют друг друга, и подавление T_c слабеет [2-3].

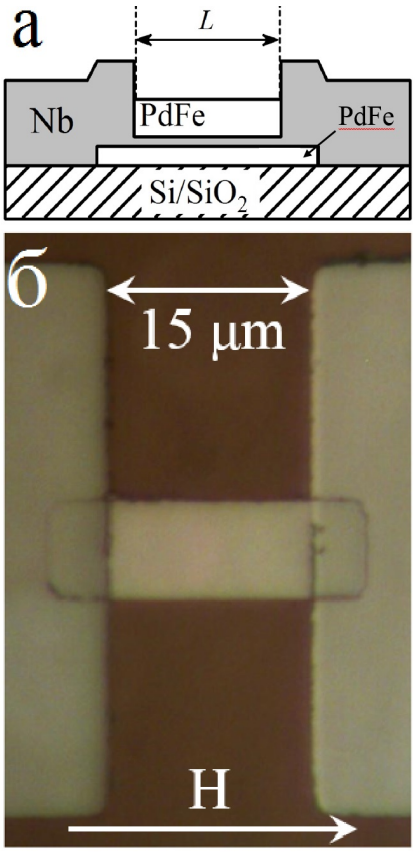


Рис. 1 Схематическое поперечное сечение (а) и микрофотография структуры (б) с размером FSF-мостика 8x15 мкм^2. Стрелки указывают направление приложенного магнитного поля.

При измерениях эффект спинового клапана, как правило, проявляется в виде положительных или отрицательных пиков магнитосопротивления в коэрцитивных полях, в которых изменяется взаимная ориентация намагниченностей ферромагнитных слоев.

Обычно для демонстрации эффекта спинового клапана в качестве F-слоев используются сильные ферромагнетики или полуметаллы с большой спиновой поляризацией. Самыми слабыми из использованных ранее материалов были сплавы $Cu_{1-x}Ni_x$ (x ≈ 50%) с температурой Кюри 40-70 K. В настоящей работе мы исследовали противоположный предел и продемонстрировали заметный магниторезистивный эффект при использовании сильно разбавленного ферромагнитного сплава $Pd_{0.99}Fe_{0.01}$, содержащего всего 1% магнитных атомов. Интерес к такому составу связан с его использованием в качестве материала джозефсоновского барьера в перспективных элементах сверхпроводниковой магнитной памяти [4] для быстрой одноквантовой логики (БОК, RSFQ). Свойства поликристаллических тонкопленочных образцов PdFe интенсивно изучались нами в предыдущие годы (см. обзор в статье [5]). Тонкие пленки из сплава $Pd_{99}Fe_{01}$ при толщине d_F < 100 нм проявляют свойства нанокластерного магнетика со слабым взаимодействием между кластерами. Температура Кюри сильно зависит от толщины и составляет 10-15 K при 20 нм ≤ d_F ≤ 50 нм. Коэрцитивная сила пленок также демонстрирует толщинную зависимость, что позволяет рассчитывать на реализацию AP-состояния в некотором диапазоне магнитных полей в случае $d_{F1} \neq d_{F2}$.

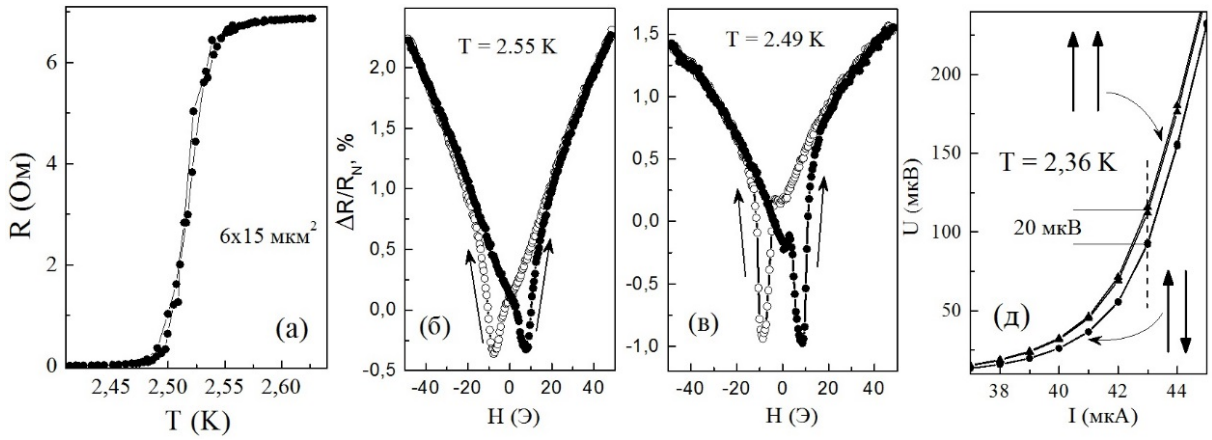


Рис. 2 а) Резистивный переход в сверхпроводящее состояние FSF-мостика размером 6x15 мкм^2. б,в) Магнитосопротивление данного мостика при различных температурах в пределах сверхпроводящего перехода. Приведена зависимость разности сопротивления R(H) и сопротивления при H = 0, нормированная на сопротивление в нормальном состоянии. Ток смещения 20 мкА. Стрелки указывают направление развертки магнитного поля. д) Участок вольт-амперной характеристики FSF-мостика записанный для двух логических состояний (см. обсуждение в тексте).

Мы исследовали 3-слойные мостики PdFe-Nb-PdFe (рис. 1), изготовленные при помощи ионно-плазменного осаждения в атмосфере аргона, а также фотолитографии. На первом этапе производилось осаждение 3-слойной заготовки PdFe-Nb-PdFe на подложку из оксидированного кремния. Толщина верхнего ферромагнетика составляла около 45 нм, а нижнего – около 25 нм. Толщина разделительного слоя ниобия была выбрана равной 15 нм, что сравнимо с длиной когерентности в ниобии. Поэтому критическая температура среднего слоя была подавлена примерно в 3 раза за счет контакта с ферромагнетиками. На втором этапе при помощи фотолитографии формировались прямоугольные защитные маски с шириной 6 мкм и длиной до 50 мкм. Формирование мостиков производилось путем травления в атмосфере аргона. На третьем этапе формировались контактные площадки для подключения приборов. Для этого производилось осаждение толстого слоя ниобия (200 нм) на заранее подготовленную фоторезистивную маску с последующей взрывной фотолитографией в ацетоне. Для обеспечения хорошего электрического контакта к мостику перед осаждением производилась ионная очистка поверхности, вследствие чего верхний ферромагнитный слой был несколько короче нижнего (см. рис. 1а).

Измерения магнитосопротивления проводились в криостате He-4 в диапазоне температур 2-3 К. Магнитное поле прикладывалось в плоскости образца параллельно направлению протекания тока (рис. 1). На рис. 2 представлены результаты измерений магнитосопротивления для нескольких температур в пределах сверхпроводящего перехода. Обнаружен отчетливый магниторезистивный эффект в виде отрицательных пиков магнитосопротивления в коэрцитивных полях. При понижении температуры эффект усиливается. Показано, что микроструктурирование не подавляет эффект: наиболее яркие кривые получены на образцах длиной 10-15 мкм. С увеличением длины пики уширяются и вырождаются в небольшое уширение магниторезистивной кривой. Важным обстоятельством является наличие эффекта магнитной памяти: в случае

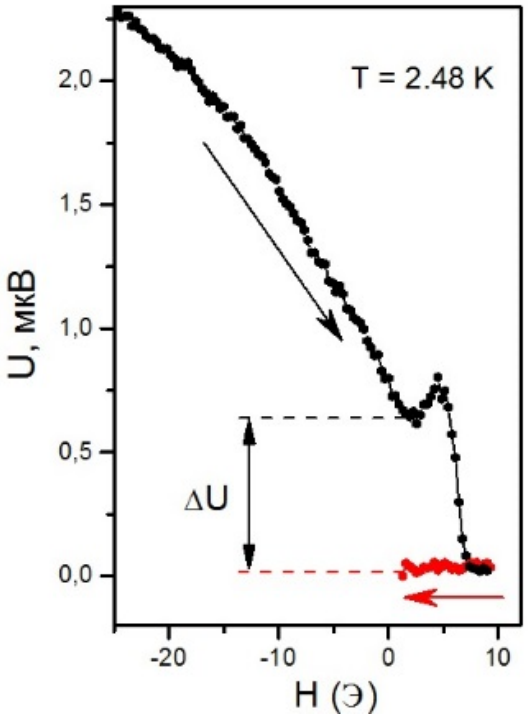


Рис. 3. Зависимость напряжения на FSF-мостике размером 8x15 мкм от магнитного поля в окрестности критической температуры. Вертикальная стрелка иллюстрирует разность напряжений в логических состояниях. Две другие стрелки показывают направление развертки магнитного поля.

изменения направления развертки магнитного поля в точке отрицательного пика минимальное значение напряжения сохранится вплоть до нулевого значения (рис. 3). Это свойство позволяет использовать такие мостики в качестве сверхпроводящих логических элементов.

При температурах ниже критического значения на вольт-амперных характеристиках мостика появляется участок нулевого сопротивления, который с понижением температуры расширяется по закону $(1\text{-}T/T_c)^{3/2}$. Магниторезистивный эффект при этом сохраняется в виде зависимости критического тока от магнитной предыстории (рис. 2д). Модуляция магниторезистивных кривых даже усиливается из-за роста дифференциального сопротивления в начале резистивного участка. Вольт-амперные характеристики постепенно эволюционируют от закона Ома к скачкообразному переходу в резистивное состояние. Последнее условие определяет нижний температурный предел наблюдения магниторезистивного эффекта, при котором наблюдается максимальный эффект магнитного переключения. При температуре 93% от критического значения удалось продемонстрировать эффект магнитного переключения с амплитудой 96 % (в терминологии GMR). Полученные результаты позволяют рассчитывать на успешное внедрение FSF-структур PdFe-Nb-PdFe в качестве элементов памяти для быстрой одноквантовой логики.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-32-90162.

[1] E. Y. Tsymbal and D. G. Pettifor, “Perspectives of giant magnetoresistance,” *Solid State Phys. - Adv. Res. Appl.*, ed. by H. Ehrenreich and F. Spaepen, Vol. 56 (Academic Press) pp.113-237 (2001).
[2] L. R. Tagirov, Phys. Rev. Lett., **83**, 2058 (1999).
[3] A. I. Buzdin, A. V. Vedyayev, N. V. Ryzhanova, Europhys. Lett., **48**, 686 (1999).
[4] T. I. Larkin, V. V. Bol’ginov, V. S. Stolyarov, V. V. Ryazanov, I. V. Vernik, S. K. Tolpygo, and O. A. Mukhanov, Appl. Phys. Lett. **100**, 222601 (2012).
[5] Л. Н. Карелина, В. В. Больгинов, Ш. А. Эркенов, С. В. Егоров, И. А. Головчанский, В. И. Чичков, А. Бен Хамида, В. В. Рязанов, Письма в ЖЭТФ т.112 с.743 (2020).

Резонансные взаимодействия в акусто-магнито-плазмонике

Д.А.Кузьмин [1], И.В.Бычков [1], В.В.Власов [2], В.Г.Шавров [3], В.В.Темнов [4]
[1] *Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия*
e-mail: kuzminda@csu.ru
[2] *Сыктывкарский государственный университет им. Питирима Сорокина, Сыктывкар, Россия*
[3] *Институт радиотехники и электроники им. В.А.Котельникова РАН, Москва, Россия*
[4] *Institut des Molécules et Matériaux du Mans, Le Mans, France*

На текущий момент предложены различные схемы элементарных логических элементов и реализации аналоговых плазмонных вычислений [1]. Часто предлагаются плазмонные устройства на основе наноструктур из серебра или золота. Большой интерес вызывает изучение магнитных наноструктурированных материалов, магнитоплазмоника, акустоплазмоника и сверхбыстрая акусто-магнито-плазмоника [2]. Магнитные и оптические свойства таких материалов могут существенно отличаться от свойств однородных сред. Например, магнитооптические эффекты значительно превосходят таковые для объемных магнетиков [3, 4]. Это позволяет контролировать некоторые характеристики света на наномасштабах. Развитая техника оптического перемагничивания позволяет переключать такого рода элементы за времена порядка пикосекунд. Отдельный интерес представляет область современной магнитоакустики, где исследуется взаимодействие сверхкоротких (пикосекундных) упругих импульсов и лазерных (фемтосекундных) импульсов в магнитных наноструктурах со спиновыми волнами. Несмотря на достаточно большое количество работ по данной теме [5], теория такого взаимодействия еще недостаточно проработана и не учитывает таких важных моментов как, например, локализацию упругого импульса при возбуждении магнонов в магнитных наноструктурах, и временного синхронизма при этом взаимодействии.

В настоящем докладе будет дан обзор современного состояния в области указанных явлений и предложены пути решения некоторых из имеющихся проблем.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (граны №№ 19-07-00246, 20-37-70038, 20-47-740004, 20-07-00466), РНФ (грант № 20-19-00745). Численные расчеты произведены при поддержке Министерства Науки и Высшего Образования РФ в рамках госзадания проект № 075-00250-20-03.

[1] A.Pors et al., Nano Lett. **15** (1), 791 (2015).
[2] V.V.Temnov, Nature Photonics **6**, 728 (2012).
[3] V.I.Belotelov et al., Nature Nanotechn., **6** (6), 370 (2011).
[4] V.I.Belotelov et al., Nature Commun. **4**, 2128 (2013).
[5] O.Kovalenko, T.Pezeril, V.V.Temnov, Phys. Rev. Lett. **110**, 266602 (2013).

Поверхностные плазмон-поляритоны в гибридной слоистой структуре на основе графена и материала с фазовым переходом

О.Г.Харитонова, И.В.Бычков, Д.А.Кузьмин
Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
e -mail: thegreysmartwolf@gmail.com

Плазмоны обладают рядом привлекательных свойств для фотонных технологий и обещают новое поколение миниатюрных фотонных устройств [1]. Одним из материалов, поддерживающих сильно ограниченные распространяющиеся ППП в широком спектральном диапазоне, является графен. Графен – уникальный плазмонный материал [2-4]. Его оптическими свойствами можно управлять с помощью внешних параметров, таких как электростатическое смещение, магнитное поле или химическое легирование. Эта особенность позволяет варьировать электродинамические свойства графена высокопроводящих до диэлектрических. В последние годы активно исследуются особенности взаимодействия с электромагнитным полем слоистых структур основе графена.

Материалы с фазовым переходом прокладывают путь к улучшенной функциональности метаматериалов. Диоксид ванадия (VO2) с температурой фазового перехода, близкой к комнатной (340 K), является привлекательным кандидатом в качестве активного компонента в метаматериалах, поскольку его температура фазового перехода (340 K) легкодоступна. Также доступны качественные тонкие пленки [5].

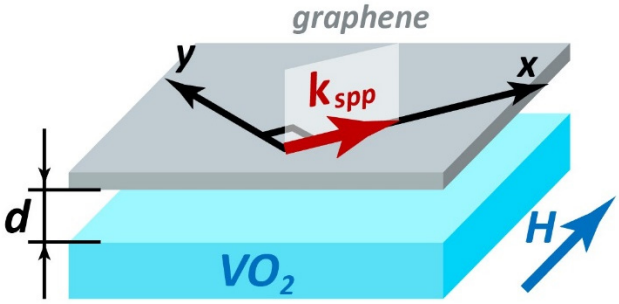


Рис.1 Гибридная слоистая структура на основе графена и материала с фазовым переходом (VO2).

В данной работе мы теоретически исследуем поверхностные плазмон-поляритоны (ППП) в гибридной слоистой структуре на основе графена и материала с фазовым переходом (VO_2). Исследуемая гибридная структура состоит из трех слоев: графена, слоя диэлектрика толщиной d и диоксида ванадия VO_2 (Рис.1).

Для исследования ППП в этой структуре решалось дисперсионное уравнение, полученное из уравнений Максвелла с применением граничных

условий на каждой из границ раздела. Результаты расчетов проведены на Рис. 2. При расчетах полагалось, что VO_2 находится в проводящей фазе, толщина диэлектрического зазора d = 50 нм, диэлектрическая проницаемость зазора $\varepsilon_d = 2$.

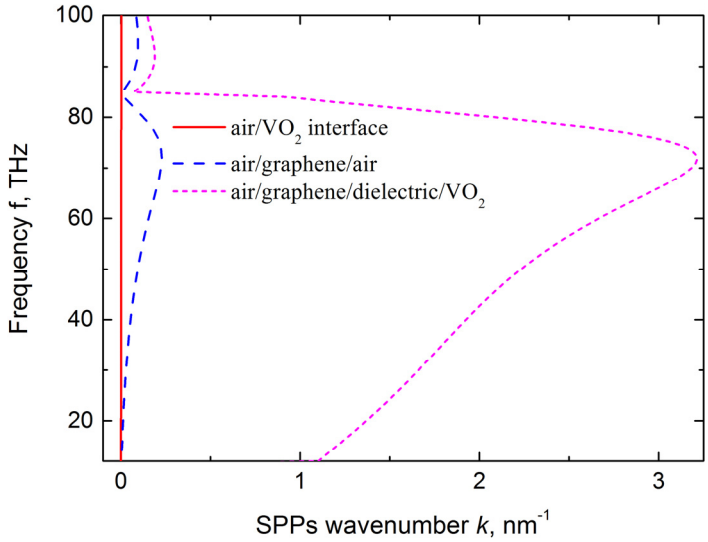


Рис.2 Дисперсионные характеристики ППП на границе раздела воздух VO_2 (сплошная линия), воздух/графен/воздух (длинный пунктир) и в гибридной структуре воздух/графен/диэлектрик/VO_2 (короткий пунктир).

Можно отметить, что на границе раздела воздух/VO_2 в рассматриваемом диапазоне частот не происходи существенной локализации электромагнитной энергии. Слой графена поддерживает хорошо локализованные ППП на частотах вблизи 70 ТГц. Объединение графена и VO_2 в одну структуру приводит к существенному усилению локализации света вблизи слоя графена.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 20-37-70038, 19-07-00246, 20-47-740004), РНФ (грант № 20-19-00745). Численные расчеты произведены при поддержке Министерства Науки и Высшего Образования РФ в рамках госзадания проект № 075-00992-21-00.

[1] A. Polman, Plasmonics Applied, Science 322, 868-869, 2008.

[2] F.J.G. de Abajo, Graphene plasmonics: challenges and opportunities, ACS Photonics 1, 135, 2014.

[3] P-Y Chen, Ch. Argyropoulos, M. Farhat and J. S. Gomez-Diaz, Flatland plasmonics and nanophotonics based on graphene and beyond, Nanophotonics 6(6), 1239–1262, 2017.

[4] D. A. Kuzmin, I. V. Bychkov, V. G. Shavrov and V. V. Temnov, Plasmonics of magnetic and topological graphene-based nanostructures, Nanophotonics 7(3), 597-611, 2018.

[5] C. V. S. Kumar, F. Maury and N. Bahlawane. Vanadium Oxide as a Key Constituent in Reconfigurable Metamaterials, Metamaterials and Metasurfaces. 151, 2018.

Возбуждение поверхностных плазмон-поляритонов в структуре диоксид ванадия–диэлектрик–гиперболическая метаповерхность

М.О.Усик[1], Д.А.Кузьмин[1], И.В.Бычков[1], О.Г.Харитонова[1], В.Г.Шавров[2]
[1]*Челябинский Государственный Университет, Челябинск, Россия*
[2]*Институт радиотехники и электроники им. В.А.Котельникова РАН, Москва, Россия*
e-mail: usikmo95@gmail.com

В данной работе было изучено возбуждение поверхностных плазмон-поляритонов в структуре *диоксид ванадия - диэлектрик – гиперболическая метаповерхность*. Поскольку особый интерес вызывает влияние фазовых переходов на картину возбуждения поверхностных плазмонов, то в качестве одного из слоев был взят диоксид ванадия, так как его фазовый переход из диэлектрического состояния в металлическое протекает при достаточно низких (практически комнатных) температурах [1].

В качестве гиперболической метаповерхности была взята решетка из графеновых полосок [2]. Такая поверхность способна поддерживать распространение как TM, так и TE-поляризованных плазмонов.

Электромагнитные свойства диоксида ванадия можно удовлетворительно описывать в рамках модели Друде. При учете фазового перехода диоксида ванадия мы провели линейную аппроксимацию экспериментальных данных температурной зависимости параметров модели Друде [3]. Как видно из рисунка 1 фазовый переход протекает не мгновенно и поведение диоксида ванадия в зависимости от температуры можно разбить на четыре этапа: 1) до 337 К; 2) от 337 К до 346 К; 3) от 346 К до 352 К; 4) от 352 К.

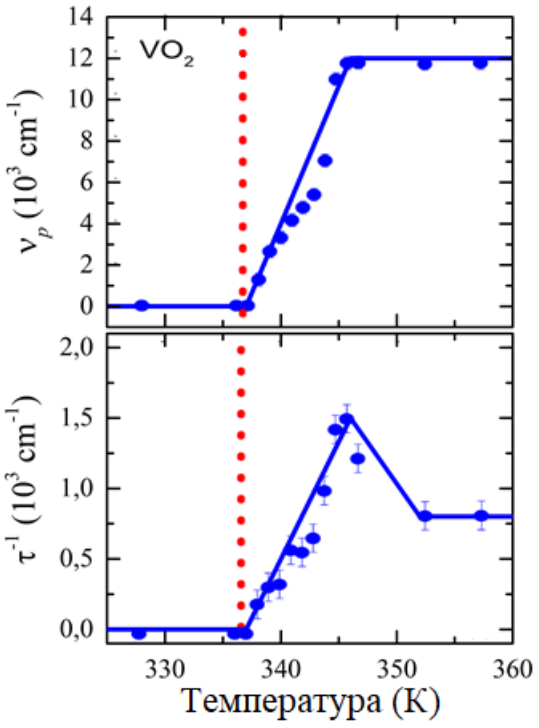


Рис. 1 Поведение диоксида ванадия при фазовом переходе.

При изучении возбуждения поверхностных плазмон-поляритонов использовался метод полного внутреннего отражения в геометрии Отто. При угле падения большем, чем угол полного внутреннего отражения, используя уравнения Максвелла и соответствующие граничные условия, можно рассчитать коэффициент отражения, по которому возможно судить

о том, какая часть энергии падающего излучения ушла на возбуждение поверхностных плазмонов [4].

Задав параметры, при которых происходит возбуждение поверхностных плазмонов, мы рассчитали частотные зависимости коэффициента отражения системы для разных температур.

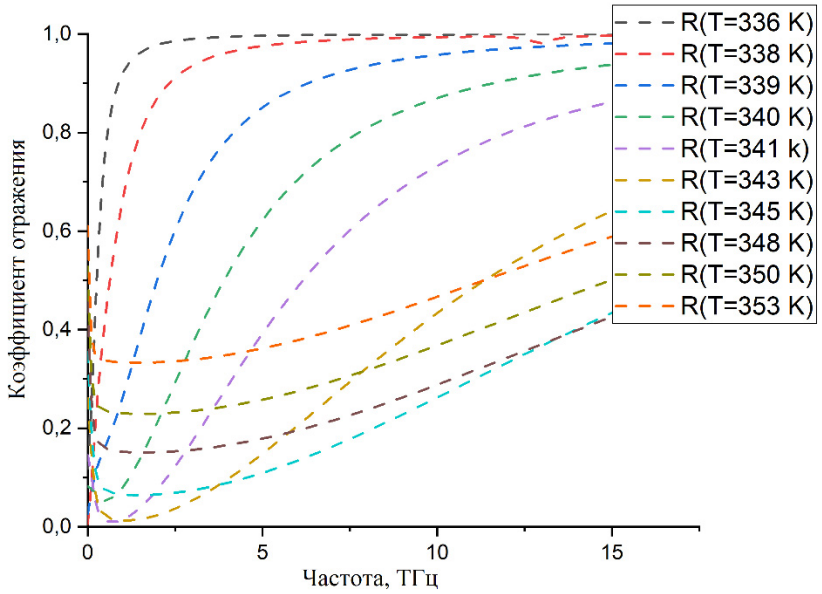


Рис.2 Коэффициент отражения от структуры Диоксид ванадия - Диоксид кремния - Гиперболическая метаповерхность при различных температурах.

Результаты исследования могут помочь изучить поведение поверхностных плазмонов в системах с изменяемыми параметрами, а также открывают новые возможности для управления электромагнитным излучением на наноуровне.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (граны №№ 19-07-00246, 20-37-70038, 20-47-740004), РНФ (грант № 20-19-00745). Численные расчеты произведены при поддержке Министерства Науки и Высшего Образования РФ в рамках госзадания проект № 075-00250-20-03.

[1] Tobias Peterseim, Martin Dressel, Marc Dietrich and Angelika Polity, Journal of Applied Physics 120, 075102 (2016).
[2] J. Sebastian Gomez-Diaz, Mykhailo Tymchenko, and Andrea Alù, PRL 114, (2015).
[3] Masato Tazawa, Ping Jin, and Sakae Tanemura, Applied Optics 37 (10), (1998).
[4] Maksim O. Usik, Igor V. Bychkov, Vladimir G. Shavrov, and Dmitry A. Kuzmin, Open Material Science, 5, 7 (2019).

Магнитосопротивление Cd_3As_2-30mol.%MnAs при высоких давлениях

Л.А.Сайпулаева[1], А.Г.Алибеков[1], К.Ш.Хизриев[1], Н.В.Мельникова[2], А.В.Тебеньков[2], А.Н.Бабушкин[2], В.С.Захвалинский[3], А.И.Риль[4], С.Ф.Маренкин[4,5]

[1]*Институт физики ДФИЦ РАН, 367015, Россия, Республика Дагестан, г. Махачкала, ул. М. Ярагского, 94*

[2]*Уральский федеральный университет, Институт естественных наук и математики, Екатеринбург 620002*

[3]*Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород 308015*

[4]*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва 119991*

[5]*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва 119991*

В работе представлены результаты исследования магнитосопротивления (МС) композита, состоящего из дираковского полуметалла Cd_3As_2 и 30 мол. % ферромагнетика MnAs при давлениях до 50 ГПа. При измерении МС камеру высокого давления помещали в панцирный магнит для создания поперечного магнитного поля ($0 \leq B \leq 1$ Тл), при этом изменение и контроль величин давления и магнитного поля осуществляли непосредственно в ходе эксперимента. При каждом фиксированном значении давления относительное магнитосопротивление $\Delta R/R_0$ в процентах оценивали по формуле:

$$\frac{\Delta R}{R_0} = 100 \cdot \frac{R(B)-R(0)}{R(0)}, \qquad (1)$$

где R(B) - электросопротивление в поперечном магнитном поле с индукцией B, R(0) – электросопротивление в отсутствии магнитного поля.

В диапазоне давлений 16-50 ГПа наблюдалось гистерезисное поведение транспортных свойств при двух последовательных циклах приложения и снятия давления. Измерения МС в режиме подъема и сброса давления выявили особенности в виде максимумов отрицательного и положительного МС, величины относительного магнитосопротивления ($\Delta R/R_0$) достигали ~20% и ~5.3%, соответственно. Установлена нестабильность моноклинной структуры Cd_3As_2 в результате её частичного

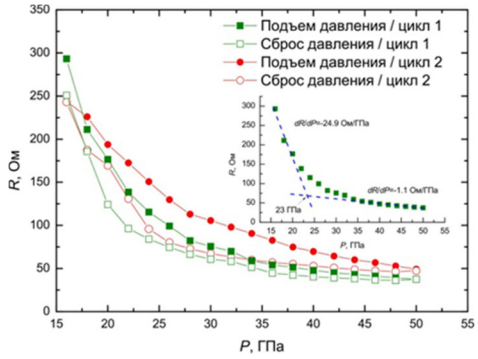


Рис.1 Зависимости электрического сопротивления от давления при двух последовательных циклах измерений. На вставке показана зависимость R(P) первого цикла при подъеме давления. Штрихованные линии соответствуют определению наклонов dR/dP

разложения при декомпрессии. Принцип создания давлений до 50 ГПа, технические характеристики и градуировка КВД описаны в деталях в [1-3].

На рис. 1 показана зависимость электросопротивления R композита Cd_3As_2 + 30 мол. % MnAs от давления P при двух последовательных циклах измерений (подъем и сброс давления) в области комнатных температур. В барическом интервале 15-25 ГПа первого цикла преобладает значительное понижение R с повышением P, что в целом находится в хорошем согласии с результатами исследований для Cd_3As_2 [4]. Сопротивление в этой области давлений меняется почти линейно со средним темпом dR/dP=-24.9 Ом/ГПа (вставка к рис. 1). Величина барического коэффициента при P>34 ГПа составляет = -1.1 Ом/ГПа, что говорит о слабой зависимости R от P до давлений 50 ГПа. При сбросе P с 50 ГПа зависимость $R(P)$ в обоих циклах измерений демонстрировала гистерезисное поведение. Преобладание гистерезиса R в Cd_3As_2 + 30 мол. % MnAs в диапазоне давлений 15-50 ГПа представляется весьма интересным, поскольку это может свидетельствовать в пользу структурного перехода, происходящего в Cd_3As_2, структура которого выше давлений 4.67 ГПа является уже моноклинной ($P21/c$) [4]. Однако, исходя их данных рентгеновской дифракции, приведенных в работе [4], моноклинная фаза регистрировалась до давлений 17.8 ГПа, в то время как ее преобладание до давлений 50 ГПа носит лишь гипотетический характер. Поскольку в настоящей работе *in situ* рентгеновские исследования при высоком давлении для Cd_3As_2 + 30 мол. % MnAs не проводились, можно предположить, что наличие в композите незначительной фазы $CdAs_2$ может также оказывать определенную роль на появление гистерезиса зависимости $R(P)$. В настоящее время известно, что соединение $CdAs_2$ исследовано до давлений 9 ГПа и в области 5.5 ГПа по данным удельного сопротивления и коэффициента Холла сообщалось об обратимом структурном превращении [5]. С другой стороны, отметим, что возникновение гистерезисного поведения электротранспорта может быть ассоциировано с частичным разложением композита Cd_3As_2+MnAs (барическим разложением), чем с возникновением структурного перехода в области давлений выше 17.8 ГПа. В пользу этого предположения также может свидетельствовать тот факт, что значение R после первого цикла не восстанавливается к исходному, а ширина гистерезиса увеличивается на втором цикле, как показано на рис. 1.

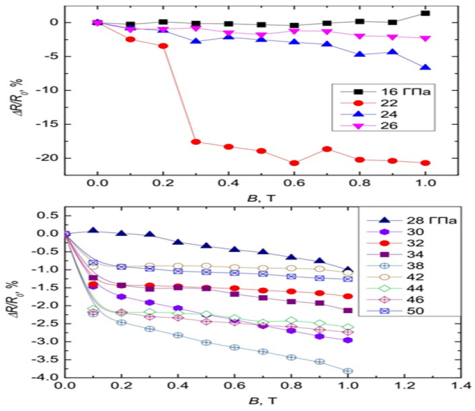


Рис.2 Зависимости магнетосопротивления от индукции магнитного поля в диапазоне давлений 16-26 ГПа (верхняя панель) и 28-50 ГПа (нижняя панель), измеренные в режиме повышения давления.

Отметим, что в качестве одного из структурно-чувствительных параметров к структурным превращениям или к барическому разложению в композитах может выступать магниторезистивный эффект [6, 7]. На рисунках 2 и 3 приведены полевые зависимости МС, измеренные при различных давлениях до 50 ГПа и в магнитных полях до 1 Т при комнатной температуре. Измерения проводились в режимах подъема и сброса давления, что позволило качественно установить связь между наблюдаемым гистерезисом на зависимости *R(P)* и поведением МС. Величина поперечного МС рассчитывалась по формуле (1). Как следует из рис. 4 при P=16 ГПа в композите наблюдается положительное МС. Похожее положительное МС в Cd_3As_2 + 30 мол. % MnAs ранее отмечалось при сравнительно небольшом давлении 7.7 ГПа, которое объяснялось конкуренцией между влиянием силы Лоренца и спин-зависимого рассеяния носителей заряда на MnAs кластерах [8]. Это положительное МС, по-видимому, распространяется до давлений 16 ГПа, однако, его величина постепенно понижается. Дальнейший рост *P* приводит к смене знака МС и максимальная величина отрицательного МС ~20% регистрируется при 22 ГПа в поле 1 Т. Следует заметить, что в данной области давления происходит резкое изменение темпа *dR/dP* на зависимости *R(P)* и пресечение линий аппроксимаций областей низкого и высокого давления соответствуют значению ~23 ГПа (вставка к рис. 1).

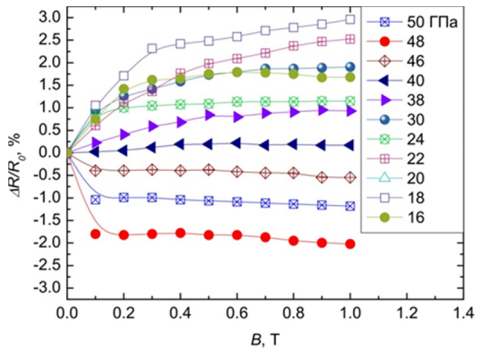


Рис.3 Зависимости магнетосопротивления от индукции магнитного поля при некоторых фиксированных значениях давления, измеренные в режиме сброса давления.

При этом максимум индуцированного давлением отрицательного МС реализуется в сравнительно узкой области давлений 22-26 ГПа, как наглядно показано на рис. 6, и далее при P>26 ГПа отрицательное МС не превышает 4% при 38 ГПа. Динамика изменения этого отрицательного МС при подъеме давления представляется неоднозначной, поскольку имеет

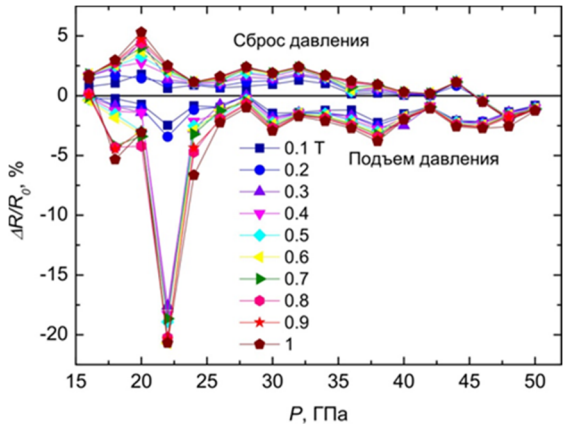


Рис.4 Зависимости магнитосопротивления от давления при различных значениях индукции поперечного магнитного поля до B=1 T

место несколько локальных минимум на зависимости $\Delta R/R_0(P)$. В режиме сброса давления полевая зависимость МС отмечает инверсию знака при P>40 ГПа (рис. 3) и в районе 20 ГПа (рис. 6) наблюдается максимальное положительное МС ~5.3 %. Таким образом, смена знака МС в процессе подъема и сброса давления может указывать на то, что в Cd_3As_2 + 30 мол. % $MnAs$ имеет место необратимость структурных свойств, обусловленная частичным разложением композита после декомпрессии. В то же время наличие максимумов отрицательного и положительного МС предположительно связано с природой фазовых превращений в электронной подсистеме композита [9].

[1] L. F. Vereshchagin, E. N. Yakovlev, B. V. Vinogradov, G. N. Stepanov, K. Kh. Bibaev, T. I. Alaeva, V. P. Sakun. High Temp.–High Press. 6, 499 (1974).
[2] A. N. Babushkin, G. I. Pilipenko, F. F. Gavrilov. J. Phys.: Condens. Matter. **5**, 8659 (1993).
[3] A.N. Babushkin. High Press. Res. **6**, 349 (1992).
[4] L. He, Y. Jia, S. Zhang, X. Hong, Ch. Jin and Shi Li, Quantum Materials 1, 16014 (2016).
[5] A. Y. Mollaev, L. A. Saypulaeva, R. K. Arslanov, S. F. Gabibov, and S. F. Marenkin, High Pressure Research, 22, 181–184 (2002).
[6] T. R. Arslanov, L. Kilanski, S. López-Moreno, A. Yu Mollaev, R. K. Arslanov, I. V. Fedorchenko, T. Chatterji, S. F. Marenkin, and R. M. Emirov, J. Phys. D Appl. Phys. 49, 125007 (2016).
[7] T. R. Arslanov, U.Z. Zalibekov, L. Kilanski, I.V. Fedorchenko, T. Chatterji, and R. Ahuja, J. Appl. Phys. 128, 213903 (2020).
[8] А. Г. Алибеков, А. Ю. Моллаев, Л. А. Сайпуллаева, С. Ф. Маренкин, И. В. Федорченко, А. И. Риль, ЖНХ **62**, 1 (2017).
[9] Н. В. Мельникова, А. В. Тебеньков, Г. В. Суханова, А. Н. Бабушкин, Л. А. Сайпулаева, В. С. Захвалинский, С. Ф. Габибов, А. Г. Алибеков, А. Ю. Моллаев, ФТТ **62**, 6 (2020).

Электрические и гальваномагнитные свойства смешанной системы магнитных топологических изоляторов $MnBi_2Te_4$-$MnBi_4Te_7$

Н.А.Абдуллаев [1,2*], Х.В.Алигулиева [1,3], В.Н.Зверев [4], З.С.Алиев [1,5], И.Р.Амирасланов [1,2], М.Б.Бабанлы [2,6], Н.Т. Мамедов [1]

[1] *Институт физики НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан*

[2] *Бакинский Государственный Университет, Баку, Азербайджан*

[3] *Сумгаитский государственный университет, Сумгаит, Азербайджан*

[4] *Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка Моск. обл. , Россия*

[5] *Азербайджанский госуд. университет нефти и промыш., Баку, Азербайджан*

[6] *Институт катализа и неорг. химии НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан*

**e-mail: abnadir@mail.ru*

Введение

Магнитные топологические изоляторы, в отличие от немагнитных аналогов, могут иметь щель в конусе Дирака, что делает возможным наблюдение ряда уникальных физических явлений, таких как квантованный аномальный эффект Холла (QAH), магнитоэлектрический эффект, аксионная электродинамика, майорановские фермионы и др. [1–5]. Магнитные топологические изоляторы востребованы и в новой области современной электроники — спинтронике, в основном в средствах переноса, записи и хранения информации.

Ранее нами было доложено о получении новых антиферромагнитных топологических изоляторов состава $MnBi_2Te_4$ [6] и $MnBi_4Te_7$ [7], в настоящей работе сообщается о получении и исследовании электрических и гальваномагнитных свойств магнитных топологических изоляторов смешанной системы $MnBi_2Te_4$-$MnBi_4Te_7$.

Экспериментальная часть

Технология получения и характеризация слоистых магнитных топологических изоляторов семейства $MnBi_2Te_4(Bi_2Te_3)_n$ подробно описана нами в работе [8]. Рентгеновская дифрактограмма образца небольших размеров, сколотого из общего слитка, показала наличие двух периодических последовательностей с параметрами решётки в направлении оси *c* равными примерно 41 Å и 23.8 Å. Такие величины параметра *c* характерны для соединений $MnBi_2Te_4$ и $MnBi_4Te_7$, соответственно [8]. Угловое положение и интенсивность рентгеновских рефлексов свидетельствует о том, что состав полученного образца соответствует примерно на 50% соединению $MnBi_2Te_4$ и на 50% соединению $MnBi_4Te_7$.

Электрические и гальваномагнитные (эффект Холла и магнитосопротивление) эффекты в слоистых кристаллах системы 50%$MnBi_2Te_4$-50%$MnBi_4Te_7$ были изучены стандартным четырёхзондовым методом по селективной методике на переменном токе частотой 20.5 Гц с

использованием Lock-in Amplifier - SR830. Величина тока не превышала 1 мА. Исследования проводились в широкой области температур 1.4-300К. Сильные магнитные поля до 80 кЭ были получены с помощью сверхпроводящего соленоида. Образец при гальваномагнитных измерениях помещался в центр соленоида. На рисунке 1 показаны температурные зависимости удельного сопротивления ρ(T) соединения системы $MnBi_2Te_4$-$MnBi_4Te_7$ в широкой области температур.

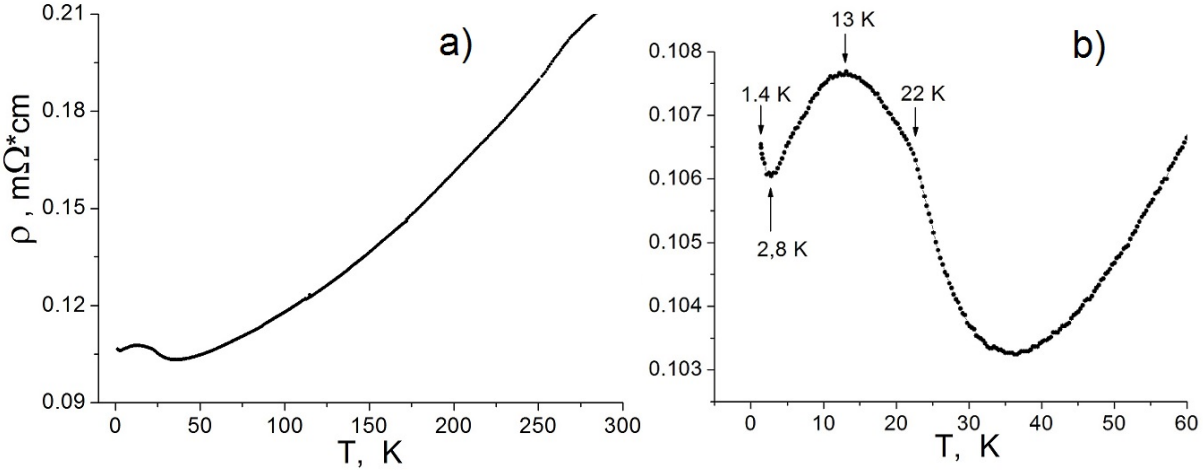


Рис. 1. Температурная зависимость удельного сопротивления ρ(T) соединения системы $MnBi_2Te_4$-$MnBi_4Te_7$ в области температур: a) 1.4-300К и b) 1.4-60К.

Отметим, что температурная зависимость удельного сопротивления ρ(T) в области температур 50-300К имеет характерный “металлический” ход: с уменьшением температуры величина удельного сопротивления уменьшается. Такая температурная зависимость характерна и для классического полупроводника Bi_2Te_3 [9]. Вышеизложенное обусловлено тем, что для этих кристаллов при синтезе из расплава стехиометрического состава уже изначально характерно наличие значительного количества собственных точечных дефектов структуры, т.н. антисайтных дефектов и дефектов замещения. Поэтому, соединения системы $MnBi_2Te_4$-$MnBi_4Te_7$ имеют значительную концентрацию носителей заряда. Согласно исследованиям эффекта Холла, соединение системы $MnBi_2Te_4$-$MnBi_4Te_7$ являются полупроводником *n*-типа, с концентрацией электронов в данном образце равной $1.1 \cdot 10^{20}$ $см^{-3}$. Такая большая концентрация примесей формирует в запрещённой зоне значительное количество локальных состояний, образующих широкую примесную зону, перекрывающуюся с собственной зоной чистого кристалла. Поэтому, при исследованиях электропроводности соединений системы $MnBi_2Te_4$-$MnBi_4Te_7$ наблюдается типичный “металлический” ход температурной зависимости удельного сопротивления.

Следует отметить ещё несколько особенностей при температурах ниже 50К: a) с понижением температуры величина удельного сопротивления ρ возрастает и зависимость ρ(T) демонстрирует перегиб при критической

температуре T_C~22К, указанной стрелкой; б) с дальнейшим понижением температуры удельное сопротивление ρ продолжает возрастать и достигает максимума при температуре Т=13К; в) ниже температуры 2.8К удельное сопротивление ρ_{xx} опять несколько возрастает с 106 мкОм·см до 106.5 мкОм·см. Последняя особенность с возрастанием сопротивления при температурах ниже 2.8К обусловлена эффектом слабой локализации и исчезает при приложении внешнего магнитного поля. Перегиб при критической температуре T_C~22К и пик при температуре Т=13К обсловлен вероятно спиновыми флуктуациями при магнитных фазовых переходах в магнитных топологических изоляторах $MnBi_2Te_4$ [6] и $MnBi_4Te_7$ [7], соответственно. Об этом свидетельствуют данные влияния внешнего магнитного поля, приведенные на рисунке 2.

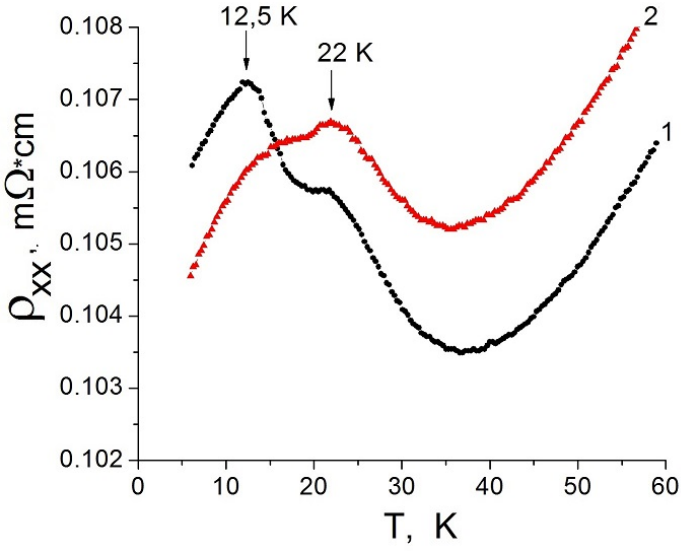


Рисунок 2. Температурная зависимость удельного сопротивления $\rho_{xx}(T)$ соединения системы $MnBi_2Te_4$-$MnBi_4Te_7$ в области температур 1.4-60К в приложенном внешнем магнитном поле: 1) 1.5Т, 2) 2Т.

Как видно из рис.2, в приложенном внешнем поле 1.5Т в зависимости ρ(Т) ясно наблюдаются две особенности при температурах 12.5К и 22К. С дальнейшим увеличением внешнего поля до 2Т пик при 12.5К сильно ослабевает и на этом фоне четко проявляется пик при 22К. Эти результаты хорошо согласуются с данными работы [7], в котором нами было показано, что приложенное внешнее магнитное поле поле 2 Т, практически полностью ликвидирует пик в зависимости ρ(Т) при температуре 13.2 К в монокристаллах $MnBi_4Te_7$, в то время как в монокристаллах $MnBi_2Te_4$ пик превращается в «колено» лишь при полях свыше 6Т [6].

Заключение

Таким образом, нами получены образцы смешанного состава новых антиферромагнитных топологических изоляторов системы 50%$MnBi_2Te_4$-50%$MnBi_4Te_7$. Данные электрических и гальваномагнитных исследований свидетельствуют о присутствии особенностей в переносе заряда,

свойственных антиферромагнитным топологическим изоляторам $MnBi_2Te_4$ и $MnBi_4Te_7$.

Данная работа была выполнена при финансовой поддержке Фонда Развития Науки при Президенте Азербайджанской Республики (гранты № EİF-BGM-4-RFTF-1/2017-21/04/1-M-02 и EİF/MQM/Elm-Tehsil-1-2016-1(26)-71/16/1).

[1] Y.Tokura, K.Yasuda, A.Tsukazaki, Nature Reviews Physics **1**, 126 (2019).
[2] C.-Z.Chang, J.Zhang, X.Feng et al, Science **340**, 167 (2013).
[3] Q.L.He, L.Pan, A.L.Stern, E.C.Burks et al, Science **357**, 294 (2017).
[4] A.M.Essin, J.E.Moore and D.Vanderbilt, Phys. Rev. Lett. **102**, 146805 (2009).
[5] R.Li, J.Wang, X.-L.Qiand, S.-C.Zhang, Nature Phys. **6**, 284 (2010).
[6] M.M.Otrokov, I.I.Klimovskikh, H.Bentmann et al, Nature **576**, 416 (2019).
[7] I.I.Klimovskikh, M.M.Otrokov, D.Estyunin et al, npj Quantum Materials **5**, 54 (2020).
[8] Z.S.Aliev, I.R.Amiraslanov, D.I.Nasonova et al, Journal of Alloys and Compounds **789**, 443 (2019).
[9] Н.А.Абдуллаев, С.Ш.Кахраманов, Т.Г.Керимова и др., ФТП **43**, *2*, 156 (2009).

Секция А3

Материалы с памятью формы, магнитокалорические материалы, мультиферроики

Фото- магнитосопротивление в пленках $BiFe_{1-x}Co_xO_3$

В.В. Кретинин [1], О.Б. Романова[2], С. О. Коновалов [1], О.Н. Бандурина [1]
[1] Сибирский государственный университет науки и технологий им. ак. М.Ф. Решетнева, Красноярск, Россия
[2]Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия
e-mail: kret_vas@mail.ru

Мультиферроики активно исследуются в последнее время в связи с наличием магнитного и ферроэлектрического порядка [1]. В результате взаимодействия между магнитной и электрической подсистемами можно управлять электрической поляризацией магнитным полем, и магнитными характеристиками электрическим полем [2-3]. Это даст возможность увеличить плотность записи информации, сделать память энергонезависимой. Введение дефектных состояний в мультиферроики вызовет изменение проводимости, которой можно будет управлять доменными границами в электрическом поле. Проводимость в полупроводниках можно регулировать магнитным полем, даже в парамагнитном состоянии [4].

В работе исследуется возможность управлять током под действием света и магнитного поля в пленках $BiFe_{1-x}Co_xO_3$ с электронным допированием, которое достигается путем замещения трехвалентного железа ионами кобальта с одним дополнительным электроном в t_{2g} оболочке.

Пленки феррита висмута, допированного кобальтом, получены методом вспышки прекурсоров твердых растворов $BiFe_{0.8}Co_{0.2}O_3$ на предметные стекла. Напыление выполнялось в вакуумной установке с давлением в реакционной камере 10^{-3} Па, а температуру танталового испарителя поддерживали в пределах 2000°С. Температура подложки менялась в интервале 250-300°С. Геометрические размеры пленки 13х17 мм и толщиной 980 нм. Согласно рентгеноструктурному анализу соединение $BiFe_{1-x}Co_xO_3$ (BFCO) имеет ромбоэдрическую структуру.

Влияние света на резистивные характеристики и ток определим из ВАХ измерений, измеренных без света и при освещении лазером в голубом диапазоне на длине волны 405 нм. ВАХ линейны до 400 К, при дальнейшем нагревании становятся нелинейными (рис. 1). Это связано с примесными состояниями, образованными ионами кобальта и кислородными вакансиями, которые будут давать вклад в проводимость. При малых напряжениях инжектированные носители тока с электродов заполняют мелкие ловушки. С ростом напряжения U>Uc мелкие ловушки заполняются и вклад в сопротивление начинают давать переходы электронов (дырок) на более высоко лежащие вакантные состояния. При освещении ток незначительно увеличивается на 2-5%.

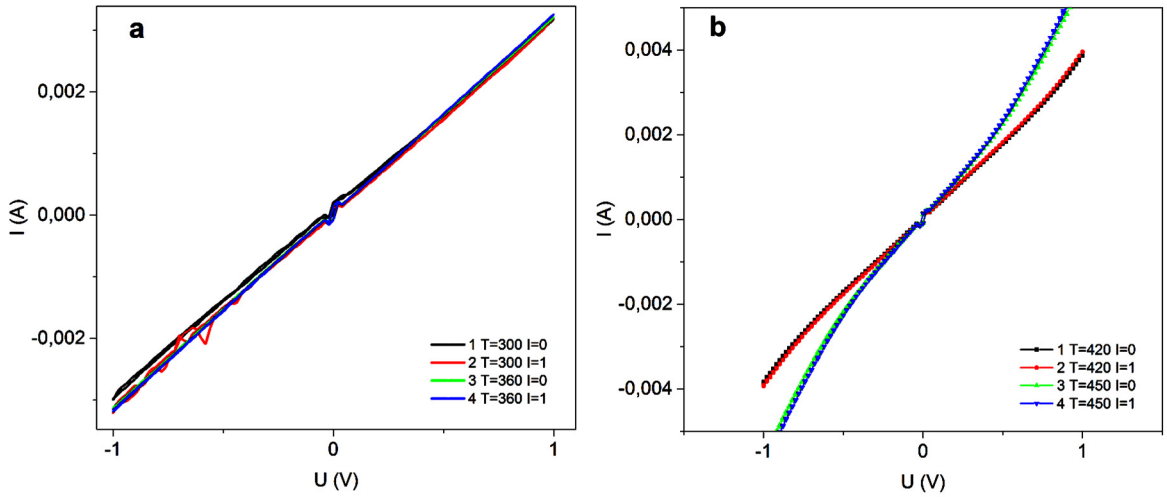


Рис.1. ВАХ пленки BiCo0.2Fe0.8O3 без освещения (1,3,5,7) и с λ=405 нм (2,4,6,8) при температуре T=300 K (1,2), 360 K (3,4) (a), T=420 K (5,6), 450 K (7,8) (b)

Влияние магнитного поля на проводимость найдем из полевой зависимости проводимости, которая изображена на рис. 2 при фиксированных температурах. При приближении к температуре магнитного фазового перехода проводимость растет в магнитном поле. Рост проводимости связан с перескоковым механизмом электронов по ионам железа. Вероятность перескока увеличивается, если магнитные моменты ориентированы параллельно и уменьшается при других направлениях намагниченности. Зависимость проводимости от магнитного поля описывается в рамках модели ферронов:

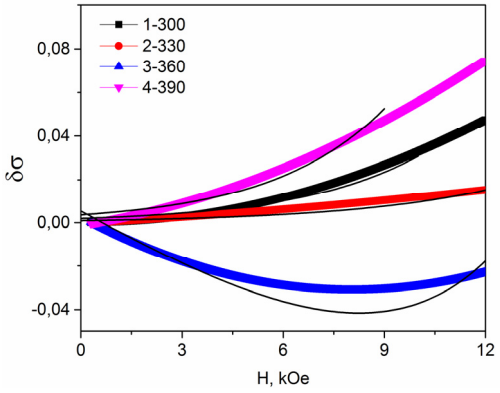


Рис. 2. Полевая зависимость проводимости $\delta 6 = \frac{6(H)-6(0)}{6(H)}$ *для пленки* $BiCo_{0.2}Fe_{0.95}O_3$ *при температурах (1)300K, (2)330K,(3)360K и (4)390K. Тонкие линии соответствуют аппроксимации выражением (1).*

$$\left(\sigma(H)-\sigma(0)\right)/\sigma(0)=1-\exp\left(-BH\xi/k_BT\right) \quad (1)$$

где B – определяется комбинацией энергий кулоновского взаимодействия электронов в примесной области, H- внешнее магнитное поле, ξ -радиус локализации электронов. При нагревании радиус феррона растет, уменьшается потенциальный барьер для перескока электронов между ферронами.

В пленке $BiCo_xFe_{1-x}O_3$ с концентрацией кобальта x=0.05 зависимость тока от напряжения является линейной функцией. В магнитном поле 12 кЭ ток и проводимость увеличиваются. Зависимость проводимости от магнитного поля удовлетворительно описывается в модели перескоков

электронов с учетом спиновой поляризации. Так как расстояние между ионами кобальта для x=0.05 много меньше, чем для состава с x=0.2, то увеличение потенциального барьера приводит к уменьшению влияния магнитного поля на проводимость. Два метода измерений проводимости приводят к увеличению проводимости в магнитном поле при приближении к температуре магнитного фазового перехода.

Итак, обнаружен фотоэффект на пленках $BiCo_xFe_{1-x}O_3$ для концентрации x=0.2 Найдена линейная зависимость тока от напряжения ниже 400 К. Установлен рост проводимости в магнитном поле для двух концентраций, причем с ростом концентрации эффект магнитопроводимости возрастает. Увеличение проводимости объясняется в модели ферронов с перескоком электронов между ферронами с учетом спиновой поляризации электронов.

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента РФ № МК-620.2021.1.2

[1] M. Fiebig, J. Phys. D. Appl. Phys. B **8** R123 (2005).
[2] L.V. Udod et al European Physical Journal Plus **135** 776 (2020).
[3] S.S. Aplesnin et al JETP Letters **110** 223 (2019).
[4] S.S. Aplesnin and M.N. Sitnikov, JETP Letters **100** 95 (2014).

Структурные фазовые переходы в пиростаннате висмута при катионном замещении олова железом

Л.В.Удод [1,2], О.Б.Романова [1], К.И.Янушкевич [3]
[1] *Институт физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия*
e-mail: luba@iph.krasn.ru
[2]*Сибирский государственный университет науки и технологий имени М.Ф. Решетнева, Красноярск, Россия*
[3] *НПЦ НАН Белоруссии по материаловедению, Минск, Беларусь*

Пиростаннат висмута $Bi_2Sn_2O_7$ принадлежит к семейству пирохлоров, которое интересно своими физическими свойствами, в частности, в них проявляются структурные фазовые переходы типа смещения в кислородно-октаэдрических структурах, которые обычно сопровождаются резкими изменениями диэлектрических, механических, оптических и других свойств [1].

Гетеровалентное замещение ионов Sn^{4+} на Fe^{3+} в $Bi_2Sn_2O_7$ приводит к изменению температуры α→β перехода [2] и к понижению кристаллической симметрии, индуцирует искажения кристаллической структуры и с ростом концентрации приводит к фазовым переходам типа смещения. Так в $Bi_2(Sn_{1-x}Fe_x)_2O_7$, x=0.2 при T=140 K обнаружен переход из моноклинной в триклинную симметрию [2]. Этот переход сопровождается сжатием кристаллической решетки и максимумом в температурной зависимости коэффициента теплового расширения.

Ионы Sn^{4+} в $Bi_2Sn_2O_7$ находятся в кислородном октаэдре SnO_6. При гетеровалентном замещении Sn^{4+} на Fe^{3+} образуются вакансии в катионной и анионной подсистемах. Анализ мессбауэровских спектров, позволил сделать предположение о двух неэквивалентных позициях ионов Fe^{3+} с различной степенью ковалентности и различной степенью искажения координационных октаэдров. Формы линии спектров свидетельствуют о выкоспиновом состоянии ионов железа [3]. ЭПР исследования $Bi_2Sn_{2-x}Fe_xO_7$, x=0,1; 0,2 также показали две неэвивалентные октаэдрические позиции [3].

В связи с этим, задачей данной работы является определение взаимосвязи структурных фазовых переходов с магнитными характеристиками и электрической поляризацией $Bi_2(Sn_{1-x}Fe_x)_2O_7$, x=0,1; 0,2.

Эксперимент Синтез $Bi_2(Sn_{1-x}Fe_x)_2O_7$, x=0,1; 0,2 осуществлялся методом твердофазной реакции. Синтезированные образцы соответствуют моноклинной ячейке Pc в α-фазе $Bi_2Sn_2O_7$ [2]. Магнитные свойства исследованы на установке MPMS-XL в магнитном поле до H=50000 Oe в интервале температур 4-300 K. Электрическая поляризация вычислена из измерения тока на электрометре «Keithley 6517B» в электрическом и

магнитных полях H=12 kOe и H=0 на частоте ν=0.01 Гц. Проведены два цикла измерений на образцах, на которые нанесены контакты из меди. Акустические свойства измерялись непосредственно на таблетках двумя пьезодатчиками, приклеенными серебряной пастой к плоскостям таблетки, один из которых являлся генератором, другой приемником ультразвуковых волн.

Магнитные свойства Температурные зависимости магнитной восприимчивости $Bi_2(Sn_{1-x}Fe_x)_2O_7$, x=0,1; 0,2, измеренные в магнитном поле 600 Oe, имеет парамагнитный вид. На Рис.1 представлена температурная зависимость обратной магнитной восприимчивости $Bi_2(Sn_{1-x}Fe_x)_2O_7$, x=0,1; 0,2. Для состава с x=0.1 температурная зависимость $1/\chi$ описывается законом Кюри-Вейсса $1/\chi = (T-\Theta)/C$ во всем интервале температур. Парамагнитная температура Кюри отрицательна и имеет значение Θ=-10 К. Величина эффективного магнитного момента ионов железа равна $\mu_{eff} = 5.76\mu_B$. Исходя из полученных экспериментальных данных, вычисленное значение g- фактора составляет g=1.95.

Температурная зависимость обратной восприимчивости $Bi_2(Sn_{1-x}Fe_x)_2O_7$, x=0.2 меняет угол наклона в области структурного перехода, T=130-140 К, что связано с уменьшением антиферромагнитного взаимодействия при нагревании. В интервале температур 20-130 К величина парамагнитной температуры Кюри Θ_1 = -39.2 К, а в интервале 130-230 К Θ_2 = -9.2 К. С увеличением температуры происходит уменьшение μ_{eff} с $\mu_{eff1} = 6.3\mu_B$ до $\mu_{eff2} = 5.77\mu_B$, что соответствует изменению g-фактора от g1=2.13 до g2=1.95.

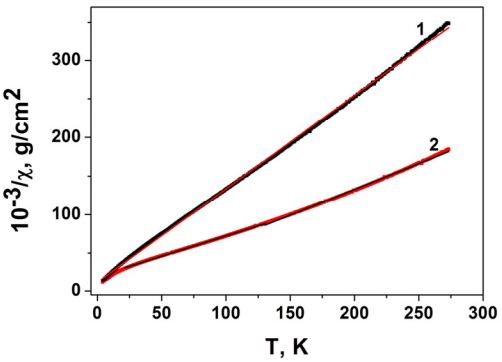


Рис.1 Температурная зависимость обратной магнитной восприимчивости Bi2(Sn1-xFex)2O7. Кривая 1 соответствует x=0.1, 2-x=0.2.

Рассчитанные из магнитных измерений, значения g-фактора и эффективного магнитного момента коррелируют с данными ЭПР [3] и соответствуют высокоспиновому состоянию ионов железа Fe^{3+}.

Полевые зависимости намагниченности (рис.2) нелинейные для двух концентраций $Bi_2(Sn_{1-x}Fe_x)_2O_7$, x=0.1 и 0.2. Нелинейное поведение намагниченности в магнитных полях до 50 кОе в парамагнитном состоянии при температурах до 200 К связано с квадратичным магнитоэлектрическим эффектом.

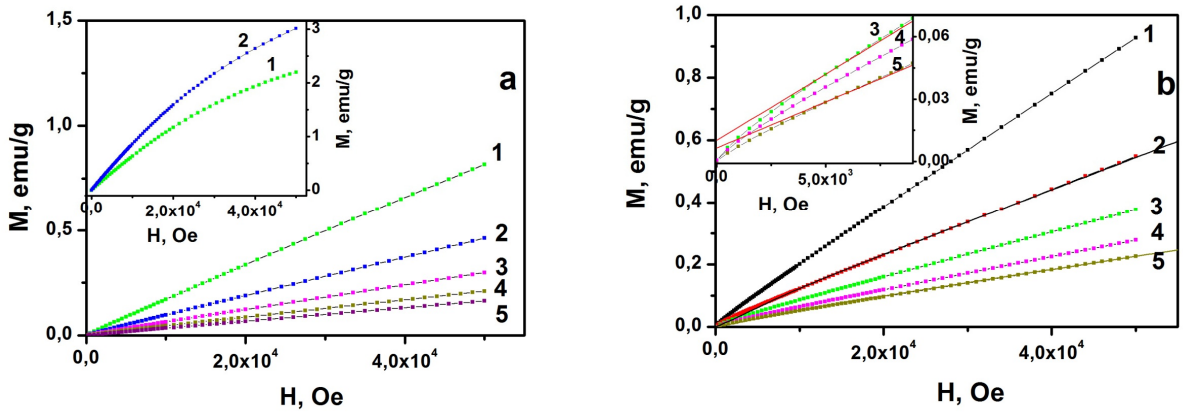


Рис.2 Полевая зависимость намагниченности Bi2(Sn1-xFex)2O7, x=0.1 (a); 0.2 (b) при различных температурах. Кривая 1 соответствует 30 K, 2-60 K, 3-100 K, 4-150 K, 5-

Акустические свойства Структурные фазовые переходы в железо-замещенном пиростаннате висмута подтверждаются аномалиями в температурной зависимости коэффициента затухания звука. Для образца $Bi_2(Sn_{1-x}Fe_x)_2O_7$, x= 0.1 (рис.3a) α(T) качественно описывается линейной функцией до T=430 K. В окрестности α→β перехода, T=430 K, температурная зависимость коэффициента затухания выходит на плато. При T=350 K поглощение энергии вызвано внутренним трением, а при приближении к α→β переходу, T=400 K рассеянием на доменных границах.

Температурная зависимость коэффициента затухания для образца

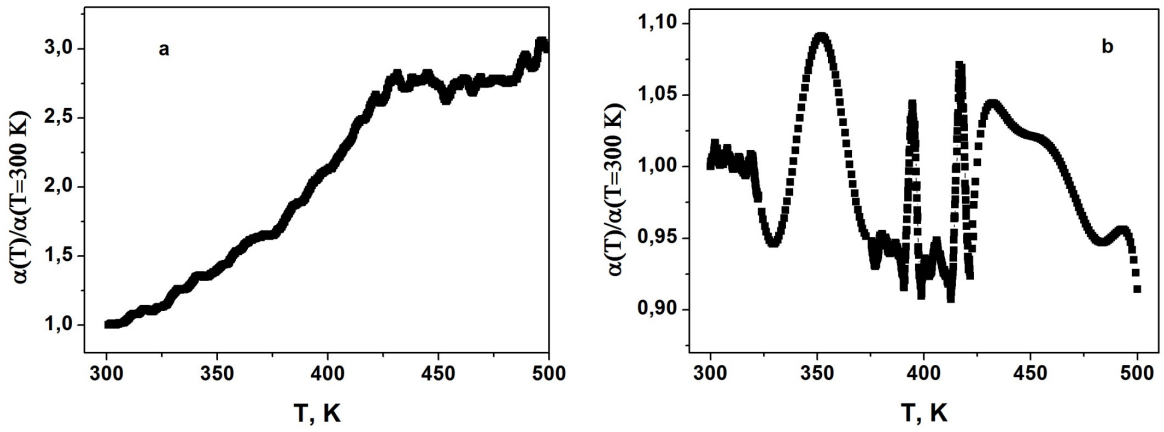


Рис.3 Температурная зависимость коэффициента затухания звука $Bi_2(Sn_{1-x}Fe_x)_2O_7$, x=0.1 (a); x=0.2 (b).

$Bi_2(Sn_{1-x}Fex)_2O_7$, x= 0.2 (рис.3b) имеет ряд аномалий. Четкий симметричный пик при температуре 350 K согласуется с аномалиями на температурной зависимости коэффициента теплового расширения образца в интервале 320-380 K [2]. Часть доменов, содержащих ионы железа начинают перестраиваться при T=350 K, а при T=430 K весь образец переходит в

однофазное состояние, β- фазу. С увеличением концентрации железа начало фазового перехода смещается в сторону низких температур.

Электрическая поляризация Соединение $Bi_2(Sn_{1-x}Fe_x)_2O_7$, x=0,1 проявляет параэлектрические свойства, поляризация линейна до T=300 К и соответствует закону $P=\varepsilon_0\chi E$, где ε_0-диэлектрическая проницаемость, χ-восприимчивость, E-электрическое поле. В соединении $Bi_2(Sn_{1-x}Fe_x)_2O_7$, x=0,2 обнаружены симметричные петли гистерезиса. Образование вакансий в катионной и анионной подрешетке при замещении Sn^{4+} ионами Fe^{3+} вызывает образование донорных и акцепторных примесных состояний. Под действием внешнего электрического поля носители тока диффундируют к поверхности домена и локализуются в ловушках. В результате межкристаллические границы становятся заряженными, что приводит к росту ширины петли гистерезиса. При гетеровалентном замещении наиболее вероятный механизм электронной поляризации, связанной с возникновением анионных вакансий. Кислородные вакансии являются эквивалентными положительными зарядами, вблизи которых для их компенсации в соответствии с принципом электронейтральности локализуются примесные электроны.

На основании выполненных экспериментальных исследований установлена взаимосвязь структурных фазовых переходов с магнитными свойствами $Bi_2(Sn_{1-x}Fe_x)_2O_7$, x=0,1; 0.2. Обнаружено не линейное поведение намагниченности в магнитных полях до 50 кОе в парамагнитном состоянии при температурах до 200 К. Для x=0.2 установлено увеличение магнитного момента и уменьшение антиферромагнитного обмена в области структурного фазового перехода от триклинной структуры к моноклинной. С увеличением концентрации ионов железа, x=0.2 в пиростаннате висмута обнаружен гистерезис электрической поляризации миграционного типа. Аномалии в температурной зависимости коэффициента затухания звука указывают на существование структурного фазового перехода из моноклинной структуры в триклинную.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и БРФФИ в рамках научного проекта № 20-52-00005.

[1] F.Jonah, J.Sheerane, Ferroelectric crystals, Mir, M. (1981).
[2] L.V.Udod, S.S.Aplesnin, M.N.Sitnikov, O.B.Romanova, M.N.Molokeev, J. All. Comp. **804,** 281 (2019).
[3] L.Udod, S.Aplesnin, M.Sitnikov, O.Romanova, O.Bayukov, A.Vorotinov, D.Velikanov, G.Patrin, EPJP **135**, 776 (2020).

Влияние криогенного термоциклирования на свойства быстрозакаленных сплавов системы TiNi-TiCu с высоким содержанием меди

А.В. Шеляков [1], О.Н. Севрюков [1], Н.Н. Ситников [1,2], К.А. Бородако [1], И.А. Залетова [1,2]
[1] НИЯУ МИФИ, Москва, Россия
e-mail: alex-shel@mail.ru
[2] АО ГНЦ ««Центр Келдыша», Москва, Россия
e-mail: sitnikov_nikolay@mail.ru

Уникальные свойства сплавов, обладающих эффектом памяти формы (ЭПФ), обеспечивают все более широкое их применение в робототехнике, авиационных и космических технологиях, энергетике, приборостроении, биомедицине и биотехнологии [1]. Для создания миниатюрных и быстродействующих устройств на основе сплавов с ЭПФ требуются тонкие материалы с узким температурным гистерезисом мартенситного превращения. Перспективным вариантом материала, удовлетворяющего этим требованиям, являются сплавы квазибинарной интерметаллической системы TiNi-TiCu, полученные быстрой закалкой из жидкого состояния в виде тонких лент толщиной 30-50 мкм [2]. Этот метод при высоких скоростях охлаждения (около 10^6 К/с) позволяет получать сплавы с высоким содержанием меди (более 20 ат.%) в аморфном состоянии, которые после кристаллизации обладают наилучшими характеристиками ЭПФ.

В последнее время многими исследованиями показано, что фазовый состав, морфология и средний размер зерна кристаллизованных из аморфного состояния высоколегированных сплавов системы TiNi-TiCu сильно зависит от условий кристаллизации [3]. Отжиг со сверхвысокой скоростью нагрева (например, электроимпульсная обработка) приводит к формированию более дисперсных структур по сравнению с обычным изотермическим отжигом. В то же время существенное влияние оказывает структура исходного аморфного состояния как прекурсора для формирования кристаллических фаз. Обычно кристаллизация аморфных сплавов способствует зарождению, а не росту кристаллов, что исключительно благоприятно для создания однородной ультрамелкозернистой структуры. Однако недавно нами было установлено, что при увеличении содержания меди в быстрозакаленных сплавах TiNi-TiCu с 25 до 38 ат.%, приводящем к повышению степени аморфности, после высокоскоростной кристаллизации одиночным импульсом электрического тока длительностью 10 мс вопреки вышесказанному происходит не измельчение структуры сплава по сравнению с результатами изотермической обработки, а наблюдается существенное увеличение среднего размера зерна [4].

Причиной наблюдаемого явления, по-видимому, является то, что скорость роста кристаллов превышает скорость их зарождения. Это может быть связано со снижением числа центров кристаллизации в начальном аморфном состоянии или то, что «вмороженные» центры кристаллизации не обладают правильной структурой. С целью стимулирования процессов нуклеации при дальнейшей кристаллизации сплавы были подвергнуты дополнительной термической обработке в пределах аморфного состояния путем проведение процедуры «омоложения». Омоложение представляет собой структурное возбуждение аморфных тел, сопровождающееся увеличением энтальпии и свободного объема и, следовательно, является обратным старению [5]. В работе [6] показано, что криогенное термоциклирование, заключающееся в кратковременном нагреве и последующем охлаждении до низких температур, позволяет получать более «расслабленные» состояния (с меньшим уровнем внутренних напряжений - релаксация) с более высокой энергией. Недавно с помощью синхротронной рентгеновской дифракции показано, что криотермоциклирование приводит к разупорядочению в ближнем масштабе [7]. Структурное омоложение в металлических стеклах приводит к увеличению потенциальной энергии, уменьшению плотности и изменению локальной структуры, а также механическому размягчению [8].

В настоящей работе омолаживающее воздействие на быстрозакаленные сплавы системы TiNi-TiCu с содержанием меди 25, 30 и 40 ат.% (обозначенные в дальнейшем 25Cu, 30Cu и 40Cu, соответственно) оказывали двумя способами. В первом из них использовалось криогенное термоциклирование по специально разработанной методике: полученные быстрозакаленные ленты были подвергнуты воздействию 10 изотермических циклов, каждый их которых заключался в 120 секундном удержании образца при температуре 77 К в жидком азоте и 60 секундной выдержке при температуре 373 К в кипящей воде. Во втором способе аморфные ленты изотермически обрабатывались в печи в течении 10 минут при фиксированной температуре 623 К (ниже температуры стеклования сплавов), а затем быстро охлаждались в жидком азоте до температуры 77 К. С помощью этих способов были получены две серии экспериментальных образцов сплавов 25Cu, 30Cu и 40Cu с термически активированным аморфным состоянием.

Микроструктура поперечного сечения образцов изучалась с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) FEI Quanta 600 FEG. Проведенные исследования образцов не выявили присутствия каких-либо структурных элементов, в том числе кристаллитов, ни на поверхности, ни в объеме ленты как в исходном состоянии после закалки, так и после термических воздействий, т.е. СЭМ-изображения демонстрируют полностью аморфную структуру. Это подтверждается результатами рентгеноструктурного анализа, проведенного на дифрактометре PANalytical

Empyrean в Cu-Kα излучении. На рентгенограммах лент во всех образцах наблюдается размытое аморфное гало в области 2θ = 39 - 45 градусов.

Для определения температурных интервалов и характера кристаллизации сплавов из аморфного состояния использовался метод дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК). Полученные данные показали, что содержание меди существенно влияет на процессы кристаллизации: в сплавах 25Cu и 30Cu происходит одностадийная кристаллизация, в то время как в сплаве 40Cu наблюдаются два раздельных пика выделения тепла. При этом криотермоциклирование не приводит к заметным изменениям значений температур стеклования и пиков кристаллизации, а также энтальпии кристаллизации.

Высокоскоростная кристаллизация аморфных сплавов проводилась с помощью электроимпульсной обработки (ЭИО) за счет пропускания через образец импульса электрического тока длительностью 10 мс. Рентгеноструктурные исследования показали, что во всех образцах формируется кристаллическая фаза B2, которая при охлаждении превращается в мартенситную фазу B19. При этом СЭМ-изображения поперечного сечения образцов выявили неоднородную микроструктуру сплавов, состоящую из столбчатых кристаллов вблизи поверхностей ленты и микроразмерных кристаллов с субзеренной внутренней структурой. Показано, что криогенное термоциклирование практически не влияет на размеры кристаллов и в основном приводит к измельчению субзеренной структуры, что, по всей видимости, вызывает смещение температурных интервалов мартенситного превращения в сплавах, наблюдаемое на полученных ДСК-кривых.

Работа выполнена за счет гранта РНФ (проект №19-12-00327).

[1] I. Stachiv, E. Alarcon, M. Lamac, Metals **11** 415 (2021).
[2] A.V. Shelyakov, O.N. Sevryukov, N.N.Sitnikov, et al. J. Phys.: Conf. Ser. **1686**, 012056 (2020)
[3] A.V.Shelyakov, N.N.Sitnikov, A.P. Menushenkov, et al. Thin Solid Films. **519**, 5314 (2011).
[4] A. Shelyakov, N. Sitnikov, I. Khabibullina, et al. Mater. Lett. **248**, 48 (2019).
[5] A. Concustell et al. Phil. Mag. Lett. **89**, 831 (2009).
[6] S.V. Ketov, Y.H. Sun, S. Nachum, et al., Nature **524**, 200 (2015).
[7] S.J. Kang, Q.P. Cao, J. Liu, et al., J. Alloys Comp. **795**, 493 (2019).
[8] J.Saida, et al., Sci. Tech. Adv. Mater. **18(1)**, 152 (2017).

Влияние деформации кручением под высоким давлением на структуру и свойства слоистого аморфно-кристаллического композита Ti_2NiCu

Сундеев Р.В.[1], Шалимова А.В.[2], Ситников Н.Н.[3], Черногорова О.П.[4], Глезер А.М. [2], Пресняков М.Ю.[5], Каратеев И.А.[5], Печина Е.А.[6]
[1] РТУ МИРЭА, г. Москва
[2] ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П. Бардина, г. Москва
[3] ГНЦ ФГУП «Центр Келдыша», г. Москва
[4] ИМЕТ РАН им. А.А. Байкова, г. Москва
[5] НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва
[6] ФТИ УрО РАН, г. Ижевск
sundeev55@yandex.ru

Методами просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии, рентгеноструктурного анализа и измерения твердости индентирования проведены комплексные исследования структурно-фазовых превращений и механических свойств при кручении под высоким давлении (КВД) слоистого аморфно-кристаллического композита Ti_2NiCu. Образцы исследуемого слоистого композита Ti_2NiCu получали методом закалки из жидкого состояния при скорости охлаждения $\approx 10^5$ К/с. Образцы деформировали методом КВД при комнатной температуре и квазигидростатическом давлением 6 ГПа до значения деформации, соответствующей $n = 8$, (n – число полных оборотов подвижной наковальни).

В ходе исследований обнаружены три области слоистого композита, различающиеся по структуре: аморфная, кристаллическая и переходная. Рассмотрены процессы, происходящие в разных частях композита при КВД. Показано, что в различных частях композита – кристаллической и аморфной, в ходе КВД одновременно осуществляются два различных механизма деформации. В кристаллической области происходит аморфизация путем расширения аморфных границ зерен, а в аморфной части – зарождение и развитие полос сдвига, в которых в дальнейшем могут образовываться нанокристаллы. Обнаружено, что переходный (граничный) слой играет двоякую роль в ходе КВД: при КВД $n \leq 4$ разграничивает две области композита с разными механизмами деформации, после преобразования композита в аморфно-нанокристаллический агрегат ($n \geq 4$) не зафиксировано заметного вклада переходного слоя в структурные изменения и механические свойства материала в ходе КВД. Слоистый композит с одинаковым химическим составом прекурсоров после $n \geq 4$ в ходе КВД, деформируется, в целом как, макроскопически однородный материал.

Работа выполнена при финансовой поддержке граната РФФИ № 20-02-00291 и гранта РНФ № 20-72-00001.

Гигантская магнитострикция многокомпонентных интерметаллидов на основе $TbFe_2$

М.Р.Хоменко [1], Н.Ю.Панкратов [1], А.Ю.Карпенков [2], С.А.Никитин [1]
[1] *Московский Государственный Университет М.В.Ломоносова, Москва, Россия*
e-mail: khomenko.mr17@physics.msu.ru
[2] *Тверской ГосударственныйУниверситет, Тверь, Россия*
e-mail: Karpenkov.AY@tversu.ru

Редкоземельные (R) и 3d-переходные металлы (M), такие как Fe, Co, Ni, образуют широкий класс соединений, известных своими уникальными свойствами. Особенно интересны соединения типа RM_2, относящиеся по стехиометрии к фазам Лавеса [1]. Фазы Лавеса встречаются в двух типах: кубическая (C15) и гексагональная (C14). Редкоземельные интерметаллиды со структурой фаз Лавеса с железом обладают высокой температурой Кюри, гигантской магнитострикцией и имеют относительно простую кристаллическую структуру. Они являются ферримагнетиками с двумя подрешётками, магнитные моменты которых направлены противоположно друг другу и вносят аддитивный вклад в большинство магнитных свойств. В интерметаллических соединениях $R(Fe,Co)_2$, где R – комбинация нескольких редкоземельных ионов, константа магнитокристаллической анизотропии формируется из аддитивных вкладов одноионных констант анизотропии ионов редкоземельных металлов (РЗМ), умноженных на их концентрацию.

Магнитострикция – это изменение формы и размеров тела при его намагничивании. В настоящее время весьма актуальна проблема создания магнитострикционных материалов, обладающих гигантскими значениями магнитострикции в небольших полях при комнатной температуре [2,3]. Для получения высоких значений магнитострикции в таких условиях необходимо, прежде всего, минимизировать константы магнитной анизотропии. Целью настоящей работы являлось изучение влияния частичного замещения железа ионами кобальта на магнитострикционные свойства многокомпонентных соединений $Tb_{0,16}Ho_{0,84}Fe_{2-x}Co_x$, обладающих кубической структурой фаз Лавеса (C15).

Синтез сплавов $Tb_{0,16}Ho_{0,84}Fe_{2-x}Co_x$ (x = 0,1; 0,2; 0,3; 0,4) проводился методом высокочастотной индукционной плавки в атмосфере особо чистого аргона, давление которого составляло 1,1–1,2атм. из высокочистых редкоземельных элементов и Fe. Затем образцы подвергались гомогенизирующему отжигу в течение 2 недель. Рентгеновский спектр при комнатной температуре снимался на дифрактометре Дрон-4 с использованием излучения CuK_α, в геометрии Брэгга-Брентано с шагом 0,026º, в диапазоне углов от 20º до 120º. Параметры элементарной ячейки определялись по отражениям в области углов $2\theta = 20 - 105$º. Фазовый состав

образца исследовался с помощью Ритвельд-анализа в программе Powred Cell. Магнитострикция была измерена тензометрическим методом. Тензорезисторы были изготовлены из тензочувствительной проволоки, не обладавшей заметным гальваномагнитным эффектом. Измерения проводились на поликристаллических образцах в области температур 80-350 K в магнитном поле до 12 кЭ.

Проведенный нами анализ показал, что сплавы данной системе обладают кубической структурой фазы Лавеса C15 и содержат не более 5% второй фазы RFe_3 (с кристаллической структурой типа $PuNi_3$). При замещении железа кобальтом параметр решётки линейно уменьшается, так как атомный радиус кобальта r_{Co} меньше атомного радиуса железа r_{Fe}. Объём элементарной ячейки также снижается с увеличением содержания кобальта.

Были измерены полевые зависимости продольной и поперечной магнитострикции для составов с разной концентрацией кобальта в полях до 12 кЭ при комнатной температуре. Во всех образцах данной серии наблюдается положительная продольная и отрицательная поперечная магнитострикция. Зависимости $\lambda_{\parallel}(H)$ и $\lambda_{\perp}(H)$ демонстрируют линейный участок в полях от 0,5 до 1,9 кЭ, из которого можно определить коэффициент магнитострикционной восприимчивости $\frac{d\lambda}{dH}$. Продольная и поперечная магнитострикция достигают насыщения в полях выше H = 2кЭ.

Анизотропная и объёмная магнитострикция были рассчитаны следующим образом:

$$\lambda_a = \lambda_{\parallel} - \lambda_{\perp} \quad (2)$$

$$\omega = \lambda_{\parallel} + 2\lambda_{\perp} \quad (3)$$

В таблице 1 представлены характеристики исследованных образцов: параметр решётки, магнитострикционная восприимчивость, константа магнитострикции λ_{111} в зависимости от концентрации Co при T=300K.

Таблица 1 Параметр решётки, объем элементарной ячейки, магнитострикционная восприимчивость, объёмная магнитострикция насыщения и константа магнитострикции λ_{111} в зависимости от концентрации Co в $Tb_{0,16}Ho_{0,84}Fe_{2-x}Co_x$ при T=300K.

x	a, A	V, A^3	$\left(\frac{\partial\lambda}{\partial H}\right)_{max}$, $10^{-6}кЭ^{-1}$	ω_s, 10^{-6}	λ_{111}, 10^{-6}
0,1	7,311	390,78	165	-140	366
0,2	7,309	390,46	344	45	578
0,3	7,307	390,14	254	51	463
0,4	7,305	389,82	285	76	563

Соединения обладают большой анизотропной магнитострикцией, достигающей $500 \cdot 10^{-6}$ при x=0,2. В данном классе соединений объёмная

магнитострикция ($\omega = -100 \cdot 10^{-6}$ для $Tb_{0,16}Ho_{0,84}Fe_{2-x}Co_x$) значительно меньше анизотропной [4]. Объёмная магнитострикция меняет знак с положительного на отрицательный с уменьшением содержания кобальта, при x=0,1.

Наибольшая магнитострикционная восприимчивость наблюдается, также как и наибольшая анизотропная магнитострикция, в составе с x=0,2 и равна $344 \cdot 10^{-6}$ кЭ$^{-1}$. При этом линейная зависимость анизотропной магнитострикции от поля (а значит, и рабочая точка магнитострикционного излучателя) в этом составе проявляется в наименьшем поле (от 0,2 до 0,9 кЭ). Константа магнитострикции λ_{111}, отвечающая за ромбоэдрические искажения, была вычислена из измерений продольной магнитострикции:

$$\lambda_{||} = \frac{3}{5}\lambda_{111} + \frac{2}{5}\lambda_{100}, \quad (4)$$

где было учтено, что тетрагональные искажения в RFe_2 значительно меньше ромбоэдрических, следовательно, константа магнитострикции λ_{100}, отвечающая за тетрагональные искажения решётки, мала по сравнению с λ_{111}.

Проведённое исследование показало, что влияние кобальта заключается в увеличении магнитострикционной восприимчивости $\left(\frac{d\lambda}{dH}\right)_{max}$ и уменьшения параметра решётки с увеличением содержания кобальта, при этом величина анизотропной магнитострикции практически не изменяется. Состав с x=0,2, в котором была обнаружена наибольшая магнитострикционная восприимчивость, наблюдаемая при этом в наименьшем поле, может быть использован при создании анизотропных датчиков размера и переключателей в управляющих схемах на основе высокомагнитострикционных материалов.

[1] А. С. Илюшин. Структурная физика редкоземельных интерметаллических соединений Ч IV . Структурные фазовые переходы в магнитоупорядочивающихся редкоземельных фазах Лавеса. МГУ, Физический факультет Москва, 2000, 26 с.
[2] A.E. Clarc.Magnetostrictive RFe_2 intermetallic compounds. Handbook on the physics and chemistry of rare-earth/ Ed. K.A. Gshneider. North-Holland publishing company 1979.
[3] К.П. Белов. Магнитострикционные явления и их технические приложения. Наука, М., 1987.
[4] С. А. Никитин. Вестник Московского университета. Серия 3: Физика, астрономия. 2011. С27–40.

Первопринципные исследования модулированных структур мартенситной фазы сплава Ni_2MnGa

К.Р.Ерагер, Д.Р.Байгутлин, В.В.Соколовский, В.Д.Бучельников
Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
e-mail: eragerk@rambler.ru

В последние годы все больше внимания привлекают сплавы с магнитной памятью формы из-за значительной деформации, индуцированной магнитным полем и большого магнитокалорического эффекта, которые используются в современных технологиях [1, 2]. Наблюдение большой обратимой магнитодеформации связано с наличием модулированных низкосимметричных мартенситов в низкотемпературной фазе [3].

Известно, что сопротивление движению двойниковой границы в немодулированном (НМ) мартенсите намного больше, чем в модулированном, что приводит к значительной магнитодеформации, обнаруживаемой только в модулированном мартенсите [4]. В зависимости от состава модулированный мартенсит может быть пятислойным модулированным (5М), шестислойным модулированным (6М) и семислойным модулированным (7М).

Среди сплавов Гейслера Ni_2MnGa является материалом, демонстрирующим такие свойства, как гигантская магнитодеформация в их низкотемпературной мартенситной фазе [1]. Поскольку напряжение двойникования очень низкое только в модулированных структурах, применимость сплава Ni-Mn-Ga в устройствах на основе эффекта памяти формы напрямую ограничена диапазоном композиционной и температурной стабильности модулированного мартенсита. Поскольку небольшое отклонение от стехиометрии Ni_2MnGa или легирование другим элементом стабилизируют немодулированный мартенсит и дестабилизируют модуляцию [5, 6], то правильное понимание природы мартенситного превращения и его зависимостей от состава имеет важное значение при поиске новых сплавов с улучшенными свойствами.

Первопринципные вычисления свойств сплавов Ni_2MnGa выполнены с помощью метода присоединенных проекционных волн (PAW), реализованного в программном пакете VASP [7, 8]. Для описания обменно-корреляционной энергии выбрано обобщенное градиентное приближение в параметризации Пердью-Бурке-Эрнзерхофа [9]. Интегрирование зоны Бриллюэна проводено методом Монкхорста-Пака, используя *k*-сетку 12×12×12. Энергия обрезки плоских волн составляла 700 эВ, а параметр сходимости по энергии равнялся 10^{-8} эВ/атом. В качестве PAW псевдопотенциалов выбраны следующие электронные конфигурации: $3p^6 4s^2 3d^8$ для Ni $3p^6 4s^1 3d^7$ для Mn, и $4s^2 4p^1$ для Ga. Геометрическая

оптимизация кристаллических структур аустенитной и мартенситной фазы выполнена в рамках электронной и ионной релаксации. Кристаллическая структура аустенитной фазы задана 16-ти атомной кубической суперячейкой пространственной группы симметрии №225 (рис.1).

Нами было рассмотрено 2 модулированные пятислойные структуры 10M: (5M) и 10M: $(3\bar{2})_2$.

Геометрическая оптимизация модулированной структуры 10M мартенсита, состоящей из 40 атомов, образованных пятью тетрагональными элементарными ячейками, уложенными в направлении [110], рассчитывалась в рамках ионной релаксации. Интегрирование зоны Бриллюэна проводилось на сетке Монкхорста-Пака (12×2×10).

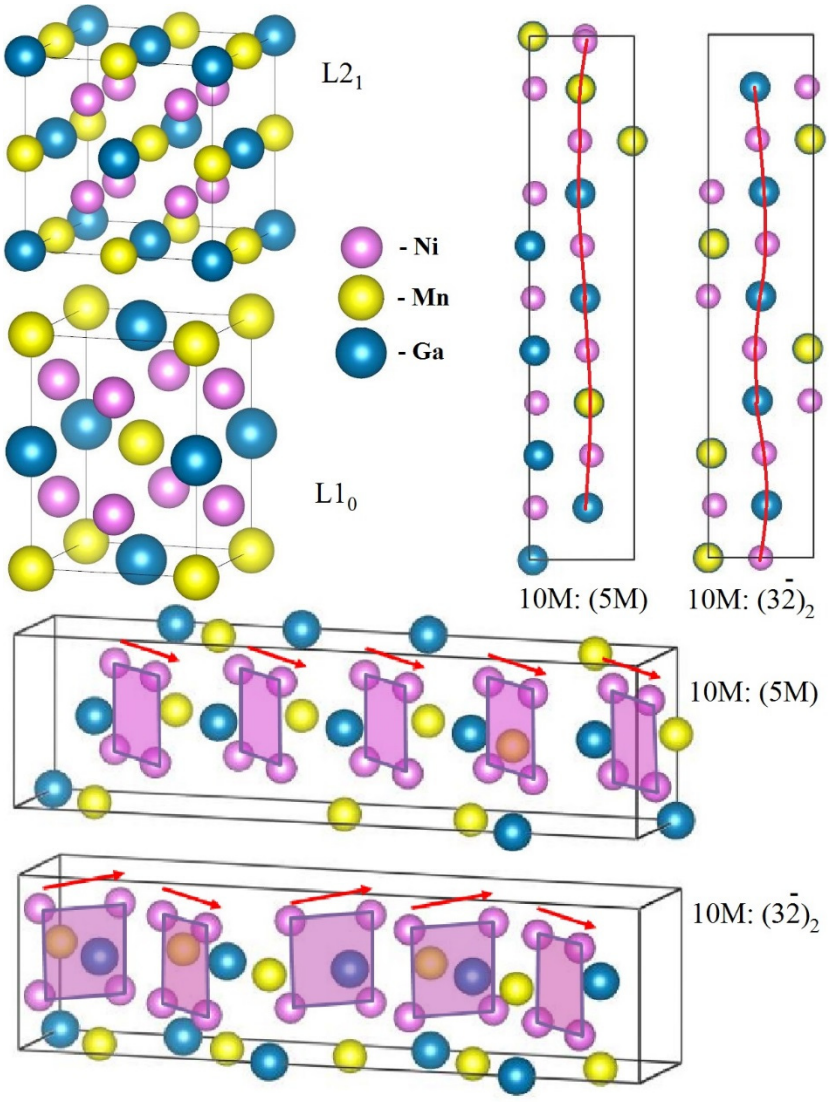


Рис. 1. Кристаллические структуры кубического $L2_1$, фазы НМ $L1_0$, 10M: (5M) и 10M: $(3\bar{2})_2$ сплава Ni_2MnGa.

Нанодвойниковая структура 10M: $(3\bar{2})_2$ получена в результате геометрической оптимизации положений атомов и параметров ячейки без

ограничений симметрии, и представляет собой чередующиеся последовательно плоскости, в то время как структура 10M: (5M) представлена в виде пяти одинаковых плоскостей, уложенных в одном направлении.

На рис. 2 представлена зависимость разницы энергии (ΔE) от тетрагонального искажения (c/a) стехиометрического сплава Ni_2MnGa.

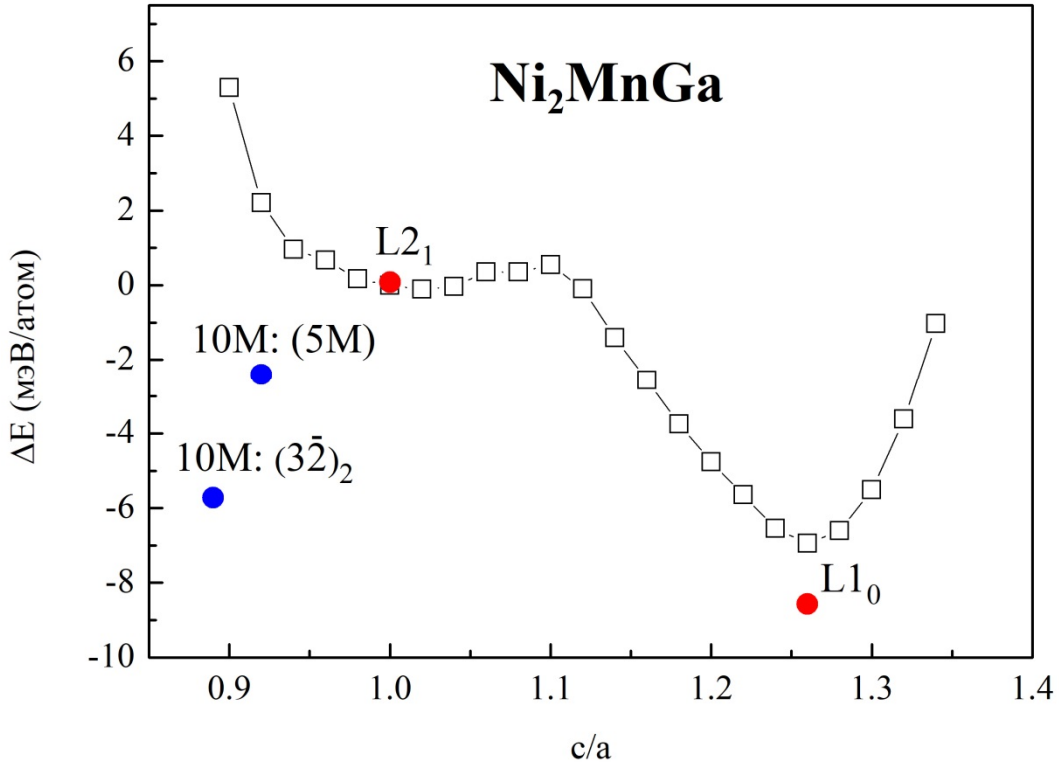


Рис. 2. Зависимость разницы энергии кристалла от тетрагонального искажения сплава Ni_2MnGa. Красными точками обозначены структуры аустенитной фазы $L2_1$ и фазы немодулированного мартенсита $L1_0$, синие точки – структуры 10M мартенсита, рассчитанные в рамках ионной релаксации.

По данным на рис. 2 энергия модулированных структур значительно ниже, по сравнению с фазой аустенита $L2_1$. Структура 10M: $(3\bar{2})_2$ является энергетически выгодной и приближается к абсолютному минимуму энергии, соответствующему немодулированному тетрагональному мартенситу $L1_0$ (Таблица 1). Предполагается, что энергию модулированного мартенсита можно получить более низкую, рассматривая структуры, образованные большим количеством чередующихся последовательно плоскостей по типу $(3\bar{2})_2$.

Таблица 1. Степень тетрагонального искажения (*c/a*), равновесные значения параметров решеток аустенитной и мартенситных фаз и значения разницы энергии (Δ*E*) относительно фазы $L2_1$ для состава Ni_2MnGa.

Состав		*c/a*	*a* (Å)	*b* (Å)	*c* (Å)	Δ*E* (мэВ/атом)
Ni_2MnGa	$(3\bar{2})_2$	0.89	4.289	21.079	5.404	-22.876
	5M	0.92	4.188	20.914	5.595	-9.616
	$L2_1$	1	5.801	5.801	5.801	0
	НМ	1.26	5.319	5.319	6.880	-34.277

Финансирование работы

Расчеты модулированных структур выполнены при поддержке проекта РНФ № 17-72-20022.

Расчеты немодулированных структур выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках госзадания № 075-00992-21-00.

Список литературы

[1] K. Ullakko, J. Huang, C. Kantner, R. Ohandley, and V. Kokorin, Appl. Phys. Lett. **69**, 1966 (1996).

[2] S. J. Murray, M. Marioni, S. M. Allen, R. C. O'Handley, and T. A. Lograsso, Appl. Phys. Lett. **77**, 886 (2000).

[3] V. A. Chernenko, C. Seguí, E. Cesari, J. Pons, and V. V. Kokorin, Phys. Rev. B **57**, 2659 (1998).

[4] E. Pagounis, R. Chulist, M. J. Szczerba, and M. Laufenberg, Appl. Phys. Lett. **105** (2014) 052405.

[5] A. Soroka, A. Sozinov, N. Lanska, M. Rameš, L. Straka, K. Ullakko, Scr. Mater. **144** (2018) 52–55.

[6] A. Pérez-Checa, D. Musiienko, A. Saren, A. Soroka, J. Feuchtwanger, A. Sozinov, J.M. Barandiaran, K. Ullakko, V.A. Chernenko, Scr. Mater. **158** (2019) 16-19.

[7] G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).

[8] G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B **59**, 1758 (1999).

[9] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).

Исследование влияния термической обработки на структуру и свойства быстрозакаленных слоистых аморфно-кристаллических лент из сплава TiNiCu

Н.Н. Ситников [1,2], А.В. Шеляков [2], И.А. Залетова [1,2], К.А. Бородако [2]
[1] *АО ГНЦ «»Центр Келдыша», Москва, Россия*
[2] *НИЯУ МИФИ, Москва, Россия*
e-mail: alex-shel@mail.ru
e-mail: sitnikov_nikolay@mail.ru

В настоящее время в мировой науке активно исследуются структура и свойства аморфных и кристаллических материалов, в том числе сплавов, испытывающих фазовое мартенситное превращение (МП) и проявляющих эффект памяти формы (ЭПФ). Вместе с тем, потенциальные возможности этих материалов реализованы далеко не полностью. В разнообразных исследованиях было установлено, что сочетание аморфной и кристаллической фаз в различных материалах в некоторых случаях позволяет улучшить их функциональные свойства, а иногда получить новые свойства. В частности, в сплавах квазибинарной системы TiNi-TiCu проявляются необычные свойства фазового перехода и термомеханического поведения, например эффект обратимой памяти формы (ЭОПФ) в быстрозакалённых слоистых аморфно-кристаллических лентах из сплавов TiNiCu. При этом в научной литературе недостаточно отражены работы по формированию слоистого аморфно-кристаллического состояния, обладающего ЭОПФ, и последующей термомеханической обработке с целью модификации эффектов памяти формы.

В представляемой работе исследовались аморфно-кристаллические ленты из сплава $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ (ат.%), полученные методом сверхбыстрой закалки расплава на вращающемся диске (метод планарного литья), толщиною около 30 мкм. В зависимости от параметров закалки возможно получение ленты, в которой с неконтактной (свободной) стороны формируется сплошной тонкий слой кристаллической фазы на аморфной основной части ленты, образующейся с контактной по отношению к закалочному диску стороны ленты. При этом формируется аморфно-кристаллический композит с чёткой границей, разделяющей аморфный и кристаллический слои. Применяя метод планарного литья с варьированием скорости охлаждения расплава в диапазоне 10^5-10^6 К/с, была получена серия образцов слоистых аморфно-кристаллических лент из сплава $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ с различным толщинами кристаллического слоя от 2 до 10 мкм. Полученные образцы были изучены методами металлографии, растровой электронной микроскопии (РЭМ), рентгеноструктурного анализа и дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК).

Проведенные исследования подтвердили наличие кристаллической структуры в слое с неконтактной (свободной) поверхности полученных образцов. При комнатной температуре на рентгенограммах от неконтактной поверхности вместе с мартенситной фазой B19 присутствует остаточная аустенитная фаза B2, которая не превратилась в фазу B19 при охлаждении из-за механических напряжений в поверхностном кристаллическом слое. Следует отметить, что наиболее интенсивные (основные) рефлексы фазы B19 наблюдаются в области 2θ=58-65 градусов, а не в области вблизи 42 градусов, что обычно характерно для этого сплава. Такое расположение основных пиков указывает на текстурированность поверхностного кристаллического слоя. При термоциклировании в интервале 25-70°C в кристаллическом слое происходит МП B2↔B19.

Во всех полученных образцах быстрозакалённых слоистых аморфно-кристаллических лент наблюдается ЭОПФ с деформацией изгибом без какой-либо дополнительной термомеханической обработки. Данный эффект заключается в следующем: в исходном состоянии при комнатной температуре лента имеет прямолинейную форму; при нагреве выше температуры начала обратного МП она начинает изгибаться и при температуре выше конца обратного МП принимает форму, близкую к кольцу. Охлаждение ленты до температуры ниже конца прямого МП приводит к её возврату в исходное прямолинейное состояние. В дальнейшем данный эффект повторяется в цикле нагрев-охлаждение. В исследуемых образцах при увеличении соотношения толщины кристаллического слоя к толщине аморфного слоя кривизна изгиба ленты при температуре выше окончания обратного МП увеличивается. При удалении кристаллического слоя методом электролитической полировки ЭОПФ при термоциклировании в интервале МП не наблюдалось.

Исследование температурных интервалов кристаллизации аморфного слоя в исходных образцах лент и в образцах с удалённым кристаллическим слоем показало, что поверхностный кристаллический слой оказывает существенное влияние на формирование кристаллической структуры ленты при кристаллизации. Установлено, что в аморфно-кристаллических лентах процессы кристаллизации начинаются при более низких температурах. На основе ДСК-кривых кристаллизации были выбраны режимы термообработки образцов в виде нагрева в калориметре до различных температур, соответствующих разным состояниям: 400°C и 420°C – температуры, при которых процессы кристаллизации ещё незаметны; 434°C – температура начала расстеклования; 445°C – температура завершения стадии расстеклования и начала процесса кристаллизации, 470°C – температура, при которой процесс кристаллизации полностью завершился. Исследования поперечных шлифов термообработанных образцов показало, что при температуре 400°C (*Рис. 1а*) не происходит заметных изменений в структуре ленты: в аморфной части ленты кристаллические включения отсутствуют, а

толщина поверхностного кристаллического слоя такая же как в исходном состоянии (около 3,5 мкм).

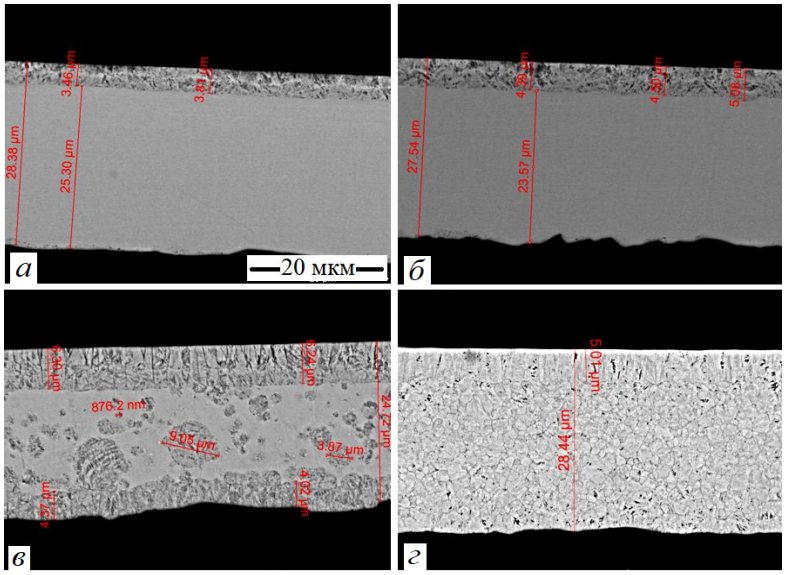


Рис.1 РЭМ-изображения поперечного сечения аморфно-кристаллической ленты после термообработки до температур 400°С (а), 420°С (б); 434°С (в) и 445°С (г)

При температуре 420°С наблюдается увеличение толщины поверхностного кристаллического слоя до 4-5 мкм, а с контактной стороны ленты присутствуют единичные кристаллические включения (*Рис. 1б*). Во внутренней аморфной части ленты кристаллические включения по-прежнему отсутствуют. При температуре 434°С наблюдаются кардинальные изменения в структуре ленты: с неконтактной поверхности ленты происходит увеличение толщины поверхностного кристаллического слоя до 6-7 мкм, что подтверждает его рост при повышении температуры обработки; в аморфной части ленты присутствуют многочисленные кристаллические включения, а с контактной стороны ленты присутствует сплошной слой кристаллических структур толщиной 4-5 мкм (*Рис. 1в*). При температуре 445°С в образце наблюдается полная кристаллизация, при этом формируется структура, в которой с неконтактной поверхности ленты наблюдается увеличение толщины поверхностного кристаллического слоя более 5 мкм, а во внутренней части ленты формируется однородная микроразмерная структура (*Рис. 1г*). При температуре 470°С структура ленты в перечном сечении близка к состоянию при температуре 445 °С.

В аморфно-кристаллической ленте после кристаллизации, как и в исходном состоянии после закалки, с неконтактной стороны на рентгенограммах наблюдается нестандартное для этих сплавов расположение основных рефлексов структуры типа В19 в области 58-65 градусов, дублирующие пики с меньшей интенсивностью располагаются в области 28-32 градусов. В то же время рефлексы от фазы В2, наблюдаемые в исходном состоянии, отсутствуют. Рентгеноструктурные исследования с

контактной стороны ленты показали наличие основных рефлексов фазы B19 в стандартной для этого сплава области 38-46 градусов. Интенсивность пиков от контактной поверхности значительно меньше, чем от неконтактной. В кристаллизованной ленте с ранее удалённым кристаллическим слоем рентгенограммы с обеих сторон ленты совпадают и соответствуют дифракционной картине, полученной с контактной (аморфной) стороны.

Исследование влияния изотермической обработки (ИТО) аморфно-кристаллических лент в муфельной печи проводилось при температуре 500°С с выдержкой 300 секунд в «свободном» состоянии и в оправке для придания прямолинейной или изогнутой формы. После кристаллизации в свободном состоянии образцы характеризуются формой близкой к кольцу. При термоциклировании кристаллизованных образцов в интервале МП (в диапазоне 25-100°С) в них не наблюдается ЭОПФ, а присутствует только однократный ЭПФ, т.е. образцы восстанавливают форму кольца при нагреве после их предварительного деформирования и сохраняют эту форму после охлаждения. Образцы, кристаллизованные в прямолинейной оправке, после остывания и извлечения из оправки характеризуются прямолинейной формой. При нагреве до температуры 100°С образцы изгибаются, но незначительно (намного меньше изгиба при реализации ЭОПФ в исходном быстрозакалённом состоянии), а при остывании до комнатной температуры вновь принимают прямолинейную форму. Таким образом, наблюдается ослабленный (остаточный) ЭОПФ. Образцы, кристаллизованные в оправке изогнутой формы радиусом 25 мм, после остывания и извлечения из оправки обладают ЭОПФ, причём величина ЭОПФ зависит от расположения ленты в оправке при отжиге. Установлено, что в случае термообработки ленты в оправке изогнутой формы, когда её поверхностный кристаллический слой располагается во внешнюю сторону оправки, после кристаллизации наблюдается усиленный ЭОПФ при термоциклировании в интервале МП. Интегральная величина такого ЭОПФ больше, чем в образцах лент в исходном состоянии. Таким образом, ИТО аморфно-кристаллических лент в оправках, фиксирующих ленту в определённом положении, показало, что этим методом возможно формирование в лентах структур с направленными внутренними напряжениями, которые приводят к проявлению ЭОПФ при термоциклировании в интервале МП. Выявлено, что наиболее заметный ЭОПФ наблюдается в образцах аморфно-кристаллических лент с толщиной кристаллического слоя более 5 мкм.

Работа выполнена за счет гранта РНФ (проект №19-12-00327).

Механизмы рассеяния, определяющие электросопротивление гранулированного керамического манганита $La_{0.8}Ag_{0.1}MnO_3$

С.А.Гудин [1*], А.Г.Гамзатов [2], Т.Р.Арсланов [2]
[1] *Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
[2] *Институт физики* ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
[*] *e-mail: gudin@imp.uran.ru*

Гранулированные керамические манганиты лантана, допированные серебром, обладают эффектом колоссального магнитосопротивления. Выявление механизмов рассеяния [1] – [5], приводящих к столь ярким свойствам сильнокоррелированных электронных систем, является актуальной задачей для понимания физики протекающих в них процессов.

В работе исследовано влияние высокого давления на магнитотранспорт вблизи температуры Кюри керамического гранулированного образца $La_{0.8}Ag_{0.1}MnO_3$. Поведение удельного сопротивления в условиях высокого давления аналогично поведению удельного сопротивления в магнитном поле. С ростом давления температура перехода от металлического типа проводимости к полупроводниковому монотонно возрастает с барическим коэффициентом dT_C/dP=4.54 K/ГПа в интервале давлений 0-4.84 ГПа.

На барической зависимости сопротивления обнаружены аномалии в виде излома хода сопротивления при P=3.85 ГПа, который связан с конкуренцией собственного барического внутризернового сопротивления и барического сопротивления связанного с изменением размера и формы приграничных областей.

Обнаруженный переход с одного линейного изменения температурного хода удельного сопротивления на другой (построенного в логарифмическом масштабе) однозначно связан с существованием в керамическом образце двух процессов рассеяния, - внутризернового и приграничного. Вблизи точки перехода оба процесса рассеяния вносят сравнимые по величине вклады в удельное сопротивление. Для давлений меньше 3,85 ГПа преобладает вклад в сопротивление от механизмов рассеяния в приграничных слоях зерен, а для высоких давлений преобладает вклад от области однородного зерна. Приведено объяснение обнаруженному нами гистерезисному поведению сопротивления в режиме нагружения и снятия нагрузки.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ «Квант» No. АААА-А18-118020190095-4 при частичной поддержке РФФИ (проект № 19-02-01000).

[1] С.А.Гудин, М.И.Куркин, и др., **ЖЭТФ** 148 (5), 1005 (2015).
[2] С.А.Гудин, Н.И.Солин, и др., **ФТТ** 60 (6), 1067 (2018).
[3] А.Г.Гамзатов, Т.А.Гаджимурадов, и др. **ЖЭТФ** 149 (1), 172 (2016).
[4] С.А.Гудин, Н.И.Солин **ЖЭТФ** 157 (4), 648 (2020).
[5] С.А.Гудин, Н.И.Солин **ФТТ** 62 (5), 669 (2020).

Магнитокалорические свойства сплавов $Gd_5(Si_xGe_{1-x})_4$

А.А. Мухучев[1], А.А. Амиров[1], А.М. Алиев[1], J.H. Belo[2]
[1] *Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*
[2] *IFIMUP, Physics Department of Science Faculty, Porto University, Porto, Portugal*
e-mail: mukhuch87@mail.ru

Неослабевающий интерес к исследованию магнитокалорического эффекта (МКЭ) связан с тем, что на его основе можно создать экологически безопасные и энергоэффективные магнитные охлаждающие системы. Есть ряд требований к материалам, которые будут использоваться в данных системах. Данные материалы должны обладать гигантскими значениями МКЭ вблизи комнатных температур. Такие свойства часто наблюдаются в материалах с магнитоструктурными фазовыми переходами, но из-за гистерезисных явлений, для индуцирования обратимых фазовых переходов требуются сильные магнитные поля, что ограничивает возможное использование таких материалов.

В данной работе приводятся результаты исследования магнитокалорических свойств сплавов $Gd_5(Si_xGe_{1-x})_4$, с различным соотношением кремния и германия. Изменение соотношения концентрации этих элементов позволяет менять температуру, а также род фазового перехода. Исследование магнитокалорического эффекта проводилось модуляционным методом в циклических магнитных полях амплитудой до 80 kOe в интервале температур от 180 - 360 K, и при частотах до 20 Hz. Из данных по намагниченности в образцах $Gd_5Si_{1.8}Ge_{2.2}$, $Gd_5Si_2Ge_2$ и $Gd_5Si_{2.8}Ge_{1.2}$ температуры фазовых переходов равны 255, 275 и 315 K соответственно. В образце $Gd_5Si_{2.8}Ge_{1.2}$, в отличие от первых двух, температурный гистерезис не проявляется.

В слабых магнитных полях (ΔH= 0.5, 1, 2, 3 kOe) на зависимости $\Delta T_{ad}(T)$ хорошо прослеживается двухфазность $Gd_5Si_{1.8}Ge_{2.2}$ и $Gd_5Si_2Ge_2$ в виде двойных пиков, и величина максимума МКЭ растет с увеличением концентрации кремния. В полях 18, 40 и 80 kOe на зависимости $\Delta T(T)$ двойные пики отсутствуют. Максимальное значение МКЭ наблюдается для $Gd_5Si_2Ge_2$ и равна ΔT_{max}=11.3 K в поле 80 kOe. В образце $Gd_5Si_{2.8}Ge_{1.2}$, в котором гистерезисные эффекты не проявляются, величина МКЭ в поле 80 kOe составляет 9.4 K.

Исследования частотной зависимости МКЭ показывают, что при частоте 20 Hz величина эффекта по сравнению с МКЭ при частоте 0.5 Hz уменьшается на 30% в сплаве $Gd_5Si_{1.8}Ge_{2.2}$, на 10% в $Gd_5Si_2Ge_2$ и на 40% в $Gd_5Si_{2.8}Ge_{1.2}$ соответственно. Полученные результаты показывают, что посредством изменения соотношения концентрации Si и Ge можно регулировать температуры максимумов МКЭ, значения МКЭ и температурный интервал эффекта.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России № АААА-А17-117021310366-5.

Структура и диэлектрические свойства керамических материалов на основе ферониобата свинца

Ю.А.Лупицкая, П.Е.Ромазев
ФГБОУ ВО Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
e-mail: lupitskaya@gmail.com

Материалы, обладающие одновременно магнитным и электрическим упорядочением (мультиферроики), являются перспективными для применения в современной микро- и СВЧ-электронике. Связь между магнитной и электрической подсистемами позволяет управлять соответствующими свойствами этих материалов при помощи внешних электрического и магнитного полей. Количество соединений, проявляющих свойства мультиферроиков при температурах, близких к комнатной [1], остается небольшим, так как в большинстве случаев электрическое упорядочение при высоких температурах несовместимо с магнитным.

Соединения на основе ферониобата свинца $Pb(Fe_{0.5}Nb_{0.5})O_3$ (PFN) относятся к широко известным и хорошо изученным мультиферроикам с температурами фазовых переходов, соответствующих электрическому и магнитному упорядочению $T_C = (356 \pm 5)$ K и $T_N = (150 \pm 10)$ K. Образование устойчивой структуры типа перовскита (ABO_3) в составе PFN с антиферромагнитными и сегнетоэлектрическими свойствами возможно благодаря равному содержанию катионов B-типа (Fe^{3+} и Nb^{5+}) в октаэдрически координированных позициях (BO_6). При комнатной температуре PFN обладает только сегнетоэлектрическими свойствами [2], однако высокие значения поляризации в этом материале представляют практический интерес при синтезе новых материалов для СВЧ-преобразователей и композиционных магнитоэлектрических материалов.

В работе представлены результаты исследований структурных, электродинамических и магнитодиэлектрических свойств керамических образцов состава $Pb(Fe_{0.5}Nb_{0.5})O_3$. На основе PFN и ферроманганита $CuMnFeO_4$ (CMF) синтезирован композит состава 0.5PFN@0.5CMF. Показано, что температурные и частотные зависимости диэлектрической проницаемости указывают на наличие низкотемпературного полярного состояния, большие значения диэлектрической проницаемости в СВЧ-диапазоне и высокую электропроводность исследуемых материалов.

[1] D.Varshney, R.N.P.Choudhary, R.S.Katiyar, Appl. Phys. Lett. **89**, 172901 (2006).
[2] D.P.Kozlenko, S.E.Kichanov, E.V.Lukin et. al., Phys. Rev. **89**, 174107 (2014).

Твердотельная индуктивность керамического мультиферроика $LuFe_2O_4$ с кислородной нестехиометрией в условиях воздействия температуры и электрического поля

Р.А. Алиев [1], А.Г. Гамзатов [1], Г.М. Гаджиев [1], Н.С. Абакарова [1], А.Р. Кауль[2], М. Маркелова [2]
[1] *Институт физики ДФИЦ РАН, 367003 Махачкала, Россия*
[2] *Московский государственный университет, 119991 Москва, Россия*
e-mail: hadzhygm@mail.ru

Высокие требования к устройствам записи и хранения данных высокой плотности, инициировали у научного сообщества интерес к поиску и исследованию функциональных материалов, в которых магнитное упорядочение может быть изменено статическим электрическим полем и наоборот. К числу таких материалов относится мультиферроидное соединение $LuFe_2O_4$. Многочисленные экспериментальные данные свидетельствуют о том, что при температуре ~ 340 К в данных соединениях возникает зарядовое упорядочение (ЗУ), а при Т ≈ 240 К – магнитное упорядочение [1-4]. Близость температур зарядового и магнитного упорядочений к комнатной, делает мультиферроик $LuFe_2O_4$ многообещающим материалом для применения в вышеуказанных приложениях.

Будут представлены температурные зависимости (100 – 380 К) диэлектрической постоянной и электропроводности керамического мультиферроика $LuFe_2O_4$ с кислородной нестехиометрией, измеренных на переменном токе (1, 10, 100 kHz, 1 MHz) и в статическом электрическом поле (0 – 8 V/1.4 mm). Обсуждается закономерность инверсии знака динамической диэлектрической проницаемости, обусловленной проявлением в образцах твердотельной индуктивности.

[1] N. Ikeda *et al.*, Nature London **436**, 1136 (2005). doi:10.1038/nature04039
[2] J. Wen, G. Xu, G. Gu, and S. M. Shapiro, Phys. Rev. B **80**, 020403R (2009). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.020403
[3] M. Angst *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101**, 227601 (2008). https://doi.org/10.1103/ PhysRevLett.101.227601.
[4] 4M. A. Subramanian, T. He, J. Chen, N. S. Rogado, T. G. Calvarese, and A. W. Sleight, Adv. Mater. **18**, 1737 (2006). doi:10.1002/adma.200600071

Влияние давления на магнитные фазовые превращения в сплаве $MnNi_{0.85}Co_{0.15}Ge_{1.05}$

И.Ф.Грибанов[1], А.В.Головчан[1], О.Е.Ковалев,
В.В.Коледов[2], А.П.Сиваченко[1], А.В.Маширов[2], В.И.Митюк[3]
[1] ГУ Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, Донецк, ДНР
[2]Институт радиотехники и электроники им. В.А.Котельникова РАН, Моховая,11, стр. 7, Москва, Россия,125009
[3]ГО "НПЦ НАН Беларуси по материаловедению" П. Бровки, 19, Минск, Беларусь 220102
e-mail:gribanig@mail.ru

Сплавы системы $MnNi_{1-x}Co_xGe_{1,05}$ относятся к «зеленым» магнитокалорическим материалам, в которых при определенных условиях реализуются магнитоструктурные переходы порядок – порядок, сопровождаемые гигантским магнитокалорическим эффектом (МКЭ) [1]. Другой особенностью указанных сплавов является существование в некотором диапазоне концентраций кобальта двух магнитных фазовых превращений последовательно реализуемых при охлаждении: изоструктурного перехода из парамагнитного (ПМ) в ферромагнитное (ФМ) состояние и далее из ферромагнитного в антиферромагнитное (АФ) состояние (см. [1] и ссылки в ней). Низкотемпературное превращение является фазовым переходом первого рода и сопровождается резким скачком намагниченности и изменением структуры от высокотемпературной гексагональной типа Ni_2In до низкотемпературной орторомбической типа TiNiSi. Именно с этим переходом связан большой обратный магнитокалорический эффект (ОМКЭ), представляющий интерес для практики ввиду постоянно расширяющейся сферы применения криогенных систем в промышленности, на транспорте, в медицине и т.д.

В настоящей работе исследована возможность понижения температуры магнитоструктурного перехода в сплавах $MnNi_{1-x}Co_xGe_{1,05}$ (в сравнении с [1]) путем расширения диапазона концентраций кобальта до x=0,15. Определено также влияние давления на магнитные фазовые превращения в рассматриваемых сплавах. Ниже представлены результаты для сплава с x=0,15, соответствующего нашему краю диапазона концентрации кобальта.

Для определения положения на P-T-диаграммах линий, соответствующих магнитным и магнитоструктурным фазовым переходам, снимались температурные зависимости намагниченности при разных давлениях. Кроме того, для идентификации возникающих магнитоупорядоченных состояний измерялись кривые намагничивания при фиксированных температурах. Эксперименты проводились с помощью маятниковых магнитных весов с подвешенным к концу маятника немагнитным контейнером высокого давления. Кристаллическая структура

наблюдаемых магнитных фаз контролировалась с помощью рентгенодифракционного анализа, проводимого при разных температурах.

На рис.1 показаны магнитные характеристики исследуемого сплава. Как видим, имеют место два магнитных перехода (ПМ-ФМ и ФМ-АФ) указанного выше типа, аналогичные установленным в [1] для 0,05<x<0,11. Кривые намагничивания четко выявляют ФМ- и АФ-фазы. Температуры этих переходов для x=0,15 хорошо ложатся на продолжение концентрационной T-x диаграммы, приведенной в [1] (см. рис.3).

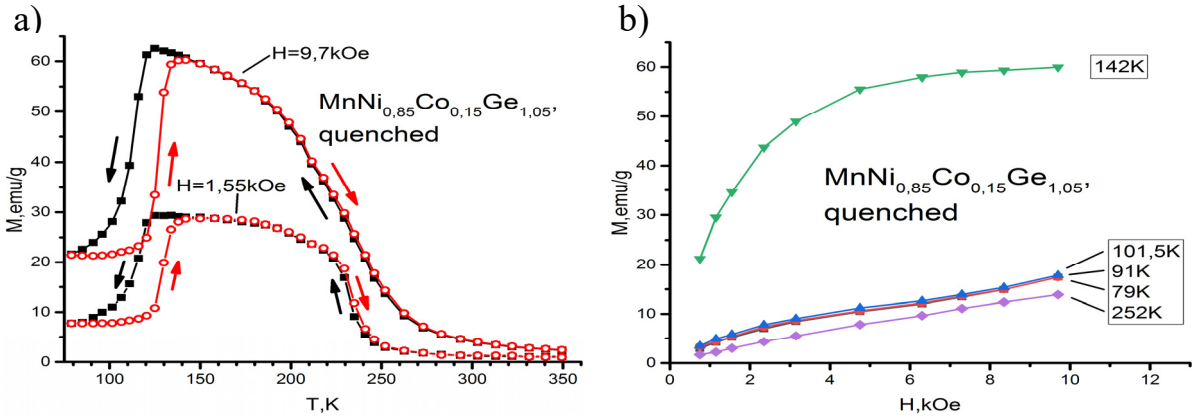


Рис.1. Магнитные характеристики сплава $MnNi_{0,85}Co_{0,15}Ge_{1,05}$, закаленного в воду от температуры гомогенизирующего отжига 800 °C.

a - температурные зависимости намагниченности в разных магнитных полях; b - кривые намагничивания при разных температурах.

Рентгеноструктурный анализ также подтверждает наличие гексагональной структуры при комнатной температуре и орторомбической структуры ниже температуры перехода в антиферромагнитное состояние, установленных для 0,05<x<0,11[1] (рис.2).

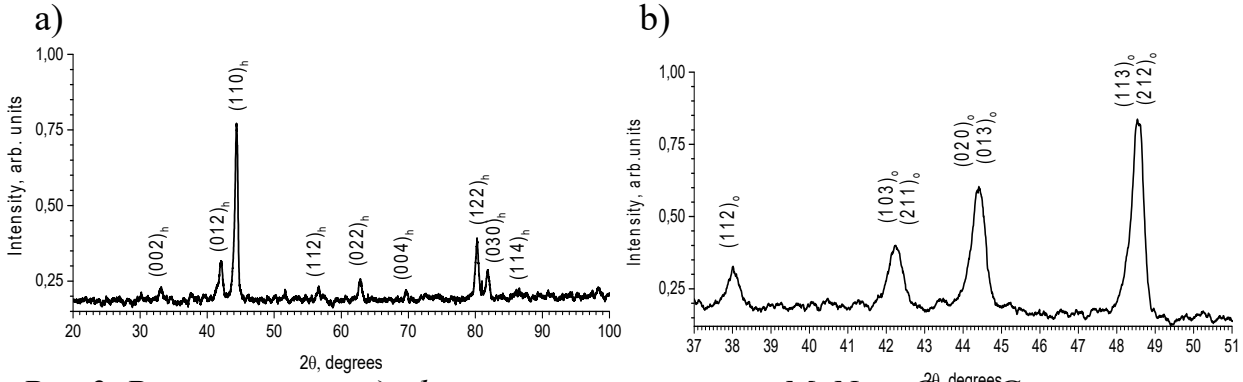


Рис.2. Рентгеновские дифрактограммы сплава $MnNi_{0,85}Co_{0,15}Ge_{1,05}$, снятые: a - при комнатной температуре, b - при T=100K. (Индекс «o» указывает на принадлежность пика к орторомбической фазе, а индекс «h» – к гексагональной).

Следует отметить, что для формирования промежуточной ФМ-фазы, низкотемпературного магнитоструктурного перехода ФМ-АФ и соответственно большого магнитокалорического эффекта критически

важным является быстрое охлаждение образца от температуры гомогенизирующего отжига при его синтезе. В медленно охлажденном образце с x=0,15 наблюдается единственный переход из парамагнитного в «мягкомодовое» метамагнитное состояние вблизи комнатной температуры.

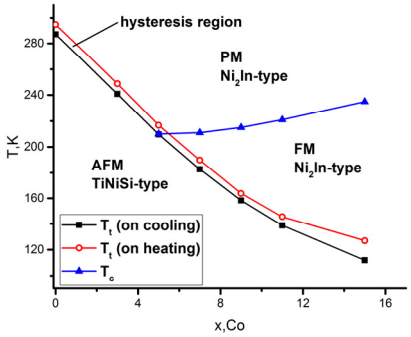


Рис.3. Магнитная фазовая диаграмма сплавов системы $MnNi_{0,85}Co_{0,15}Ge_{1,05}$ в координатах температура - концентрация легирующего элемента. Данные для $0< x \leq 11$ взяты из [1].

Оценка МКЭ-эффекта в сплаве $MnNi_{0,85}Co_{0,15}Ge_{1,0}$ представлена на рис.4b. Температурный ход скачка энтропии при намагничивании образца в окрестности фазового перехода ФМ↔АФ определялся стандартным образом с использованием соотношения Максвелла, причем серия изотермических кривых намагничивания получалась при соответствующей обработке серии температурных зависимостей намагниченности, снятых в разных магнитных полях (рис.4a).

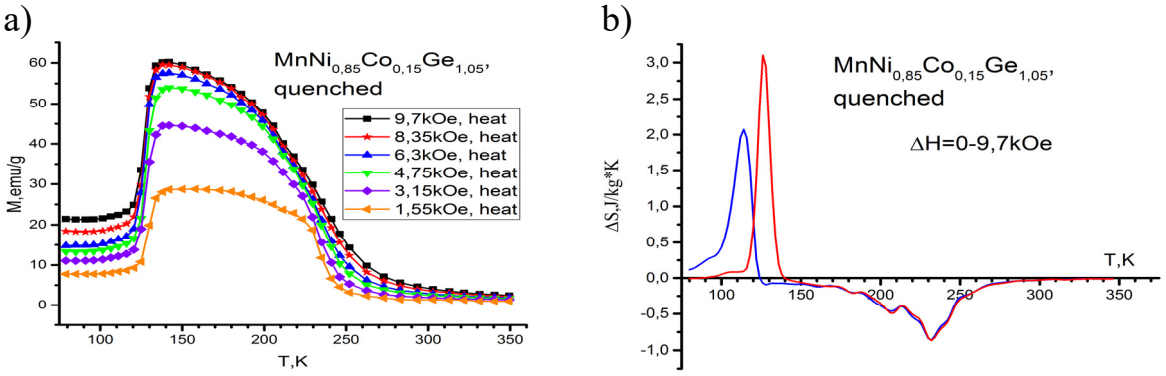


Рис.4. a - серия кривых M(T), снятых при нагреве образца. Аналогичная серия получена и при охлаждении образца, b – прямой и обратный МКЭ в сплаве $MnNi_{1-x}Co_xGe_{1,05}$.

Как видно из рис.4, тенденция к уменьшению ОМКЭ с ростом концентрации кобальта сохраняется. Это может быть связано со сжатием кристаллической решетки при замещении атомов Ni атомами Co [1], сопровождающемся ухудшением функциональных характеристик перехода ФМ-АФ. Такая версия подтверждается исследованием влияния внешнего давления на магнитное поведение сплава $MnNi_{1-x}Co_xGe_{1,05}$, результаты которого представлены на рис.5 и 6.

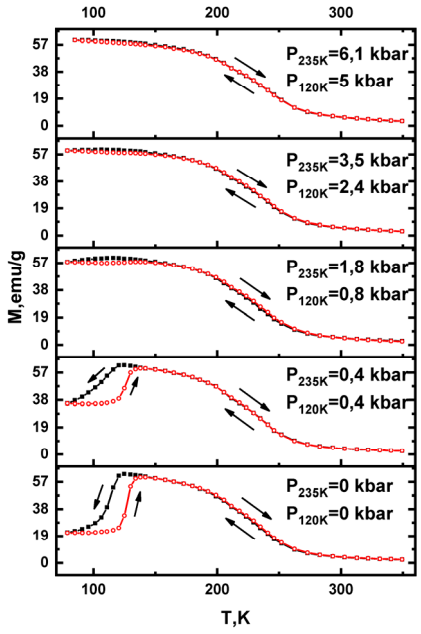


Рис.5. Температурные зависимости намагниченности закаленного сплава $MnNi_{0,85}Co_{0,15}Ge_{1,05}$, в магнит-ном поле 9,7 кЭ при разных давлениях.

Давления, указанные на графиках (рис.5), соответствуют температурам переходов ПМ-ФМ и ФМ-АФ. Они различаются из-за разницы температурных коэффициентов расширения материала корпуса контейнера высокого давления и среды, передающей давление.

Как видно из рис.5, давление ~0,8 кбар полностью подавляет АФ-фазу и стабилизирует ФМ-состояние, которое остается устойчивым и ниже 77 К. Результирующая фазовая P-T-диаграмма показана на рис.6. Аналогичного магнитного поведения можно ожидать и при дальнейшем увеличении концентрации кобальта в сплавах системы $MnNi_{1-x}Co_xGe_{1,05}$. Таким образом видно, что область реализации обратного магнитокалорического эффекта сильно ограничена в фазовом P-T-x-пространстве. Это делает проблематичным оптимизацию функциональных характеристик исследуемых сплавов для низкотемпературных приложений. Такая оптимизация требует дополнительного изучения по крайней мере двух отмеченных выше критических явлений в магнитном поведении сплавов $MnNi_{1-x}Co_xGe_{1,05}$, связанных с необходимостью сохранения при комнатной температуре высокотемпературного распределения атомов в кристаллической решетке и со слабой устойчивостью АФ-фазы по отношению к сжатию решетки.

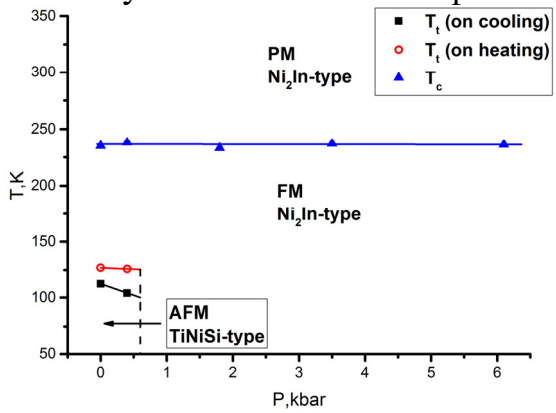


Рис.6. Фазовая P-T – диаграмма закаленного сплава $MnNi_{0,85}Co_{0,15}Ge_{1,05}$. При P>0,6 кбар кристаллическая структура сплава остается, скорее всего, гексагональной во всем исследованном температурном диапазоне, включая T<77 К.

Исследование выполнено при финансовой поддержке БРФФИ и РФФИ в рамках научного проекта №Т20Р-204 и № 20-58-00059, соответственно.

[1] Zhang C., Wang D et al. J.Phys.D:Appl.Phys. – V.43. – 2010. – P.205003.

Фазовая эволюция и магнитные свойства системы мультиферроиков $Bi_{1-x}Sc_xFe_{1-x}Mn_xO_3$ ($0.1 \le x \le 0.35$)

В.И.Михайлов[1], В.Т.Довгий[2], Т.Н.Тарасенко[1], З.Ф.Кравченко[1], А.В.Головчан[1], О.Е.Ковалев[1], А.В.Боднарук[3], Н.В.Давыдейко[1], В.И.Вальков[1]

[1] *Государственное учреждение «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», Донецк, ДНР*
e-mail: mikhaylovv55@gmail.com
[2] *Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАНУ, Киев, Украина*
[3] *Институт физики НАНУ, Киев, Украина*

Мультиферроики – это материалы, в которых сосуществуют хотя бы два взаимодействия, например, магнитное и электрическое. Эти материалы востребованы в таких областях микроэлектроники как спинтроника, устройства записи, хранения и считывания информации, сенсорика.

Наиболее известным мультиферроиком является феррит висмута $BiFeO_3$. В последние годы появилось много работ по системам твердых растворов на основе $BiFeO_3$ [1]. Система $(1-x)BiFeO_3–xScMnO_3$ весьма интересна в плане того, что ее предельные соединения являются мультиферроиками с характерными для них проявлениями магнитоэлектрической связи. Известно, что феррит висмута $BiFeO_3$ имеет ромбоэдрически искаженную структуру перовскита (пр. гр. *R3c*) и антиферромагнитную структуру G-типа, которая деформируется взаимодействием Дзялошинского-Мория, действующим в плоскости (111), с образованием пространственно-модулированной спиральной спиновой структуры (ПМС) с периодом ≈ 62 nm. Так как это взаимодействие сильно зависит от углов поворотов кислородных октаэдров, магнитные свойства BFO тесно связаны с локальной структурой октаэдра FeO_6 [1].

Магнитная структура гексагонального перовскита $ScMnO_3$ (пр.гр. $P6_3cm$) была определена нейтронографически в [2], где показано, что $ScMnO_3$ является магнитоупорядоченным ниже $T_N \approx 129$ К. Это соединение претерпевает второй магнитный переход при температуре около 50 К, соответствующий спиновой переориентации вследствие изменения магнитной анизотропии с температурой. Наличие слабого ферромагнетизма типа Дзялошинского-Мория наблюдается во всей упорядоченной области и его происхождение связано с антисимметричной частью анизотропного сверхобменного взаимодействия.

В работе [3] показано, что в синтезированных нанокерамических образцах $(1-x)BiFeO_3–xYMnO_3$ в диапазоне замещений $0.1 \le x \le 0.2$ сосуществуют фазы *R3c* и *Pbnm*. Ион Y^{3+} с меньшим ионным радиусом, чем у иона Bi^{3+}, сильно дестабилизирует *R3c* фазу, что снижает фактор толерантности и увеличивает угол наклона октаэдров. Когда искажения

достигают верхнего предела ромбоэдрической структуры, и она становится неустойчивой, понижение симметрии вызывает переход к орторомбической *Pbnm* фазе. Ионный радиус Sc^{3+} ещё меньше, чем у Y^{3+}, поэтому в (1-*x*)$BiFeO_3$–*x*$ScMO_3$ искажения кристаллической структуры должны быть еще больше.

Возникновение остаточной намагниченности с добавлением $RMnO_3$ было обнаружено при комнатной температуре и объяснено на основе частичного разрушения ПМС $BiFeO_3$ [4]. Рост намагниченности при совместном замещении в А- и В-узлах обусловлен искажениями симметрии кристаллического поля на ионах Fe^{3+}, а значит, с изменением константы магнитной кристаллографической анизотропии, вследствие чего существование ПМС становится энергетически невыгодным. Подавление ПМС приводит к росту намагниченности, магнитоэлектрического эффекта и увеличению диэлектрической проницаемости ε [4].

<u>Цель работы</u> – изучение влияния одновременного замещения ионов Bi^{3+} ионами Sc^{3+} и ионов Fe^{3+} ионами Mn^{3+} на магнитные свойства мультиферроиков системы $Bi_{1-x}Sc_xFe_{1-x}Mn_xO_3$.

Образцы керамик составов $Bi_{1-x}Sc_xFe_{1-x}Mn_xO_3$ ($0.1 \le x \le 0.35$) были получены по нитратной технологии. Исходными веществами для получения данных составов служили нитраты висмута, железа, марганца и скандия. Полученный продукт для разложения нитратов нагревали при температуре 200 – 500°C. После перетирки из полученного продукта были спрессованы по 4 таблетки Ø 8 mm и толщиной d =1.5 mm для каждого значения x. Таблетки подвергали отжигу при T =850 °C за время 10 min. на воздухе.

Кристаллическую структуру и фазовый состав полученных образцов определяли рентгенографическим методом на дифрактометре DRON-1,5 в Cu *K*α- излучении. Полученные дифрактограммы (рис.1) свидетествуют о наличии двух кристаллографических фаз в составах, содержащих Sc.

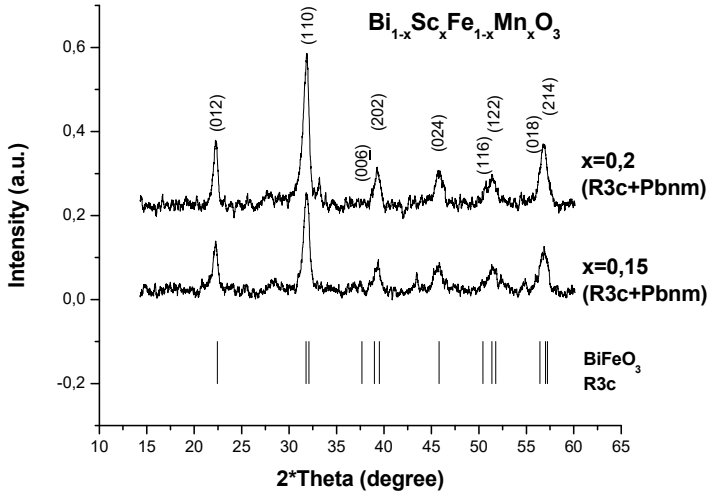


Рис.1 Рентгенограммы образцов $Bi_{1-x}Sc_xFe_{1-x}Mn_xO_3$ (x=0.15 и x=0.2).

Помимо ромбоэдрической фазы *R3c,* наблюдается наличие орторомбической фазы *Pbnm.* При x=0.1 структура образца незначительно отличается от *R3c*. В образце $Bi_{0.85}Sc_{0.15}Fe_{1-x}Mn_{0.15}O_3$ наряду с рефлексами структуры *R3c* появляются рефлексы структуры *Pbnm*. Два пика высокой интенсивности (т.е. (104) и (110)) при 32° в $BiFeO_3$ постепенно сливаются в один интенсивный пик, к тому же сверхрешеточный пик (006) при 39° исчезает с ростом степени замещения. А в образце $Bi_{0.8}Sc_{0.2}Fe_{0.8}Mn_{0.2}O_3$ структура *Pbnm* уже преобладает.

Аналогичная ситуация наблюдалась и в соединении $(1-x)BiFeO_3$-$xYMnO_3$ [3], где обнаружено, что состав x=0.15 содержит 61.77% фазы *R3c* и 38.23% фазы *Pbnm*, а состав x=0.2 - 52.42% и 47.58%, соответственно. Таким образом, с ростом x происходит перераспределение объёмов V сосуществующих фаз: V(*R3c*) – уменьшается, а V(*Pbnm*) – увеличивается.

Запись петель перемагничивания производилась при комнатной температуре с помощью вибрационного магнитометра LDJ-9500 в магнитных полях до 2.5 kOe. Результаты измерений полевых зависимостей намагниченности M(H) при T=300K для керамических образцов системы $Bi_{1-x}Sc_xFe_{1-x}Mn_xO_3$ ($0.1 \le x \le 0.35$) представлены на рис. 2. Характер петель перемагничивания свидетельствует о том, что эти твердые растворы при комнатной температуре проявляют ферромагнитные свойства в отличие от «чистого» $BiFeO_3$.

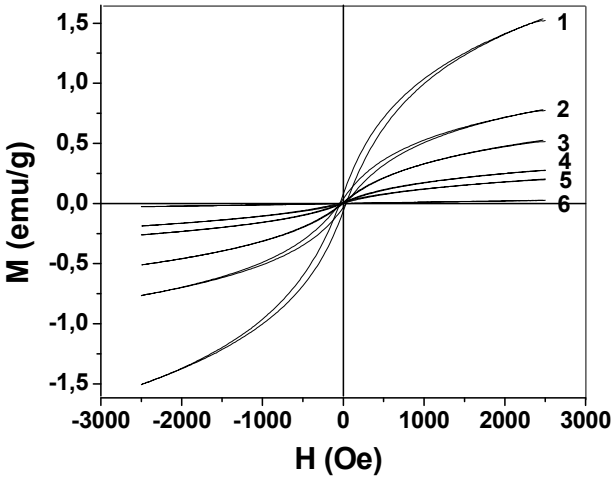


Рис.2 Петли магнитного гистерезиса при T=300K для образцов системы $Bi_{1-x}Sc_xFe_{1-x}Mn_xO_3$: 1) x=0.15; 2) x=0.2; 3) x=0.25; 4) x=0.3 ; 5) x=0.35; 6) x=0.1.

Несимметричность петель магнитного гистерезиса относительно H=0 свидетельствует о том, что, кроме ферромагнитной фазы, в системах $Bi_{1-x}Sc_xFe_{1-x}Mn_xO_3$ ($0.1 \le x \le 0.35$) присутствует и антиферромагнитное упорядочение. При дальнейшем совместном замещении ($x>0.15$) величина намагниченности уменьшается, и это связано с доминирующим вкладом коллинеарного антиферромагнитного упорядочения в орторомбическую симметрию кристалла (пр. гр. *Pbnm*).

Концентрационные зависимости намагниченности M(x) (рис. 3), полученные из кривых намагничивания при комнатной температуре во внешнем магнитном поле H = 2.5 kOe, имеют немонотонный характер: максимального значения M(*x*) достигает при критическом значении x_c = 0.15, т.е. для состава $Bi_{0.85}Sc_{0.15}Fe_{0.85}Mn_{0.15}O_3$.

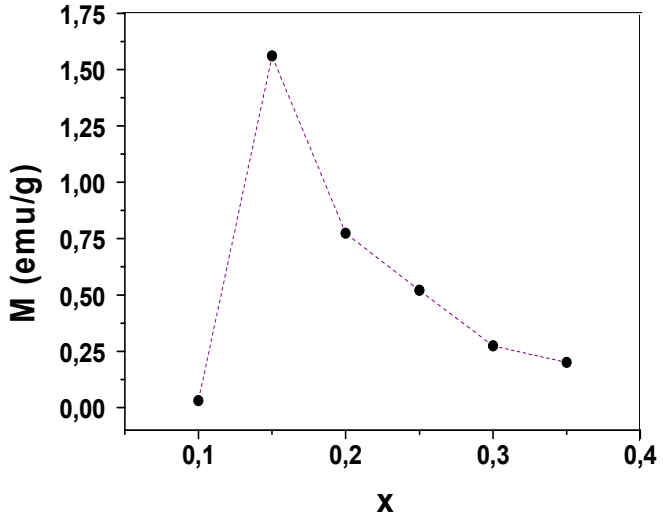


Рис.3. Концентрационные зависимости намагниченности M(x) образцов системы твердых растворов $Bi_{1-x}Sc_xFe_{1-x}Mn_xO_3$ (при H=2.5 kOe).

В заключение следует отметить следующее. В синтезированных керамических образцах $Bi_{1-x}Sc_xFe_{1-x}Mn_xO_3$ наблюдается сосуществование двух кристаллографических фаз *R3c* и *Pbnm* при $0.15 \le x \le 0.25$. С ростом степени замещения происходит перераспределение объемов этих фаз. В образце $Bi_{0.85}Sc_{0.15}Fe_{0.85}Mn_{0.15}O_3$ наряду с рефлексами структуры *R3c* появляются рефлексы структуры *Pbnm*. А в образце $Bi_{0.8}Sc_{0.2}Fe_{0.8}Mn_{0.2}O_3$ структура *Pbnm* уже преобладает.

Анализ кривых M(H) в полях до 2,5 kOe позволяет сделать вывод, что в системе мультиферроиков $Bi_{1-x}Sc_xFe_{1-x}Mn_xO_3$ в диапазоне концентраций $0.1 \le x \le 0.35$ при комнатной температуре наблюдается ферромагнитное упорядочение. Несимметричность петель магнитного гистерезиса относительно H=0 свидетельствует о том, что, кроме ферромагнитной фазы, в них присутствует и антиферромагнитная фаза.

Следовательно, замещение в $BiFeO_3$ ионов Bi^{3+} на Sc^{3+}, а также ионов Fe^{3+} на Mn^{3+} до определенного значения x_c играет важную роль в улучшении магнитных и магнитоэлектрических свойств материалов на основе $BiFeO_3$, что может представлять несомненный практический интерес для использования этих систем твердых растворов в различных многофункциональных устройствах.

[1] А.П. Пятаков, А.К. Звездин, Успехи Физ. Наук, **182** (6), 593 (2012).
[2] A. Muñoz, J. A. Alonso, et al., Phys. Rev. B **62**, 9498 (2000).
[3] S.N. Tripathy, K.K. Mishra, S. Sen et al., J. Appl. Phys. 114, 144104 (2013).
[4] R. Pandey, L.K. Pradhan et al., Ceramics Internation. 44 (15), 18609 (2018).

Процессы теплопереноса в мультиферроиках $Bi_{1-x}Ho_xFeO_3$(x = 0 - 0.20)

С.Н.Каллаев [1], А.Г.Бакмаев [1], А.Р.Билалов [1], Л.А.Резниченко [2]
[1] *Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*
e-mail: kallaev-s@rambler.ru
[2] *Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, Ростов на Дону,Россия*

Проведены исследования термодиффузии и теплопроводности мультиферроиков$Bi_{1-x}Ho_xFeO_3$в области высоких температур 300-1200К. Рассмотрены доминирующие механизмы теплопереноса фононов в области сегнетоэлектрического и антиферромагнитного фазовых переходов.

Объектами исследования являлись керамические образцы твердых растворов Bi1-xHoxFeO3 (где x=0, 0.05-0.20).Образцы были получены по обычной керамической технологии путем твердофазного синтеза с последующим спеканием без приложения давления в воздушной атмосфере.

Рентгеноструктурный анализ проводился на установке ДРОН-3 на FeKα и CuKα излучении. Определялся фазовый состав, параметры ячейки, степень совершенства кристаллической структуры. Рентгенофазовые исследования показали, что все образцы содержали примесные фазы Bi25FeO40 (a=10.181 Å, симметрия кубическая) и Bi2Fe4O9 (a = 7.965 Å, b = 8.44 Å, c = 5.994 Å, симметрия ромбическая), сопутствующие образованию BiFeO3, и фазы со структурой типа граната Ho3Fe5O12 (симметрия кубическая) для x>0.05, концентрация которых варьировалась в зависимости от концентрации Ho [1]. Исследованием установлено, что полученные твердые растворы обладали достаточно высокими значениями экспериментальной и относительной (89-94) % плотностей и соответствовали предельно достижимым по обычной керамической технологии (90-95) %.

Исследования термодиффузии и теплопроводности проводилось методом лазерной вспышки на установке LFA-457 MicroFlash, фирмы NETZSCH (Германия). Относительная погрешность измерения не более 6 %. Теплопроводность рассчитывалась по формуле $\lambda = \eta C_p \rho$ (где η – температуропроводность, ρ-плотность образца, C_p-теплоёмкость), для C_p ($C_p \approx C_v$) Измерение теплоемкости проводилось на дифференциальном сканирующем калориметре DSC 204F1 Phoenix® фирмы NETZSCH. На рис.1-3 приведены температурные зависимости термодиффузии η и теплопроводности λ образцов $Bi_{1-x}Ho_xFeO3$ в интервале температур 300-1200К. На зависимостях $\eta(T)$ и $\lambda(T)$ наблюдаются заметные аномалии в области температур сегнетоэлектрического Tc~1093К и антиферромагнитного T_N~643К фазовых переходов.

Для анализа температурных зависимостей теплопроводности и термодиффузии рассчитаем длину свободного пробега фонона, используя известное соотношение $\eta = (1/3)\upsilon_s l_{ph}$ и выражение Дебая для теплопроводности фононов $\lambda_{ph}=(1/3)C_\upsilon \upsilon_s l_{ph}$ (где λ_{ph} – теплопроводность, C_υ – теплоемкость единицы объема). Величины η, λ_{ph} и C_p ($C_p \approx C_\upsilon$) определяются из эксперимента (см. рис. 1,3), данные скорости звука взяты из работы [2]. Независимые оценки l_{ph} из измерений теплопроводности и термодиффузии приводят к одной и той же величинеl_{ph}~4,2 ангстрем (при $T>T_N$) и ее температурной зависимости, которая представлена на вставке рис.1. Таким образом, можно пренебречь рассеянием фононов на границах кристаллитов, размеры которых порядка нескольких микрон, т.к. $l_{ph}<<d$, где d – средний размер гранул. Отсюда можно предположить, что структурные искажения (т.е. центры рассеяния), ограничивающие длину свободного пробега фононов в мультиферроиках на основе BiFeO3, имеют величину порядка постоянной решетки. В качестве таких центров рассеяния могут выступать локальные искажения решетки, в частности Ян-Теллеровские по своей природе, искажения кислородных октаэдров FeO6, которые существенно изменяются при фазовых переходах, а также под действием внешних воздействий [3]. Такие искажения могут сыграть существенную роль в ограничении фононного теплопереноса в этих материалах.

Как видно из рис. 1, в области температур $T_N<T<Tc$ при нагревании чистого BiFeO3 наблюдается небольшое уменьшение термодиффузии, которое может быть обусловлено увеличением центров рассеяния фононов за счет искажений решетки с ростом температуры. Согласно данных по дифракции нейтронов [4] этими центрами могут быть искажения параметров решетки и изменения объема элементарной ячейки, вызванные вращением кислородных октаэдров (угол связи между соседними октаэдрами FeO6 увеличивается) и полярными сдвигами ионов Bi3+ и Fe3+ от своих исходных позиций по мере приближения к Tc.

В области сегнетоэлектрического фазового перехода (Tc~1093K) для BiFeO3 наблюдается минимум термодиффузии (Рис.2), который является следствием, как изменения скорости звука, так и длины свободного пробега фонона, т.к. $\eta \sim \upsilon s l ph$. Известно, что в области сегнетоэлектрического перехода имеет место минимум скорости распространения звука и пик поглощения звука, которое возникает из-за взаимодействия деформации (связанной со звуковой волной) со спонтанной поляризацией (релаксационное поглощение) и взаимодействия звуковой волны с термическими флуктуациями [5]. На рис. 1 видно, что минимум на зависимости $\eta(T)$ для составов $Bi_{1-x}Ho_xFeO3$ в области сегнетоэлектрического фазового перехода размывается. Это может быть связано с тем, что при замещении висмута гадолинием происходит статические искажения решетки, которые вызывают появление локальных

деформаций и соответствующей поляризации, связанной с пьезоэлектрическим эффектом. В силу дальнодействующего характера упругих и кулоновских сил наличие деформированных поляризованных областей проявляют себя как внутреннее смещающее электрическое поле, которое размывает переход. Отсюда следует, что легирование гадолинием подавляет искажения решетки в области Tc, связанные со смещениями кислородных октаэдров и ионов Bi и Fe, что приводит к уменьшению рассеяния фононов.

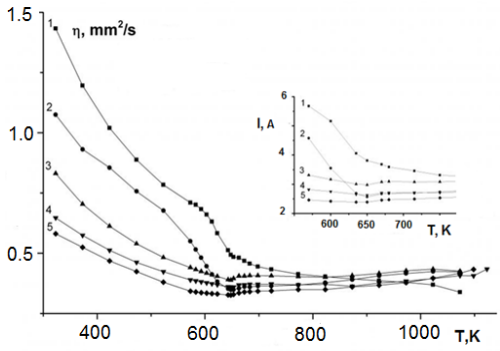


Рис. 1. Температурная зависимость термодиффузии BiFeO3 (1)и $Bi_{1-x}Ho_xFeO3$ при x-0.05(2), x-0.10 (3), x-0.20 (4) и x-0.30 (5). На вставке: температурная зависимость средней длины свободного пробега фононов в области антиферромагнитного перехода.

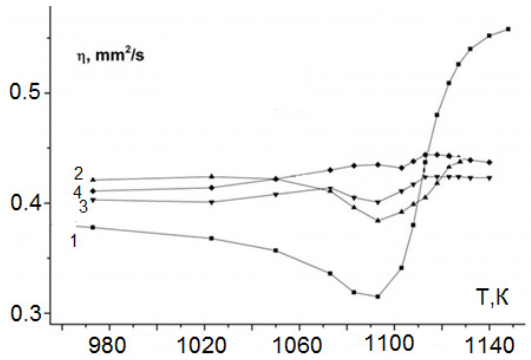


Рис. 2. Температурная зависимость термодиффузии BiFeO3 (1)и $Bi_{1-x}Ho_xFeO3$ при x-0.10 (2), x-0.20 (3) и x-0.30 (4) в области сегнетоэлектрического перехода.

При T>Tc в неполярной Pbnm фазе октаэдры FeO6 становятся регулярными, полярные сдвиги исчезают [6] и происходит резкое сжатие решетки. Все это приводит к существенному уменьшению искажений решетки, т.е. центров рассеяния и соответственно, резкому росту длины свободного пробега фононов и заметному увеличению термодиффузии в области $T \geq Tc$ (см. рис.1).

Из рис. 1 и 3 видно, что при $T \leq T_N$ с понижением температуры термодиффузия и теплопроводность образцов растет, что обычно присуще диэлектрическим магнитным материалам и обусловлено резким возрастанием средней длины свободного пробега фононов (см. вставку на рис.1), поскольку переход в магнитоупорядоченную фазу обычно сопровождается снятием искажений Яна-Теллера (ниже T_N электрон-решеточное взаимодействие подавляется упорядоченной системой спинов) [7]и сжатием решетки. В области антиферромагнитного перехода T_N состава $Bi_{1-x}Ho_xFeO3$ на зависимостях η(T) и λ(T) наблюдаются минимумы. Появление минимума в феррите висмута легированного гадолинием в области перехода T_N может быть обусловлено уменьшением l_{ph} вследствие усиления рассеяния фононов на флуктуациях магнитного параметра порядка (из-за наличия спинов у редкоземельных элементов).

Уменьшение величины теплопроводности Bi1-xHoxFeO3 ниже T_N (рис.3) связано с тем, что появляются дополнительные локальные искажения кристаллической решетки (т.е. центры рассеяние фононов) за счет замещения ионов висмута на ионы меньшего радиуса гадолиния.

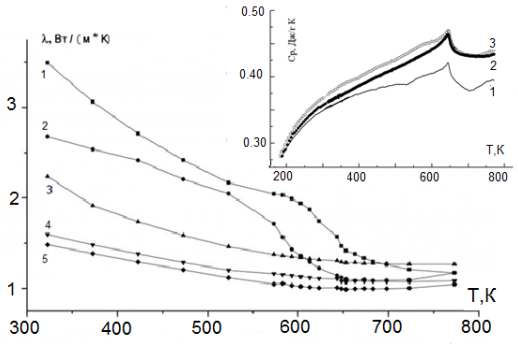


Рис. 3. Температурная зависимость теплопроводности BiFeO3 (1)и Bi1-xHo$_x$FeO3 при x-0.05(2), x-0.10 (3), x-0.20 (4) и x-0.30 (5).На вставке: температурная зависимость теплоемкости.

Результаты проведенных исследований и их анализ свидетельствует о том, что в качестве основного механизма рассеяния фононов выступают локальные искажения кристаллической решетки, вызванные искажениями кислородных октаэдров FeO6 и полярными сдвигами ионов Bi3+ и Fe3+ от своих исходных позиций. Установлено, что легирование редкоземельным элементом гадолинием приводит к существенному изменению температурных аномалий термодиффузии и теплопроводности вблизи фазового перехода: появлению минимума в области антиферромагнитного перехода T_N и размытию сегнетоэлектрического фазового перехода Tc.

[1] А.А. Павелко, С.В. Хасбулатов, Л.А. Шилкина, Л.А. Резниченко, Г.Г. Гаджиев, А.Г. Бакмаев, В.А. Алешин, Сборник трудов третьего международного междисциплинарного молодежного симпозиума «LFPM-2014» (г. Ростов-на-Дону – г. Туапсе), Том 1, Стр. 349-358.
[2] Smirnova E.P., Sotnicov A., Ktitorov S., Zaitseva N., Schmidt H., Weihnacht M. Acoustic properties of multiferroic BiFeO3 over the temperature range 4.2–830 K // Eur. Phys. J. 2011. B. 83. P. 39.
[3] Radaelli P.G., Marezio M., Hwang H.Y., Cheong S.W. Charge localization by static and dynamic distortions of the MnO6octahedra in perovskitemanganites // Phys. Rev. 1996. B. 54. P. 8992
[4] Arnold D.C., Knight K.S., Morrison F.D. et al. Ferroelectric-Paraelectric Transition in BiFeO3: Crystal Structure of the Orthorhombic βPhase // Phys. Rev. Lett. 2009. V. 102. 027602.
[5] Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. – М.: Мир, 1975. 398 с.
[6] Selbach S.M., Tybell Th., Einarsrud M.-A., Grande T. Phase transitions, electrical conductivity and chemical stability of BiFeO3 at high temperatures. // J. Sol. St. Chem. 2010. V. 183. P. 1205.
[7] Fujishiro H., Sugavara S., Ikebe M. Anomalous phonon transport enhancement at first-order ferromagnetic transition in (Gd,Sm,Nd)0.55Sr0.45MnO3 // Physica B. 2002. V. 316-317. P.331.

Влияние мультиплетных уровней Sm^{3+} и Eu^{3+} на теплоемкость мультиферроика $BiFeO_3$

Р.Г.Митаров [2], С.Н.Каллаев [1], З.М.Омаров [1], А.Р.Билалов [1], Л.А.Резниченко [3]

[1] *Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук, 367003 Махачкала, Россия*

[2] *Дагестанский государственный технический университет, Махачкала, Россия*

[3] *Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, Ростов на Дону, Россия*

e-mail: kallaev-s@mail.ru

В данной работе проведены исследования теплоемкости феррита висмута, легированного парамагнитными редкоземельными ионами самария и европия для выяснения влияния мультиплетных уровней РЗ ионов на теплоемкость $BiFeO_3$, а также для изучения связи между резонансным рассеянием фононов на мультиплетных уровнях РЗ ионов и эффектом Шоттки в теплоемкости.

Измерение теплоемкости проводилось на дифференциальном сканирующем калориметре DSC 204 *F1 Phoenix*® фирмы NETZSCH. Образец для измерения теплоемкости C_p представлял собой пластину диаметром 4 и толщиной 1 мм, а для измерения термодиффузии - 12,5 мм и толщиной 1 мм. Погрешность измерения теплоемкости менее трех процентов.

Экспериментальные данные теплоемкости C_p мультиферроиков $BiFeO_3$ и $Bi_{0,90}Sm_{0,10}FeO_3$, $Bi_{0,90}Eu_{0,10}FeO_3$ в интервале температур 150-630К представлены на рис.1. Легирование феррита висмута парамагнитными РЗ ионами самария и европия приводит к увеличению теплоемкости $BiFeO_3$ и это свидетельствует о наличии дополнительной компоненты теплоемкости.

Главной особенностью парамагнитных РЗ ионов является наличие в них внутренних 4f - оболочек, которые заполнены частично и лежат глубоко в атоме, поэтому кристаллическое поле решетки расщепляет их уровни на небольшую величину (≈100К и меньше) [1]. Т.е. энергия расщепленных уровней соответствует энергиям фононов, спектр которых заключен в интервале 100-300К. При более высоких температурах имеет место переходы между мультиплетными уровнями РЗ ионов. Колебания кристаллической решетки могут переводит ионы с одного уровня на другой и это приводит к увеличению теплоемкости, благодаря термическому возбуждению 4f -электронов РЗЭ (эффект Шоттки) и к уменьшению теплопроводности кристаллической решетки за счет резонансного рассеяния фононов на парамагнитных ионах РЗЭ ионов [1]. Поэтому увеличение теплоемкости феррита висмута, при легировании парамагнитными РЗ элементами (Sm, Eu) можно связать с переходами 4f - электронов РЗ ионов на более высокие уровни мультиплета. Расстояние

между мультиплетными уровнями ионов самария Sm^{3+} и европия Eu^{3+} [2-3] сравнимо с энергией фононов уже при средних температурах и переходы между этими уровнями ионов самария и европия приводит к увеличению общей теплоемкости феррита висмута, легированного парамагнитными ионами РЗЭ по сравнению с легированным лантаном [4]. Решеточные компоненты теплоемкости исследованных составов должны быть близки, т.к. они кристаллизуются в одной и той же структуре, имеют близкие параметры кристаллической решетки, плотности, температуры плавления и радиусы ионов самария Sm^{3+} и европия Eu^{3+} [4]. Поэтому наблюдаемое увеличение теплоемкости феррита висмута, при легировании парамагнитными РЗ элементами (Sm, Eu) можно связать с переходами 4f-электронов РЗ ионов на более высокие уровни мультиплета.

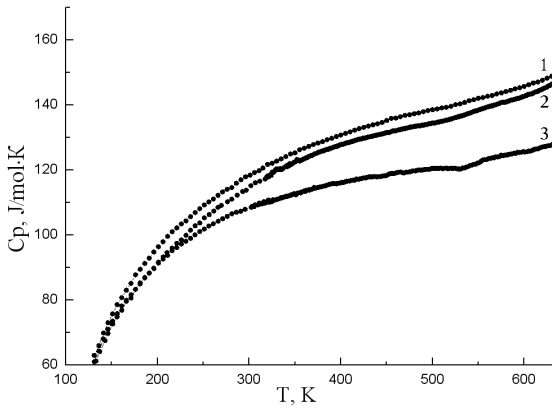


Рис.1. Температурная зависимость теплоемкости C_p мультиферроиков $Bi_{0,90}Eu_{0,10}FeO_3$ (1), $Bi_{0,90}Sm_{0,10}FeO_3$ (2) и $BiFeO_3$ (3).

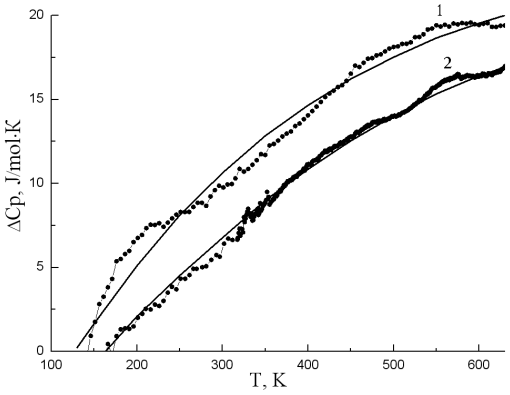


Рис.2. Температурные зависимости аномальной составляющей теплоемкости $Bi_{0,90}Eu_{0,10}FeO_3$ (1) и $Bi_{0,90}Sm_{0,10}FeO_3$ (2), сплошная линия зависимости $\Delta C_p(T) = C_ш^T$ - результат аппроксимации выражением (2).

Для оценки ангармонической компоненты теплоемкости нами использованы литературные данные коэффициента теплового расширения $Bi_{1-x}La_xFeO_3$ [5] и модуля объемной сжимаемости керамики $Pb(TiZr)O_3$, близкого по структуре $BiFeO_3$. Расчеты показывают, что ангармоническая компонента теплоемкости составляет менее двух процентов от общей теплоемкости исследованных составов и поэтому можно допустить что $C_p \approx C_v$.

Дополнительную компоненту теплоемкости ($C_ш^{эксп}$) экспериментально можно выделить непосредственно как разность теплоемкости $Bi_{0,90}Re_{0,10}FeO_3$ и $BiFeO_3$: $\Delta C_p = C_ш^{эксп} = C_p(Bi_{0,90}Re_{0,10}FeO_3) - C_p(BiFeO_3)$ (где Re–Eu и Sm). Такой способ выделения теплоемкости Шоттки является общепринятым и не вносит существенной погрешности в величину $C_ш^{эксп}$ [7]. Температурная зависимость аномальной теплоемкости $C_ш^{эксп}(T)$ приведена на рис.2. Анализ температурной зависимости теплоемкости Шоттки ($C_ш^{эксп}$) позволяет интерпретировать ее как аномалию Шоттки для трехуровневых состояний.

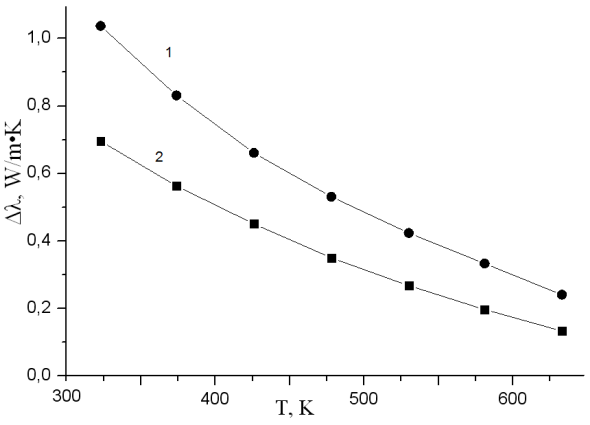


Рис.3. Температурная зависимость теплопроводности $Bi_{0,90}Eu_{0,10}FeO_3$ (1) и $Bi_{0,90}Sm_{0,10}FeO_3$ (2).

В общем случае выражение для теплоемкости Шоттки можно получить, дифференцируя среднюю энергию частиц на энергетических уровнях:

$C_ш^т = (kT^2)^{-1}(\langle \Delta E_i^2 \rangle - \langle \Delta E_i \rangle^2)$ (1) [11]. Для трехуровневой системы эта формула принимает вид [4]: $C_ш^т = R\cdot[D_1\cdot(\Delta E_1/kT)^2\cdot\exp(-\Delta E_1/kT)+D_2\cdot(\Delta E_2/kT)^2\exp(-\Delta E_2/kT)]/[1+D_1\cdot\exp(\Delta E_1/kT)+D_2\cdot\exp(-\Delta E_2/kT)]^2$, (2)

где D_1 и D_2 - отношение кратностей вырождения уровней.

Путем сравнения теплоемкости, рассчитанной по формуле (2) и экспериментально выделенной избыточной теплоемкости $C_ш^{эксп}$, получены модельные параметры $Bi_{0,90}Sm_{0,10}FeO_3$: $D_1 = 15.214$, $D_2 = 2.31$, $\Delta E_1 = 0.342$eV и $\Delta E_2 = 0.052$eV, а для состава $Bi_{0,90}Eu_{0,10}FeO_3$: $D_1 = 12.521$, $D_2 = 5.716$, $\Delta E_1 = 0.624$eV и $\Delta E_2 = 0.089$eV соответственно. Согласие экспериментально выделенной аномальной теплоемкости $C_ш^{эксп}$ с вычисленной по формулу (2) $C_ш^т$ достаточно хорошее (рис.2).

Проведен также сравнительный анализ теплопроводности и теплоемкости $BiFeO_3$ и $Bi_{0,90}Sm_{0,10}FeO_3$, $Bi_{0,90}Eu_{0,10}FeO_3$ с целью выяснения влияния 4f - электронов РЗ ионов на их теплофизические свойства.

В работе [6] приведены результаты экспериментального исследования теплопроводности феррита висмута, легированного ионами самария и европия. Было установлено, что уменьшение теплопроводности $\Delta\lambda_{рез}$ феррита висмута при легировании РЗ ионами самария и европия обусловлено рассеянием фононов на мультиплетных уровнях этих ионов. На рис.3 приведена температурная зависимость изменения теплопроводности феррита висмута при легировании - $\Delta\lambda_{рез}$ для

$Bi_{0,90}Sm_{0,10}FeO_3$, $Bi_{0,90}Eu_{0,10}FeO_3$, которая подтверждает связь между эффектом Шоттки в теплоемкости и резонансным рассеянием фононов на мультиплетных уровнях РЗ ионов. Теплоемкость феррита висмута, легированного европием, превышает теплоемкость феррита висмута, легированного самарием (рис.2) и связано это с тем, что мультиплетные уровни ионов европия Eu^{3+} расположены ближе от основного состояния, чем у ионов самария Sm^{3+} [2,3].

Таким образом, на основании экспериментального исследования теплофизических свойств феррита висмута, легированного европием и самарием можно сделать следующие выводы:

1) легирование феррита висмута РЗ элементами европием и самарием приводит к появлению дополнительной компоненты теплоемкости, которую можно интерпретировать как аномалию Шоттки, возникающая вследствие термического возбуждения 4f - электронов РЗ ионов;

2) установлена связь между уменьшением фононной теплопроводности за счет резонансного рассеяния фононов РЗ ионами и эффектом Шоттки для теплоемкости.

[1] Р.Г.Митаров, Л.С.Парфеньева, В.В.Попов, И.А.Смирнов. ФТТ**12**, 2147 (2000)
[2] В.П.Жузе. Физические свойства халькогенидов редкоземельных элементов. Наука, Л. (1973).304с.
[3] G.H.Dieke. Spectra and energy levels of rare earth ions in crystals. Intersciense Publ., N. Y., (1968). 457p.
[4] С.Н.Каллаев, Р.Г.Митаров, З.М.Омаров, Г.Г.Гаджиев, Л.А.Резниченко. ЖЭТФ**145**, *2*, 320 (2014).
[5] А.А.Амиров, А.Б.Батдалов, С.Н.Каллаев, З.М.Омаров, И.А.Вербинко. ФТТ**51**, 1123 (2009).
[6] Р.Г.Митаров, С.Н.Каллаев, А.Г.Бакмаев, Л.А.Резниченко, А.Т.Темиров. ФТТ, **7**, 1137 (2020)
[7] S.N.Kallaev, A.G.Bakmaev, S.M.Omarov, R.G.Mitarov, A.R.Bilalov, L.A.Reznichenko. J. AllousComp. **695**, 3044 (2017)

Теплоемкость и диэлектрические свойства мультиферроика $Bi_{0.8}Ho_{0.2}FeO_3$

С.Н.Каллаев [1], С.А.Садыков [2], Н.М.Алиханов [1,2], З.М.Омаров [1], Р.Г.Митаров [3], Л.А.Резниченко [4]

[1] Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук, 367003 Махачкала, Россия

[2] Дагестанский государственный университет, г. Махачкала, Россия

[3] Дагестанский государственный технический университет, Махачкала, Россия

[4] Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, Ростов на Дону, Россия

e-mail: kallaev-s@mail.ru

В данной работе приведены результаты исследований теплоемкости и диэлектрической проницаемости мультиферроиков $BiFeO_3$ и $Bi_{0.8}Ho_{0.2}FeO_3$ в широкой области температур 300 - 750К. В частности, калориметрические исследования в широком температурном интервале позволяют регистрировать аномалии теплоемкости любой природы и получить важную информацию о природе физических явлений в исследуемых материалах.

Объектами исследования являлись керамические образцы твердых растворов $BiFeO_3$ и $Bi_{0.8}Ho_{0.2}FeO_3$. Образцы были получены по обычной керамической технологии путем твердофазного синтеза с последующим спеканием без приложения давления в воздушной атмосфере. Синтез твердых растворов осуществлялся методом твердофазных реакций оксидов высокой чистоты Bi_2O_3, Fe_2O_3, Ho_2O_3. Синтез системы осуществлен в две стадии с промежуточным помолом и гранулированием порошков. Режимы синтеза: температура первого обжига T_1 = 1073К (в течение 10 ч), второго T_2 = 1073-1123К (5 ч). Придание порошкам нужных для прессования свойств достигали введением в них пластификатора и последующим гранулированием. Температуры спекания лежала в интервале 1173-1223К.

Рентгеноструктурный анализ проводился на установке ДРОН-3 на FeKα и CuKα излучении.

Измерение теплоемкости проводилось на дифференциальном сканирующем калориметре DSC 204 *F1 Phoenix*® фирмы NETZSCH. Частотные зависимости диэлектрических свойств в диапазоне 1 кГц – 1МГц проводились с использованием измерителя LCR-78110G фирмы ”Good Will Instrument Co“.

На рис.1-3 представлены результаты исследования температурных зависимостей теплоемкости и диэлектрической проницаемости $BiFeO_3$ и $Bi_{0.8}Ho_{0.2}FeO_3$ в интервале температур 150–700 К. Как видно из рисунков, на температурных зависимостях теплоемкости и диэлектрической проницаемости на обоих составах наблюдаются аномалии в области температуры антиферромагнитного фазового перехода T_N.

Легирование феррита висмута гольмием приводит к увеличению величины теплоемкости в широкой области температур выше $T \geq 300$ К. Температура Нееля, определенная из зависимости $C_p(T)$ (рис.1), для обоих составов отличается незначительно (для $x = 0$: $T_N = 645$K; для $x = 0.2$: $T_N = 643$K). Следует отметить, что для состава $x = 0.2$ на зависимости $C_p(T)$, ниже T_N, наблюдается второй максимум при $T \approx 590$K.

Согласно рентгеноструктурным исследованиям [1] в составах $Bi_{1-x}Ho_xFeO_3$ при x < 0.15 наблюдается ромбоэдрически искаженная структура перовскита с пространственной группой *R3c.* В свою очередь, дальнейшее увеличение концентрации x приводит к структурному переходу в орторомбическую фазу Pnma. Поэтому можно предположить, что аномалия теплоемкости при $T \approx 590$K для состава $x = 0.20$ может быть обусловлена структурным фазовым переходом между ромбоэдрической и орторомбической структурами.

Для расчета теплоемкости кристаллической решетки нами применена модель Дебая, а для выделения ангармонической компоненты теплоемкости использованы литературные данные коэффициента теплового расширения $Bi_{1-x}La_xFeO_3$ [2] и модуля объемной сжимаемости керамики $Pb(TiZr)O_3$, близкого по структуре $BiFeO_3$ [3]. Расчеты показывают, что ангармоническая компонента теплоемкости составляет менее двух процентов от общей теплоемкости $Bi_{0.8}Ho_{0.2}FeO_3$, и поэтому можно допустить что $C_p \approx C_v$.

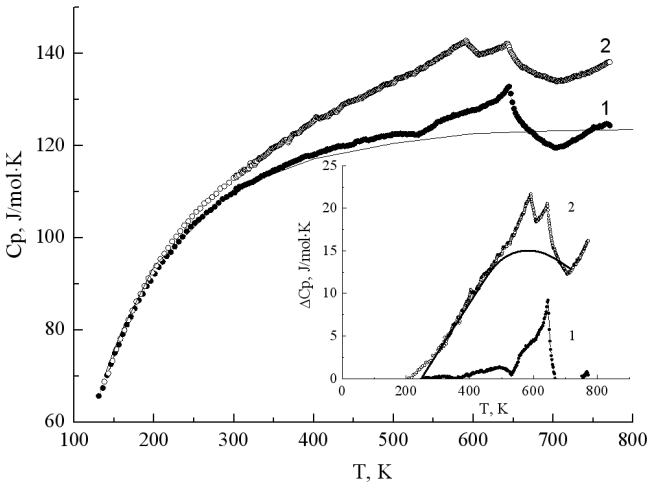


Рис. 1. Температурная зависимость теплоемкости $BiFeO_3$ (1) и $Bi_{0.8}Ho_{0.2}FeO_3$ (2), сплошная линия результат аппроксимация фононной теплоемкости функцией Дебая. На вставке: температурная зависимость аномальной составляющей теплоемкости ΔC_p $BiFeO_3$ (1) и $Bi_{0.8}Ho_{0.2}FeO_3$ (2), сплошная линия - результат аппроксимации выражением (1).

Фононная теплоемкость Bi0.8Ho0.2FeO3 рассчитанная по модели Дебая на рис.1 изображена сплошной линией. Теплоемкость феррита висмута, модифицированного гольмием, превышает фононную теплоемкость и это свидетельствует о наличии избыточной теплоемкости. Избыточная компонента теплоемкости определялась как разность между измеренной и рассчитанной по модели Дебая фононной теплоемкостью $Bi_{0.8}Ho_{0.2}FeO_3$: $\Delta C_p = C_p - C_p^0$. Температурная зависимость аномальной теплоемкости ΔC_p(T)

приведена на вставке рис.1. Температурная зависимость выделенной таким образом теплоемкости позволяет интерпретировать ее как аномалию Шоттки для трехуровневых состояний, возникающих при легировании $BiFeO_3$ гольмием. Такие энергетические состояния связаны с атомами, которые могут занимать три структурно-эквивалентные позиции разделенные барьерами ΔE_1, ΔE_2.

Появление таких состояний, разделенных энергетическими барьерами ΔE_1 и ΔE_2 от основного состояния авторы [4] связывают с изменением параметров кристаллической решетки при легировании вследствие полярных смещений ионов железа и висмута, а также с изменением угла связи между кислородными октаэдрами FeO_6.

В общем случае выражение для теплоемкости Шоттки можно получить, дифференцируя среднюю энергию частиц на энергетических уровнях: $\Delta C_p = (kT^2)^{-1}(\langle \Delta E_i^2 \rangle - \langle \Delta E_i \rangle^2)$ (1) [5-6]. Для трехуровневой системы эта формула принимает вид [13]:

$$\Delta Cp = \frac{R\left[D_1(\Delta E_1/kT)^2 \exp(-\Delta E_1/kT) + D_2(\Delta E_2 kT)^2 \exp(-\Delta E_2/kT)\right]}{\left[1 + D_1 \exp(-\Delta E_1/kT) + D_2 \exp(-\Delta E_2/kT)\right]^2} \quad (1)$$

где D_1 и D_2 - отношение кратностей вырождения уровней.

Путем сравнения теплоемкости, рассчитанной по формуле (1) и экспериментально выделенной избыточной теплоемкости ΔC_p, получены модельные параметры $Bi_{0.8}Ho_{0.2}FeO_3$: D_1=26.567, D_2=1.560, ΔE_1=0.254 eV и ΔE_2=0.047eV. Согласие экспериментально выделенной аномальной теплоемкости $\Delta C_p(T)$ с вычисленной по формуле (1) достаточно хорошее (вставка на Рис.1).

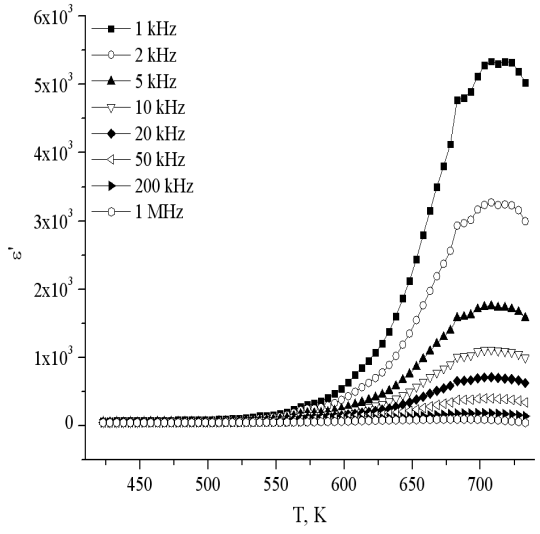


Рис.2. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости ε' $BiFeO_3$.

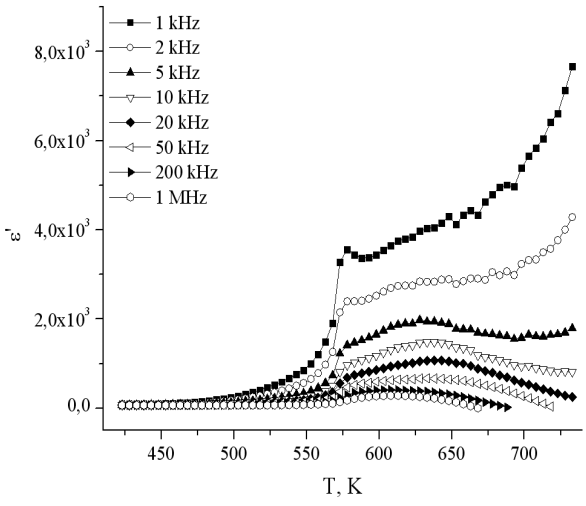


Рис.3. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости ε' $Bi_{0.8}Ho_{0.2}FeO_3$.

Как видно из рис.2-3, диэлектрическая проницаемость образцов $BiFeO_3$ и $Bi_{0.8}Ho_{0.2}FeO_3$ по абсолютным значениям практически идентична. Оба образца демонстрируют частотную зависимость релаксационного типа и

испытывают аномалию $\varepsilon'(T)$ в окрестности температуры Нееля. Причем, следует отметить, что для образца $Bi_{0.8}Ho_{0.2}FeO_3$, на зависимости $\varepsilon'(T)$, так же как и на зависимости $C_p(T)$, наблюдается вторая аномалия (~ 583K). В связи с этим можно предположить что данная аномалия (~ 583K) на зависимости $\varepsilon'(T)$, так же как и на зависимости $C_p(T)$ может быть обусловлена структурным фазовым переходом между ромбоэдрической и орторомбической структурами.

Таким образом, результаты исследований $Bi_{0.8}Ho_{0.2}FeO_3$ показывают, что легирование феррита висмута редкоземельным элементом гольмием приводит к появлению дополнительного вклада в теплоемкость в области температур 300 − 700K. Дополнительный вклад в теплоемкость можно интерпретировать как аномалию Шоттки для трехуровневых состояний, возникающих вследствие искажения параметров решетки при легировании. Обнаруженная на температурных зависимостях теплоемкости дополнительная аномалия при T ~ 590K и ее проявлении на диэлектрической проницаемости при T ~ 583K для состава с x = 0.2 свидетельствуют о том, что она может быть обусловлена структурным фазовым переходом между ромбоэдрической и орторомбической структурами.

[1] Pittala Suresh, P.D.Babu, S.Srinath. Journal of Applied Physics **115**, 17D905 (2014)
[2] А.А.Амиров, А.Б.Батдалов, С.Н.Каллаев, З.М.Омаров, И.А.Вербинко. ФТТ **51**, 1123 (2009).
[3] J.Ronguette, J.Haines, V.Bornand, V.Bornand, M.Pintard. Phys.Rev. B **65**, 214102 (2002).
[4] D.C.Arnold, K.S.Knight, F.D.Morrison, Ph.Lightfoot. Phys.Rev.Lett. **102**, 027602 (2009).
[5] R.G.Mitarov, V.V.Tikhonov, L.V.Vasilev, A.V.Golubkov, I.A.Smirnov. Phys.St.Sol. (a). **30**, 457 (1975).
[6] С.Н.Каллаев, Р.Г.Митаров, З.М.Омаров, Г.Г.Гаджиев, Л.А.Резниченко. ЖЭТФ **145**, 2, 320 (2014).

Магнитокалорические свойства $Mn_{1-x}Fe_xAs$ в циклических магнитных полях

А.Б. Гаджиев [1], А.Г. Гамзатов [1], А. М. Алиев [1], Л.Н. Ханов [1], В.И. Митюк [2], Г.А. Говор [2]

[1] Институт Физики им. Х. И. Амирханова, ДФИЦ РАН, Махачкала, 367015, Россия
[2] НПЦ НАН Белоруссии по материаловедению, Минск, Белоруссия
e-mail: mr.gadzhiev.93@mail.ru

Несмотря на то, что процесс создания твердотельных магнитных холодильников выходит на практическую плоскость, (созданы и описаны десятки типов холодильных машин с разными характеристиками, с различными рабочими телами, различной конструкции и т.д [1-4]), технология магнитного охлаждения столкнулась с множеством проблем требующих дальнейших научных и научно-поисковых исследований.

Известно, что к материалам для использования в технологии магнитного охлаждения предъявляется большое количество требований, среди которых основным является то, что материал должен обладать большой величиной МКЭ в области комнатных температур. На самом деле это требование должно быть дополнено требованием стабильности магнитокалорических свойств в условиях долговременного воздействия циклических магнитных полей, так как именно в таких условиях будет функционировать рабочее тело твердотельного магнитного холодильника.

Можно предположить, что материалы с магнитными фазовыми переходами второго рода будут обладать стабильными магнитокалорическими свойствами ввиду отсутствия сильных изменений решетки и гистерезисных явлений в области фазовых переходов. Но большая часть известных в настоящее время перспективных магнитокалорических материалов — это материалы с магнитоструктурными фазовыми переходами первого рода. К этим материалам относятся и сплавы Mn-(Fe,P)-As [1, 2].

Благодаря совмещенным магнитным и магнитостурктурным фазовым переходам в этих материалах наблюдаются гигантские значения МКЭ. Соответствующий гигантский магнитокалорический эффект обусловлен не только изменением в магнитной системе, но и вкладом решетки.

Из-за свойственных данным материалам структурных изменений, сопровождающихся гигантскими изменениями объема решетки, и гистерезисными явлениями, стабильность магнитокалорических свойств в таких материалах не является очевидной. Поэтому актуальной и важной задачей является поиск новых материалов с гигантским и стабильным в циклических магнитных полях магнитокалорическим эффектом, или же поиск материалов со стабильными магнитокалорическими свойствами среди известных перспективных магнитокалорических материалов.

В данной работе представлены результаты исследования температурной зависимости и эффектов деградации магнитокалорического эффекта в системе $Mn_{1-x}Fe_xAs$ (x =0.003, 0.006, 0.015) в циклических магнитных полях до 8 Т.

Исследование выполнено при частичной финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-52-00047.

[1] B. Yu, M. Liu, P.W. Egolf, A. Kitanovski, International Journal of Refrigeration, 33, 1029 (2010).
[2] K.A. Gschneidner, Jr., V.K. Pecharsky. Int. J. Refrigeration 31, 945 (2008).
[3] M.H. Phan, S.C. Yu. J. Magn. Magn. Mater. 308, 325 (2007).
[4] B.F. Yu, Q. Gao, B. Zhang, X.Z. Meng, Z. Chen. Int. J. Refrigeration 26, 622 (2003).
[5] L. Tocado, E. Palacios, R. Burriel. J. Thermal Analys. Calorimetry **84**, 213 (2006).

Магнитокалорические свойства сплавов La-Fe-Co-Si в циклических магнитных полях

Н.З.Абдулкадирова [1*], А.М.Алиев [1], А.Г.Гамзатов [1], P.Gebara [2]
[1]*Институт физики им. Х.И. Амирханова – обособленное подразделение Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, 367003 Махачкала, ул. М.Ярагского 94*
[2]*Institute of Physics, Częstochowa University of Technology, Armii Krajowej 19 Av., 42-200 Częstochowa, Poland*
[*] *e-mail: nnurizhat@mail.ru*

Идея создания твердотельного магнитного холодильника, работающего при комнатных температурах, давно привлекает внимание исследователей во всем мире. И этот интерес в настоящее время только растет, что подтверждается возрастающим количеством научных публикаций, посвященных поиску и исследованию материалов с магнитокалорическим эффектом в области комнатных температур. Достигнуты значительные успехи в получении материалов, обладающих высокими значениями МКЭ. Это позволяет вплотную приступить к конструированию и созданию магнитных холодильников обладающих рядом преимуществ перед обычными холодильниками, среди которых экологическая безопасность, энергоэффективность, технологичность и т.д. В качестве рабочего тела магнитных холодильников предлагается использовать разные классы магнитокалорических материалов. Одними из таких перспективных материалов являются сплавы La-Fe-Co-Si, в которых наблюдаются значения величины МКЭ вблизи комнатных температур. Сплавы La-Fe-Co-Si уже давно привлекают внимание специалистов, и исследованию таких сплавов посвящено много работ. При этом магнитокалорические свойства таких сплавов в основном исследованы косвенными методами. В случае, когда магнитный переход сопровождается структурными изменениями, косвенные оценки МКЭ могут дать большую погрешность, так как соотношения Максвелла, применимые для такой оценки, верны для фазовых переходов первого рода. Но даже прямые измерения при разовых циклах изменения магнитного поля не могут дать полной информации о перспективах тех или иных материалов. В материалах с магнитоструктурными фазовыми переходами магнитокалорические свойства в постоянных и в циклических магнитных полях (а именно последние будут использоваться в холодильных машинах) могут существенно отличаться друг от друга.

Поэтому в данной работе исследовано влияние циклического (переменного) поля на магнитоклаорические свойства сплавов La-Fe-Co-Si, а именно, на величину эффекта, на его зависимость от частоты магнитного поля и на устойчивость магнитокалорических свойств при долговременном воздействии магнитного поля.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта № 21-58-53046

Секция Б3

Нелинейные явления и хаос в конденсированных средах

Перегретые водные растворы гликолей: теплоотдача в условиях мощного тепловыделения

Д.В.Волосников, И.И.Поволоцкий, П.В.Скрипов
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: dima_volosnikov@mail.ru

Многообразие индивидуальных веществ, простых или сложных, порождает еще большее разнообразие и их растворов, большая часть которых – водные растворы. Исследование переноса тепла растворами представляет собой серьезную экспериментальную задачу, в, виду необходимости максимально точного приближения условий эксперимента к расчетным моделям [1, 2].

Цель данной работы – выяснение взаимосвязи тепловой проводимости импульсно нагретого раствора и его избыточных свойств при исходной температуре, а также особенностей теплообмена в случае спинодального распада раствора, кратковременно переведенного в область неустойчивых состояний.

В работе применен метод управляемого импульсного нагрева проволочного зонда, а именно, методика термостабилизации для исследования коэффициента мгновенной теплоотдачи жидкостей в режиме тепловой проводимости [3]. Определены значения тепловой проводимости водных растворов гликолей (*гликоли, пропиленгликоли* и *полиэтиленгликоли*), имеющих отрицательный объем смешения во всей исследованной области изменения температуры. Обнаружен эффект появления дополнительного теплового сопротивления (ДТС) перегретых растворов относительно их аддитивных значений. Выяснено, что определяющим ДТС параметром является модуль объема смешения раствора. В случае водных растворов *полипропиленгликолей*, перегретых относительно спинодали жидкость-жидкость, найдены условия резкой интенсификации теплоотдачи растворов относительно теплоотдачи чистой воды, полученной при сопоставимых условиях опыта [4].

Работа выполнена при поддержке РНФ, проект № 19-19-00115.

[1] U. Hammerschmidt, W.Sabuga, Int. J. of Thermophys., 21 (1), 217 (2000).
[2] J.V. Sengers, Int. J. Thermophys, 41, 117 (2020).
[3] П.В. Скрипов, А.А. Старостин, Д.В. Волосников. Доклады РАН.**390**, 2 (2003).
[4] D.V. Volosnikov, I.I. Povolotskiy, A.A. Igolnikov, M.G. Vasin,L.D. Son, P.V. Skripov, J. Phys.: Conf. Ser. 1787, 012032 (2021).

Функциональный композит на основе бутадиен стирольного латекса и многостенных углеродных нанотрубок

А.А. Бабаев [1], А. О. Саадуева [1], Е.М Зобов [1], Е.И. Теруков [2], А.Г. Ткачев [3]
[1] *Институт физики им. Х. И. Амирханова ДФИЦ РАН, 367015, Махачкала, Россия*
[2] *Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021, Санкт-Петербург, Россия*
[3] *Тамбовский государственный технический университет, 392000, Тамбов, Россия*
babaev-arif@mail.ru

В последние годы особое место среди новых функциональных материалов занимают многокомпонентные гетерогенные системы, находяшиеся в аморфном, нано-, микрокристаллическом состояниях. Несмотря на успехи по практическому применению таких материалов, физическая природа происходящих в них явлений еще не установлена и требует теоретического обоснования. В частности, изучение нелинейных явлений в многокомпонентных гетерогенных системах и зависимости от пространственного расположения атомов способствует развитию общей теории конденсированного состояния.

Высоким коэффициентом поглощения микроволнового излучения в широком диапазоне частот характеризуется макроскопический графит. Естественно ожидать наличия этого качества и углеродных нанотрубок. К общим требованиям относятся высокая смачиваемость полимерным материалом, химическая и термическая стойкость, хорошая диспергируемость в полимере, нетоксичность. Авторы [1] рассматривали проблемы исследования электрофизических характеристик более 250 композитных материалов, полученных в результате добавления в полимерную матрицу углеродных нанотрубок в основном от 0,01 до ≈20%. Механизм транспорта электронов между УНТ с различной хиральностью исследовали авторы [2]. Впервые исследовали электрофизические свойства, [5] под давлением 9 Гпа в процессе компрессии и декомпрессии, [6], теплофизические свойства полимерного композита с большим содержанием многостенных углеродных нанотрубок (МСУНТ) 95%, где в качестве полимера использовался фторопластовый лак 5% [3-4]. Обнаруженные при 300 К≤Т<450 К. аномалии ответственны за структурные фазовые переходы первого рода. Электрофизические, теплофизические свойства, эластичность, упругость важны при создании композитов для радиозащитных покрытий.

Для создания композитных материалов, содержащих наноразмерные углеродные образования, представляется целесообразным использование недорогих материалов, доступным и вводимых в больших количествах в полимер. К таким материалам можно отнести многостенные углеродные нанотрубки (МСУНТ) – Таунит-М и бутадиен-стирольный латекс, который

является хемо-термо-радационно стойким полимером. Через 2000 сек. жидкий полимер становится твердым. Для получения композита использованы МСУНТ с диаметром от 10 до 30 нм и длиной 2мкм,толщина слоя композита 200 мкм. Для исследования поверхности были созданы две серии композитов в которых концентрация МСУНТ менялась от 8% до 35% по массе в жидкой фазе. На рис.1 приведены фотографии поверхностей образцов высушенных композитов с различным содержанием МСУНТ в % масс. Четко видно появление сильно неоднородного рельефа вблизи концентрации 15-20% по массе в жидкой фазе, что может быть объяснено как переход частиц МСУНТ от состояния с приблизительно равномерным распределением по объёму образца к сильно кластеризованной сети отдельных островков, разделённых разветвлёнными «долинами».

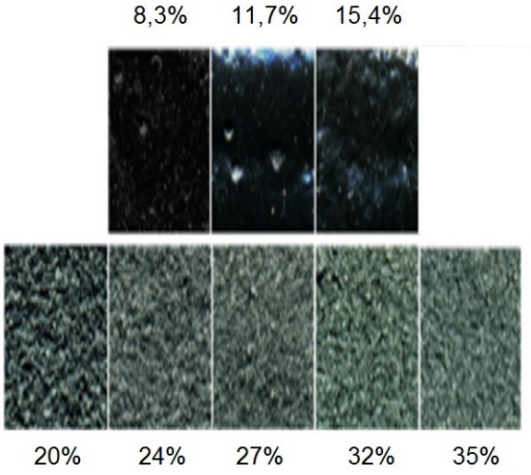


Рис.1.Фотографии рельефа поверхности высушенных слоёв композита (размер кадра 8 х 6 мм, указаны концентрации МСУНТ, масс. % в жидкой фазе)

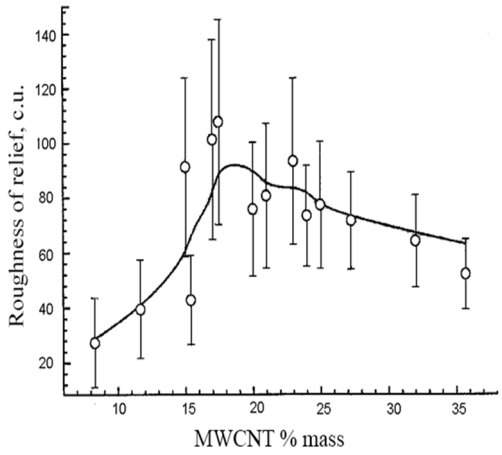


Рис.2.Концентрационная зависимость неоднородностирельефа композита МСУНТ в полимере

По мере увеличения концентрации МСУНТ пространство долин постепенно начинает заполняться углеродными нанотрубками, таким образом, средний рельеф становится более однородным. Благодаря взаимодействию сил Ван-дер-Ваальса образуются кластеры в которых нанотрубки слипаются друг с другом. Как видно из рис. 1 и рис. 2 в интервале 15-20% поверхность из гладкой превращается в сильно шероховатую с характерным размером неоднородностей 150-500 мкм, средняя величина которых медленно уменьшается с дальнейшим ростом концентрации МСУНТ. Расширив количество исследуемых образцов были получены значения соответствующие интенсивности рельефа, а также значение статистической дисперсии параметра рельефа по площади для каждого образца.

Обе величины представлены на рис. 2 как функция концентрации МСУНТ, причем среднее значение рельефа даны как экспериментальные точки и значения дисперсии как соответствующие погрешности измерения за счет неоднородного распределения МСУНТ в полимере.. Видно, что у

большого числа образцов зависимость имеет большой статистический разброс, тем не менее, выраженный скачкообразный переход и здесь вполне отвечает тому, что было отмечено на рис.1.

На рис. 3 приведён график концентрационной зависимости электропроводимости (σ) образцов, измеренной на малом постоянном токе. Концентрации здесь заданы в массовых процентах по твёрдой фазе. Критическая концентрация МСУНТ, соответствовавшая резкому изменению характера изменения поверхности, при 15,4-20% по массе в жидкой фазе, соответствует концентрации 43-52% по массе в твёрдой фазе. Изменение концентрации МСУНТ в полимере от 40-43% масс, приводит к резкому уменьшению проводимости на 5 порядков за счет образования кластеров МСУНТ, при этом в зазоре между кластерами высокоомный полимер. При дальнейшем росте концентрации МСУНТ происходит заполнение зазора МСУНТ и σ увеличивается на 5-6 порядков до насыщения. Минимум электропроводности при концентрации 43-52% МСУНТ в твёрдой фазе может быть объяснён переходом от трёхмерной к двумерной организации системы, т.е. переходом к той стадии роста кластеров МСУНТ в слое, при котором их средний размер достигает по порядку величины толщины слоя

На рис.4 приведены значения коэффициента отражения и поглощения СВЧ излучения композита. Отметим, что шкала концентраций МСУНТ пересчитана в массовые проценты по твёрдой фазе.

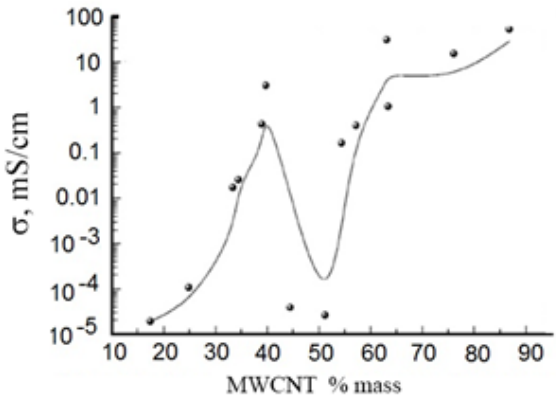


Рис.3.Концентрационная зависимость электропроводности композита на основе МСУНТ и полимера

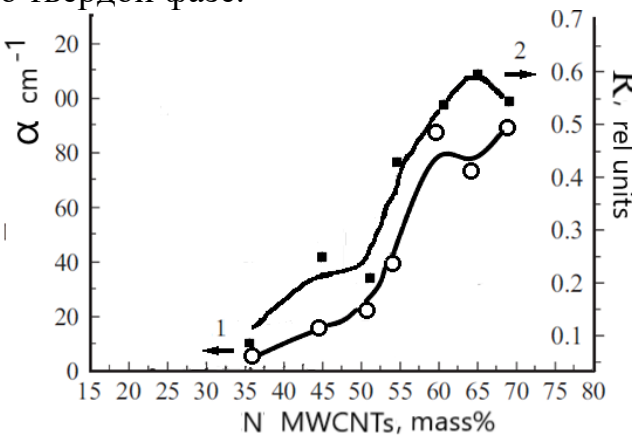


Рис.4. Зависимость коэффициента поглощения (1) и отражения (2) СВЧ излучения от концентрации МСУНТ в полимере

Вследствие этого критическая концентрация МСУНТ, соответствовавшая резкому изменению характера изменения поверхности, при 16-18% по массе в жидкой фазе, соответствует концентрации 43-52% по массе в твёрдой фазе. Кривые, на рис. 4, имеют не сильно выраженные, но всё же заметные точки перегиба, как по поглощению, так и по отражению СВЧ излучения при концентрации, близкой к критической. Полученные

данные по поглощению композитных защитных покрытий представляют интерес с точки зрения разнообразных практических приложений. В первую очередь, это средства индивидуальной и коллективной защиты от СВЧ излучения.

В результате создан жидкофазный композитный материал на основе МСУНТ и полимера бутадиен-стирольного латекса, который можно наносить лакокрасочным методом для радиозащитных покрытий. С увеличением концентрации МСУНТ в полимере, электропроводность увеличивается на 7 порядков.В узком диапазоне концентраций 43-52% МСУНТ обнаружен эффект стохастического «переключения», выражающийся в скачкообразных изменениях проводимости образцов. Увеличение концентрации МСУНТ в полимере от 40% масс, приводит к резкому уменьшению σ на 5 порядков за счет образования кластеров МСУНТ между которыми высокоомный полимер благодаря сил Ван-дер-Ваальса. Зависимости и корреляции электропроводности, поглощения и отражения СВЧ излучения морфологии композитных слоёв от концентрации МСУНТ позволяет в широких пределах управлять их электрическими и радиопоглощающими свойствами.Для получения эффективных радиозащитных покрытий необходимо добиваться максимального содержания МСУНТ в полимер. Можно использовать в качестве защитного покрытия композит с 80-90%ным содержанием углеродных наночастиц и бутадиен-стирольного латекса.

[1] А.В .Елецкий, А.А. Книжник, Б.В.Потапкин. УФН.**85**. 225. (2015).
[2] Bell R., Payne M.C., Mostofi A.A.Phys. Rev. B **89**. P. 145426. (2014).
[3] A.A.Babaev, A.M.Aliev, P.P.Khokhlachev, Yu. A.Nickolaev, E.I.Terukov., A.B.Freidin, R.A.Filippov, A.K. FillipovGrafeneSceince Handbook: Size-Dependet Properties, Boca Raton, Florida, USA **5**. P 505 (2016.)
[4] А.А.Бабаев, П.ПХохлачев., Е.ИТеруков., Ю.А.Николаев, А.БФрейдин., Р.АФилиппов., А.КФилиппов.ФТТ. **57**. №2. С. 404-409. (2015.)
[5] T. R. Arslanov, A. A. Babaev, R. K. Arslanov. P. P. Khokhlachev. E.I.Terukhov and A. K. Filippov. Applied Physics Letters **105**, 203 103-1-4 (2014).
[6] А.А.Бабаев, А.М.Алиев, Е.И.Теруков, А.К. Филиппов.ТВТ. **55**. №2. С. 513-517. (2017).

Дискретные магнитные бризеры в моноаксиальном хиральном гелимагнетике

Е.Г.Екомасов[1], А.С.Овчинников [2], И.Г.Бострем [2],
В.Е.Синицын [2], М.И.Фахретдинов [1], Дж. Кишине [3]
[1] *Башкирский государственный университет, Уфа, Россия*
e-mail: ekomasoveg@gmail.com
[2] *Институт естественных наук и математики УрФУ, Екатеринбург, Россия*
[3] *Открытый университет Японии, Чиба, Япония*

Изучены дискретные магнитные бризеры в фазе вынужденного ферромагнетизма в моноаксиальном хиральном гелимагнетике в рамках модели спиновой цепочки с антисимметричным обменным взаимодействием. Цепочка спинов конечной длины L описывается гамильтонианом.

$$H = -2J\sum_n S_n S_{n+1} + A\sum_n \left(S_n^z\right)^2 - H_0\sum_n S_n^2 + D\sum_n \left[S_n \times S_{n+1}\right]_z,$$

где S_n – спиновый вектор n-го узла. Первое слагаемое соответствует обменному взаимодействию спинов вдоль оси z с константой взаимодействия $J > 0$, второе – одноионной анизотропии величины $A > 0$ типа «легкая плоскость», третий член описывает зеемановское взаимодействие с внешним магнитным полем H_0, направленным вдоль оси цепочки z. Последнее слагаемое отвечает антисимметричному обмену Дзялошинского-Мория с вектором взаимодействия D, направленным вдоль оси цепочки. Спиновая система берется в состоянии вынужденного ферромагнетизма, т.е. предполагается, что магнитное поле H_0 превосходит критическое поле $H_{cr} = 2S\left(\sqrt{4J^2 + D^2} - J + A\right)$ перехода в ферромагнитную фазу.

Используя стандартные подстановки типа:

$$s_n^+ = s_n(t)\exp(-i\omega t + ikna), s_n^z = \sqrt{1 - s_n^2}$$

получена система дискретных алгебраических уравнений:

$$\Omega s_n = -2Bs_n\sqrt{1 - s_n^2} + s_n\left(\sqrt{1 - s_{n+1}^2} + \sqrt{1 - s_{n-1}^2}\right) - \sqrt{1 - s_n^2}\left(s_{n-1} + s_{n+1}\right)\sqrt{1 + \frac{D}{4J^2}},$$

где параметр $B = A/(2J)$, $\Omega = (\hbar\omega - H_0)/(2JS)$ и волновой вектор $k\,a = -arctg(D/(2J))$, (a – постоянная решетки).

Известно, что в гайзенберговской спиновой цепочке без антисимметричного обмена возможны внутренние локализованные моды двух типов: «светлые» и «темные» [1]. Первые возникают при частоте $\Omega > 4 - 2B$, т.е. выше частоты линейных спиновых волн и требуют для своего существования большой величины одноионной анизотропии. Частоты «темных» бризеров лежат внутри области спектра спиновых волн

вблизи верхней или нижней его границы, но они могут существовать и при малой константе анизотропии.

Вопрос о существовании дискретных бризеров с учетом взаимодействия Дзялошинского-Мория, которое существенно меняет симметрию задачи, требует отдельного рассмотрения. Нами уже было показано, что «светлые» бризеры возникают и при наличии антисимметричного обмена [2,3]. В настоящей работе проведён поиск второго типа дискретных магнитных бризеров – «темных» мод. Проведено численное моделирование этих решений с использованием программного комплекса на платформе Nvidia CUDA, разработанного ранее для нахождения «светлых» мод. При численном счете использовались значения параметров обмена и анизотропии реального хирального гелимагнетика CrNb3S6: $D/(2J) = 0.16$), $B = 0.15$. Длина цепочки составляла $L = 101$ узел, были взяты открытые граничные условия. Полученные решения в виде кинка и многосолитонные решения представлены на рис. 1 и рис. 2, соответственно.

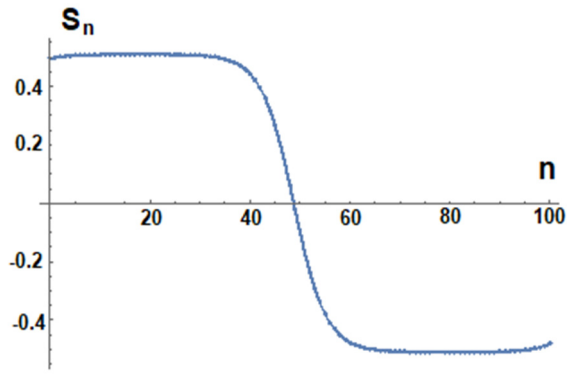


Рис.1. Темный бризер в виде кинка (частота Ω = - 0.28, значение крайней левой переменной s_0=0.4953732575050).

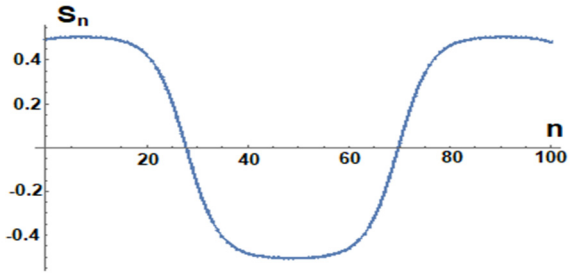


Рис. 2. Многосолитонный «темный» бризер (частота Ω=-0.28, значение крайней левой переменной s_0=0.49484645075).

Проведено и аналитическое описание «темных» мод в континуальном приближении. Оно показывает, что в общем случае, как и для «светлых» возбуждений, формируется бризерная решетка:

$$s(z) = a \ \ sn[(b(z - z_0), k)],$$

где sn – эллиптический синус Якоби. Амплитуда a, коэффициент b и модуль k эллиптической функции определяются параметрами гамильтониана, частотой и граничными условиями. В пределе $k \to 0$ бризерная решетка переходит в одиночный кинк.

Устойчивость «темных» решений исследовалась, как и ранее для «светлых» мод, с помощью линейной теории Флоке [4]. Все полученные в результате численного моделирования решения оказались устойчивыми.

Отметим, что при наличии антисимметричного обмена и в «светлых», в «темных» дискретных бризерах поперечные компоненты sn восстанавливают спиральное упорядочение в реальном пространстве, которое существовало в хиральной цепочке до перехода в состояние вынужденного ферромагнетизма, и, как следствие, бризерная решетка обладает топологическим зарядом и ненулевым импульсом, как и стандартная солитонная решетка.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта No. 20-02-00213.

[1] S.V.Rahmanova, A.V.Shchegrov, Phys. Rev. B **57**, R14012 (1998).
[2] I.G.Bostrem, Vl.E.Sinitsyn, A.S.Ovchinnikov, E.G.Ekomasov, J.Kishine, AIP Advances **11**, 015208 (2021).
[3] .G. Bostrem, V.E. Sinitsyn, A.S. Ovchinnikov, M.I. Fakhretdinov and E.G. Ekomasov, Lett. Mater., 11, 109 (2021).
[4] Y.Zolotaryuk, S.Flach, V.Fleurov, Phys. Rev. B **63,** 214422 (2001).

Gaussian delta noise and autocorrelation in Bullard dynamo

A.M.Agalarov[1], E.S.Alekseeva[2], A.A.Potapov[3], A.E.Rassadin[4]
[1]*Institute of Physics of Dagestan Federal Research Center RAS, Russia*
e-mail: aglarow@mail.ru
[2]*MSU, Moscow, Russia*
e-mail: kometarella@mail.ru
[3]*V. A. Kotelnikov Institute of Radio Engineering and Electronics, Russian Academy of Sciences, Moscow*
JNU-IREE RAS Joint Lab. of Information Technology and Fractal Processing of Signals JiNan University, Guangzhou, 510632, China ,e-mail: potapov@cplire.ru
[4]*Nizhny Novgorod Yniversity, Nizhny Novgorod, Russia*
e-mail: brat_ras@list.ru

1. Introduction. At present great attention is paid to studying of stochastic resonance in multidimensional systems arising from physics through chemistry to biology and neuroscience [2-5]. However, in our opinion, the most correct path in investigation of stochastic resonance leading to a real understanding of the essence of this phenomenon is choosing of a fairly simple dynamic system with a relatively small dimension and a detailed study of this one. As a rule there are no analytical solutions both the nonstationary Fokker-Plank-Kolmogorov equation for such system and stochastic differential equations describing its behaviour. Numerical solution of these problems is quite hard too [6, 7]. Therefore this system ought to allow experimental investigation.

We study one-disk dynamo (the so-called Bullard dynamo). At first this electromechanical system was suggested in article [8] in order to illustrate a number of astrophysical and geophysical effects concerning motion of electrically conducting fluid in a magnetic field (see [9] and references therein). Contrary to original article [8] we take into consideration both electrical load in parallel with the field coil and friction at the axis of the dynamo. But we restrict ourselves by investigation of the linear response of the Bullard dynamo because of our final aim is design of functioning homopolar dynamo for analog modeling of stochastic resonance in this system. We stress that in our research there is no any magneto-hydrodynamic background — compare for instance with work [10].

In section 2, we discuss equations of motion for the Bullard dynamo and their linearization. Section 3 is devoted to calculations of influence of harmonic external voltage on the linearized Bullard system. Section 4 deals with linear responses of the system on random signals with zero average, namely, on the Gaussian delta-correlated noise and the Langevin stochastic process. Final section is devoted to discussion of results elaborated and conclusions.

2. **Mathematical model** of the homopolar dynamo is given by the following system of stochastic ordinary differential equations:

$$\begin{cases} L\cdot\dfrac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}t}+R\cdot J=M\cdot J\cdot\Omega+U(t) \\ I\cdot\dfrac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}t}=K-M\cdot J^2-2\cdot\gamma\cdot\Omega \end{cases}, \qquad (1)$$

where $\Omega(t)$ - angular speed of rotation of the disk of dynamo, R - value of resistance in the electrical circuit , M - coefficient of mutual inductance, $U(t)$ - an external voltage, I - moment of inertia for the dynamo, K - constant mechanical torque on the axis of the dynamo, $2\cdot\gamma$ - coefficient of mechanical friction on the dynamo axis.

To study stochastic resonance in the system (1) we to choose the external voltage as follows:

$$U(t) = U_0 \cdot \cos(\nu \cdot t) + V(t), \tag{2}$$

where U_0 is amplitude of harmonic signal, ν is circular frequency of harmonic signal, $V(t)$ is the Gaussian stationary stochastic process with zero average

$$< V(t) >= 0, \tag{3}$$

and the fixed *autocorrelation function (ACF):*

$$< V(t) \cdot V(t') >= B(t - t'). \tag{4}$$

We underline that our approach in (1) differs sharply from one in paper [11] because of authors of this paper apply separation of the magnetic flux on magnetic flux across disk of the dynamo and magnetic flux across the loops of inductance. This separation of magnetic flux on two parts leads to increasing of dimension of phase space of the system.

For analysis of system (2.1) it is convenient rewrite its in a dimensionless variables and parameters:

$$x_1 = \sqrt{\frac{M}{K}} \cdot J,\ x_2 = \sqrt{\frac{M \cdot I}{L \cdot K}} \cdot \Omega,\ \nu_0 = \sqrt{\frac{M \cdot K}{L \cdot I}},\ \ \mu = R\sqrt{\frac{I}{M \cdot L \cdot K}},\ \delta = \gamma \cdot \sqrt{\frac{L}{I \cdot K \cdot M}},\ U_m = K \cdot \sqrt{\frac{L}{I}}. \tag{5}$$

The system (2.1) in dimensionless variables can be rewrite in the form:

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = -\mu \cdot x_1 + x_1 \cdot x_2 + u(\tau) \\ \dot{x}_2 = 1 - x_1^2 - 2 \cdot \delta \cdot x_2 \end{cases}, \tag{6}$$

where $u(\tau) = U(t)/U_m$ is dimensionless external voltage; $\dot{x}_{1,2}$ are derivatives of dimensionless variables $x_{1,2}$ with respect to dimensionless time $\tau = \nu_0 \cdot t$.

It is easy to see that if $0 < \delta < 1/2\mu$ then system (2.6) for case u(τ)=0 possesses by three equilibrium states: $O^s(0,\ 1/(2\cdot\delta))$ and $O^{\pm}(\pm\sqrt{1 - 2\cdot\delta\cdot\mu},\ \mu)$. It is not difficult to check that if $0 < \delta < \sqrt{2 + 4\mu^2} - 2\mu$ then points $O^{\pm}$ are stable focuses and if $\sqrt{2 + 4\mu^2} - 2\mu < \delta < 1/2\mu$ then points $O^{\pm}$ are stable nodes. Point O^s is saddle point in both cases.

It is obvious that system (6) in the case μ(τ)= u(τ)=0 is invariant under transformation of variables $(x_1, x_2) \to (-x_1, x_2)$. Therefore, to calculate linear response of the system (6) it is enough to take into account only vicinity of the point O^+.

3. **Linearization homopolar Bullard dynamo**. Introducing for system (6) new variables $y_{1,2}$ as follows:

$$x_1 = +\sqrt{1 - 2\cdot\delta\cdot\mu} + y_1, \qquad x_2 = \mu + y_2, \tag{8}$$

and rejecting terms with powers of $y_{1,2}$ greater than one we find that system (6) is reduced to this one:

$$\begin{cases} \dot{y}_1 = \sqrt{1 - 2\cdot\delta\cdot\mu} \cdot y_2 + u(\tau) \\ \dot{y}_2 = -2 \cdot \sqrt{1 - 2\cdot\delta\cdot\mu} \cdot y_1 - 2\cdot\delta\cdot y_2 \end{cases}. \tag{9}$$

From system (9) it is easy to observe that variable y_2 obeys to the equation of motion for harmonic oscillator with damping factor δ and fundamental frequency $\omega_0 = \sqrt{2 \cdot (1 - 2 \cdot \delta \cdot \mu)}$ under the action of external force:

$$\ddot{y}_2 + 2 \cdot \delta \cdot \dot{y}_2 + \omega_0^2 \cdot y_2 = -\sqrt{2} \cdot \omega_0 \cdot u(\tau), \tag{10}$$

and that the behaviour of variable y_1 is governed by the behaviour of variable y_2 as follows:

$$y_1 = -\frac{\dot{y}_2 + 2 \cdot \delta \cdot y_2}{\sqrt{2} \cdot \omega_0}. \tag{11}$$

At last for self-consistency of above presented linearization external dimensionless voltage ought to be weak: $|u(\tau)| << 1$.

4. Action of the Gaussian delta-correlated noise and the Langevin stochastic process on the linearized Bullard dynamo

If the external voltage is purely stochastic process then in accordance with formulae (4):

$$u(\tau) = \left(\frac{L}{I}\right)^{1/2} \cdot \frac{V(t)}{K}, \tag{12}$$

therefore substituting expression (12) into formulae (3) we establish that:

$$< u(\tau) >= 0\,, \; < u(\tau) \cdot u(\tau') >= 2 \cdot D \cdot \delta(\tau - \tau')\,, \tag{13}$$

where intensity of stochastic process is renormalized as $D = (M \cdot I)^{1/2} \cdot K^{5/2} \cdot L^{-3/2} \cdot D_V$.

In this case it is interesting to determine the following correlation functions:

$$K_{ij}(\tau) =< y_i(t) \cdot y_j(t + \tau) >, \; i, j = 1,2\,. \tag{14}$$

Using formula (10) it is easy to prove that all of these functions can be expressed via function $K_{22}(\tau)$ namely:

$$K_{12}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{2} \cdot \omega_0} \cdot \left\{ \frac{dK_{22}(\tau)}{d\tau} + 2 \cdot \delta \cdot K_{22}(\tau) \right\}, \quad K_{21}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{2} \cdot \omega_0} \cdot \left\{ -\frac{dK_{22}(\tau)}{d\tau} + 2 \cdot \delta \cdot K_{22}(\tau) \right\}, \quad K_{11}(\tau) = \frac{1}{2 \cdot \omega_0^2} \cdot \left\{ -\frac{d^2 K_{22}(\tau)}{d\tau^2} + 4 \cdot \delta^2 \cdot K_{22}(\tau) \right\}. \tag{15}$$

Furthermore according to the Wiener-Khinchin theorem [8] it is convenient to introduce spectral densities as Fourier transforms from correlation functions (14):

$$S_{ij}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} K_{ij}(\tau) \cdot \exp(-i \cdot \omega \cdot \tau) \cdot d\tau\,. \tag{16}$$

On the other hand because of spectral density of stochastic process (12) is equal to $S_u(\omega) = 2 \cdot D$ then the consequence of equation (9) is the next formula:

$$S_{22}(\omega) = \frac{4 \cdot \omega_0^2 \cdot D}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + 4 \cdot \delta^2 \cdot \omega^2}, \tag{17}$$

hence substituting expression (17) in formulae (15) one can find that:

$$S_{11}(\omega) = \frac{2 \cdot D \cdot (\omega^2 + 4 \cdot \delta^2)}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + 4 \cdot \delta^2 \cdot \omega^2} \tag{18}$$

and

$$S_{12}(\omega) = \frac{2 \cdot \sqrt{2} \cdot \omega_0 \cdot D \cdot (i \cdot \omega + 2 \cdot \delta)}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + 4 \cdot \delta^2 \cdot \omega^2}. \tag{19}$$

It is obvious that $S_{21}(\omega) = S_{12}(-\omega)$ and therefore $K_{21}(\tau) = K_{12}(-\tau)$. Function (17) possesses by poles $\pm\sqrt{\omega_0^2 - \delta^2} \pm \mathrm{i} \cdot \delta$ hence applying inverse Fourier transform to formulae (17)-

(19) by means of the well-known Jordam lemma one can establish explicit form of correlation functions (14) but these expressions are too bulky that is why they are not presented in this report. One ought to note that time of correlation in this system is approximately equal to $1/\omega_0$.

5. Conclusion

1. When applying weak random signals, the correlation functions must correspond to the calculated dependencies, and the triple auto-correlation functions and bispectrums must be close to zero due to the Gaussian nature of the input signals.
2. The criterion for the non-linearity of the mode is non-zero bispectrums (the non-linearity makes the random process non-Gaussian).

Acknowledgments

AAP is grateful to the China grant "Leading Talent Program in Guangdong Province" (No. 00201502, 2016-2020) JiNan University (China, Guangzhou).

References

[1] Nicolis C., Nicolis G. Coupling-enhanced stochastic resonance // Phys. Rev. E. 2017. Vol. 96, no. 4, pp. 042214-1-10.
[2] Zaks M.A., Pikovsky A. Synchrony breakdown and noise-induced oscillation death in ensembles of serially connected spin-torque oscillators // Eur. Phys. J. B. 2019. Vol. 92, pp. 160-1-12.
[3] Bolotov M.I., Smirnov L.A., Osipov G.V., Pikovsky A. Locking and regularization of chimeras by periodic forcing // Phys. Rev. E. 2020. Vol. 102, no. 4, pp. 042218-1-11.
[4] Basios V. Strong perturbations in nonlinear systems: The case of stochastic-like resonance and its biological relevance from a complex system's perspective // Eur. Phys. J. Spec. Top. 2016. Vol. 225, pp. 1219-1229.
[5] Pankratova E.V., Belykh V.N. Consequential noise-induced synchronization of indirectly coupled self-sustained oscillators // Eur. Phys. J. Spec. Top. 2013. Vol. 222, pp. 2509-2515.
[6] Floris C. Numeric solution of the Fokker-Plank-Kolmogorov equation // Engineering. 2013. Vol. 5, no. 12, pp. 975-988.
[7] Higham D., Kloeden P. An introduction to the numerical simulation of stochastic differential equations. – SIAM, 2021.
[8] Bullard E.C. The stability of a homopolar dynamo // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophycal Society. 1955. Vol. 51, no. 4, pp. 744-760.
[9] Moffat H.K. Magnetic field generation in electrically conducting fluids. – Cambridge, 1978.
[10] Bourgoin M., Volk R., Plihon N., Augier P., Odier P., Pinton J.-F. An experimental Bullard-von Karman dynamo // New J. Phys. 2006. Vol. 8, pp. 329-1-14.
[11] Leprovost N., Dubrulle B., Plunian F. Instability of the homopolar disk-dynamo in presence of white noise // arXiv:nlin/0506050v1.
[12] Potapov A.A., Gulyaev Yu.V., Nikitov S.A., Pakhomov A.A. and German V.A. The Modern Methods of Image Processing / ed. A.A.Potapov – FIZMATLIT, 2008 [in Russian].

Теплофизические свойства пьезокерамик $Na_{1-x}NbO_{3-x/2}$

Гаджиев Г.Г.[1], Магомедов М.-Р.М.[1,2], Амирова А.А.[1]
[1] *Институт физики им. Х.И. Амирханова – обособленное подразделение ФГБУН ДФИЦ РАН, Россия, Махачкала*
e-mail: Gadjiev@mail.ru
[2] *Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Дагестанский государственный медицинский Университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации, Россия, Махачкала*

Большинство сегнето-пезоэлектрических материалов серийно освоенных в мире составляют многокомпонентные системы свинцовосодержащих сложных оксидов на основе цирконата-титанат свинца (ЦТС), где содержание свинца составляло более 60%.

Однако из-за их токсичность в процессе синтеза, технологического производства международная организация запретила их производство. В НИИ физики Южного Федерального университета (Ростов-на-Дону) в последнее время ведутся поиск и получение бессвинцовых пьезо-сегнетокерамик на основе ниобатов щелочных металлов, которые не уступают керамикам системы ЦТС.

В данной работе представлены экспериментальные данные теплофизических свойств ниобатов натрия $Na_{1-x}NbO_{3-x/2}$, (где x:0; 0,04; 0,08; 0,12; 0,20) от 300 до 800К.

Плотность образцов измерялась методом гидростатического взвешивания составов $Na_{1-x}NbO_{3-x/2}$

x	0	0,04	0,08	0,12	0,20
$\rho_{экс}$	5,46	5,94	4,94	5,93	6,08
$\rho_{отн}$	80%	89%	75%	92%	98%

После обработки образцов (шлифовка, полировка, нанесение контактов) производился отжиг при 850°C в воздухе и заново измерялась их плотность, которая совпадала с данными НИИ физики ЮФУ.

Данные по теплопроводности измерялись абсолютным компенсационным методом и Flech методом

$$\lambda = KC_p\rho, \quad (1)$$

где К – температуропроводность, C_p – теплоемкость, ρ - плотность.

В таблице 1 представлены данные по К и C_p составов с x = 0; 0,04; 0,20.

Таблица 1

Температурная зависимость теплоемкости и температуропроводности ниобатов натрия $Na_{1-x}NbO_{3-x/2}$

T, K	x=0		x=0.04		x=0.20	
	C_p, Дж/кг·К	$K \cdot 10^6$ $м^2/с$	C_p, Дж/кг·К	$K \cdot 10^6$ $м^2/с$	C_p, Дж/кг·К	$K \cdot 10^6$ $м^2/с$
340	553	0.975	540	0.937	528	0.904
380	575	0.98	568	0.943	543	0.908
400	585	0.986	578	0.945	549	0.919
440	602	0.992	593	0.947	558	0.932
480	620	1	607	0.951	568	0.952
500	630	1.011	616	0.960	573	0.958
520	638	1.020	623	0.967	576	0.974
540	647	1.029	630	0.978	579	0.989
560	652	1.044	637	0.989	581	1.009
580	658	1.055	643	1	583	1.025
600	665	1.074	646	1.020	584	1.050
610	669	1.086	648	1.046	585	1.066
620	672	1.095	651	1.056	586	1.080
630	675	1.128	654	1.083	588	1.095
640	683	1.157	659	1.090	608	1.077
650	702	1.166	672	1.095	599	1.109
660	716	1.173	682	1.108	594	1.137
670	698	1.179	678	1.118	589	1.196
680	680	1.187	673	1.171	585	1.235
700	684	1.195	667	1.194	580	1.264
720	693	1.2	660	1.2	585	1.276
740	702	1.22	665	1.22	588	1.287
760	707	1.226	669	1.228	593	1.293
780	710	1.23	673	1.237	597	1.301
800	713	1.236	677	1.246	600	1.318

Теплопроводность всех составов с температурой растет, как в неупорядоченных твердых растворах и стеклообразных полупроводниках, где теплоперенос осуществляется активационным процессом переброса фононов в области температуры Кюри. Для оценки экспериментальных данных мы использовали известную формулу Дебая:

$$\lambda = \frac{1}{3} C_p \cdot \rho \cdot \upsilon \cdot L \quad , \qquad (2)$$

где ρ - плотность, υ - средняя скорость распространения звука (фононов), l - длина свободного пробега фононов, которая оценивается по скоростям распространения продольных и поперечных волн по эхо-импульсивному методу.

Для оценки длины свободного пробега L по соотношению формул (1) и (2) 3L=3K использована формула:

$$L = \frac{3K}{\upsilon} \quad , \qquad (3)$$

где *K* – температуропроводность, υ - средняя скорость распространения звука (фононов).

На рисунке 1 представлена температурная зависимость L составов x= 0; 0,04 и 0,20. Температурный ход λ и L идентичны и ее величина уменьшается от x=0 до 0,20, что связано с влиянием на тепловое сопротивление изменением масс (дефект масс) и упругих параметров решетки подобно в полупроводниковых твердых растворах.

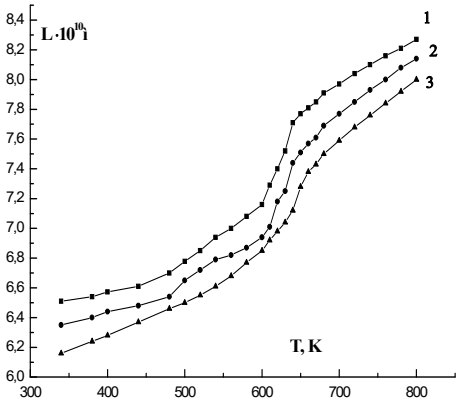


Рис. 1 Температурная зависимость длины свободного пробега $Na_{1-x}NbO_{3-x/2}$: 1) x=0; 2) x=0,04; 3) x=0,20.

Так как исследованные керамики имели различную пористость (плотность) мы оценили λ(T) с пористостью 10% для разных температур (рисунок 2). По оценкам зависимости теплопроводности керамических материалов (карбид кремния, нитрит алюминия, оксид цинка) нами были предложены формулы расчета λ от пористости от P=2,5 до 20%.

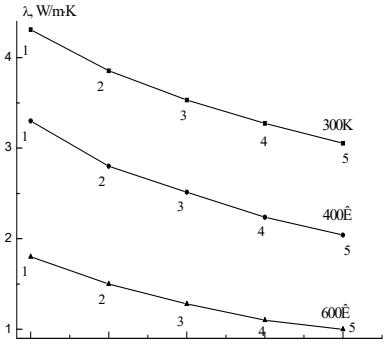


Рис.2 Изотермы теплопроводности $Na_{1-x}NbO_{3-x/2}$ с пористостью 10%..

Зависимость λ от пористости удовлетворительно согласована с расчетными по формуле:

$$\lambda(P) = \lambda_o (1-P)(1-P)^{8/3} \tag{4}$$

и

$$\lambda(P) = \lambda_o \exp(-bP) \tag{5}$$

где λ_0 теплопроводность беспористой керамики, P – пористость в процентах, b=4,0.

На рисунке 2 представлены изотермы теплопроводности для составов x=0; 0,04; 0,08; 0,12; 0,20. Как видно из рисунков от x=0 до x=0,20 λ уменьшается как в полупроводниках твердых растворов.

Теплоемкость всех составов от 320К до 600К растет и экспериментальные данные удовлетворительно согласуются с расчетными как:

$$C_p(T) = a + bT - cT^{-2}, \tag{6}$$

где *a, b* и *c* – постоянные.

В области от 610 до 652К наблюдается интенсивный рост C_p с максимумами 645-652К (рисунок 3), далее идет резкое уменьшение в диапазоне 10 градусов. Рост в этой области, с максимумами при температурах Кюри, связан с постепенными переходами от тетрагональной к псевдокубической структуре. Выше $T_к$ в областях 10-15 градусов уменьшение C_p, связанное с переходами от псевдокубической к кубической структуре, далее их незначительный рост до 800К.

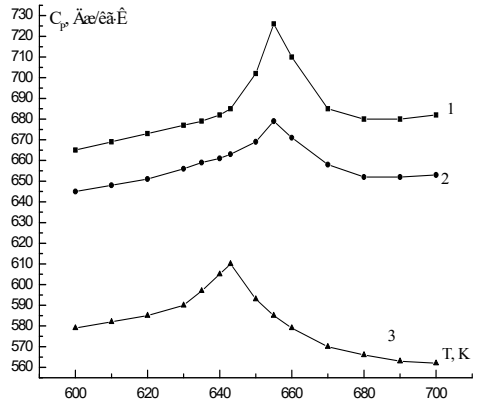


Рис.3 Температурная зависимость теплоемкости в области фазовых переходов $Na_{1-x}NbO_{3-x/2}$: 1) x=0; 2) x=0,04; 3) x=0,20.

На рисунке 4 представлена температурная зависимость коэффициента теплового расширения – КТР составов x=0; 0,04; 0,20. До температуры Кюри КТР растет почти линейно, при $T_к$ резкое уменьшение с минимумами. Это связано со сжатием первокситной ячейки при переходе к псевдокубической фазе, далее интенсивный рост при переходе к кубической структуре.

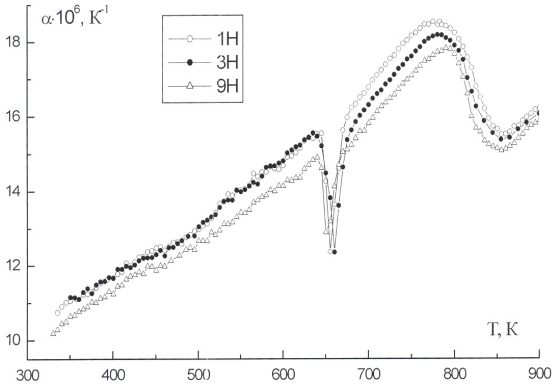


Рис.4 Температурная зависимость КТР $Na_{1-x}NbO_{3-x/2}$ составов x=0; 0,04; 0,20

Наблюдается четкая корреляция состав-структура, диэлектрические и теплофизические свойства, особенно в области температур Кюри с отклонением на 3-5 градусов для всех составов.

[1] О.Ю.Кравченко, Г.Г.Гаджиев, З.М.Омаров, Л.А.Резниченко, Х.Х.Абдуллаев, О.Н.Разумовская, Л.А.Шилкина, В.Д.Комаров, И.А.Вербенко, Неорганические материалы 47 (6), 758 (2011).
[2] О.Ю.Кравченко, Л.А.Резниченко, Г.Г.Гаджиев, Неорганические материалы **44 (10)**, 1265 (2008).
[3] Malič B., Koruza J., Hreščak J., Wang K., Fisher J., Benčan A. Materials. 8 (12), 8117 (2015).
[4] J. Zhang et al. J. Am. Ceram. Soc. 98 (3), 990 (2015).

Экспериментальное исследование комплекса теплофизических свойств н-гептана, содержащего 0.382 мольных долей воды

Н.В. Ибавов, В.А. Мирская, Д.А. Назаревич
Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
e-mail: nabi79@mail.ru

Изохорная теплоемкость системы н-гептан – вода [$xH_2O + (1-x)C_7H_{16}$] экспериментально исследована методом высокотемпературного адиабатного калориметра Х.И. Амирханова. Экспериментальная установка и используемая методика подробно описано в работе [1].

Методика и автоматизированная установка дает возможность фиксировать температуры фазовых переходов (Ts, Ps) по скачкам на температурной зависимости изохорной теплоемкости Рис.1. Непрерывная запись давления и температуры в калориметре во время эксперимента по измерению изохорной теплоемкости, дает возможность воспроизводить зависимости производных давления $(\partial P/\partial T)\rho$, которые так же с хорошей точностью позволяют определять параметры фазовых переходов Рис.2. Анализ экспериментальных результатов показал, что эти два способа находятся в хорошем согласии.

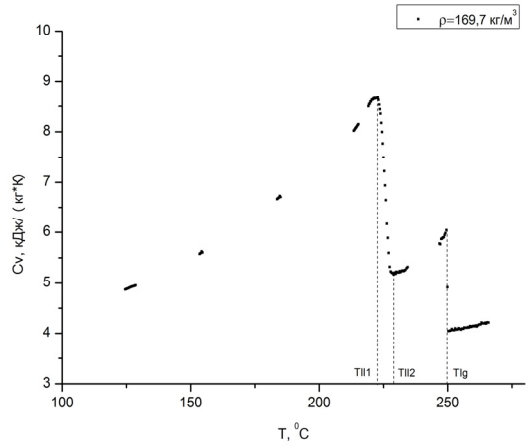


Рис.1 Зависимость теплоемкости от температуры системы н-гептан – вода для состава 0.382 мол. долей H_2O

Настоящая работа являются продолжением экспериментального исследования ранее изученной нами системы н-гептан-вода, составов x=0.0532 м.д., x=0.147 м.д. и x=0.295 м.д. x=0.355 м.д. воды, в сторону увеличения концентрации воды в смеси.

В данной работе на основе эксперимента по измерению изохорной теплоемкости и давления исследована система [$xH_2O+(1-x)C_7H_{16}$], для x=0.382 м.д. воды, по 6 изохорам в диапазоне плотностей 169.7 кг/м^3 ÷ 399.7 кг/м^3 и температур 120 ÷ 280 ^{0}C.

Измерения начинали из области трехфазного равновесия жидкость-жидкость-пар в направлении повышения температуры. На температурной зависимости теплоемкости на изохорах системы н-гептан – вода

обнаружены два скачка теплоемкости Рис.1, которые соответствуют фазовым переходам жидкость-пар (LG) и жидкость-жидкость (LL).

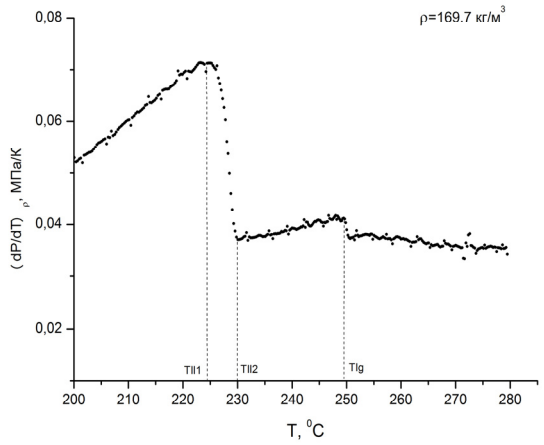


Рис.2 Зависимость (∂P/∂T)ρ от температуры системы н-гептан – вода для состава 0.382 мол. долей H_2O

На температурной зависимости производной (∂P/∂T)ρ наблюдается два скачка Рис.2, которые также соответствуют фазовым переходам LL и LG. Величины скачков и их очередность зависит от плотности залитой в калориметр смеси.

По определенным таким образом параметрам фазовых переходов, построены кривые фазового равновесия жидкость-жидкость и жидкость-пар Рис.3.

Используя свойства максимума теплоемкости и обнуления скачка производной (∂P/∂T)ρ в переходе LG на критической изохоре [1], определены критические параметры (T_c= 248.72 ^{0}C, P_c=5.63 МПа) системы [xH_2O+(1-x)C_7H_{16}], для x=0.382 м.д. воды.

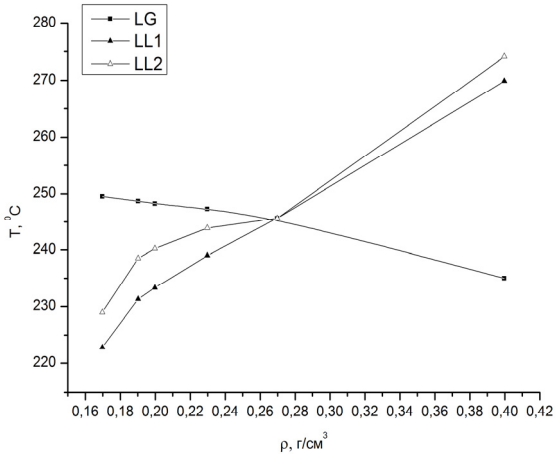


Рис.3 Кривые фазового равновесия жидкость-пар (LG) и жидкость-жидкость (LL) системы н-гептан – вода для состава 0.382 мол. долей H_2O

Результаты эксперимента показывают, что добавление примеси воды в н-алкан, приводит к снижению температуры фазового перехода. Кривая фазового равновесия жидкость-пар, смещается относительно вершины кривой жидкость-пар н-гептана, в сторону более низких температур. Добавление x=0.382 м.д. воды в систему н-гептана-вода, приводит к снижению критической температуры и росту критического давления н-гептана.

[1] Мирская В.А., Ибавов Н.В., Назаревич Д. А. Фазовые равновесия и критические свойства системы [xH_2O+(1-x)C_7H_{16}], x=0.355 мол.долей. ТВТ, 2021, Т. 59, № 2, С. 178-182.

Обогащение твердого раствора двухфазного сплава при кручении под высоким давлением

Ю.Д.Заворотнев [1], Л.С.Метлов [1], Е.Ю.Томашевская [2]
[1] *Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина, Донецк, Украина*
e-mail: zavorotnev.yurii@mail.ru
[2] *Донецкий национальный университет экономики и торговли им. М. Туган-Барановского, Донецк, Украина*

Изучение эффектов, возникающих при наложении интенсивной деформации кручения (ИДКР) за пределами области упругости представляет значительный интерес, поскольку можно ожидать появление эффектов, которые невозможны в упругой области. Поведение вещества в области пластичности предсказать теоретически практически невозможно. Поэтому приходится опираться на экспериментальный данные. В частности, в работе [1] исследовалось поведение в таких условиях бинарных сплавов замещения *Cu-Ag* и *Cu-Sn*. Наложение ИДКР осуществлялось таким образом, что не допускалось разрушение образца. Это позволило в значительной степени выйти за пределы области упругости. Было обнаружено, что изменения решеточного параметра и процентное содержание *Ag* (*Sn*) при наложении ИДКР зависит от температуры отжига $T_{\text{отж}}$. При низких температурах наблюдается значительное увеличение значения параметра решетки и наблюдается тенденция к уменьшению этого изменения с ростом $T_{\text{отж}}$. Однако, если $T_{\text{отж}}$ выше некоторой критической, имеет место уменьшение величины параметра. Аналогичным образом при наложении ИДКР ведет и процентное содержание *Ag* (*Sn*) в сплаве. При этом, как утверждается в [1], независимо от температуры отжига после наложения ИДКР процентное содержание серебра остается постоянным. Этот вывод требует дополнительного обоснования, т.к. точность эксперимента, на наш взгляд, не позволяет сделать такое однозначное заключение. В настоящей работе предпринята попытка качественного теоретического обоснования этих эффектов, поскольку в указанной статье такой анализ не проводился.

При теоретическом рассмотрении эффекта использовалась модель виртуального кристалла. В неравновесном термодинамическом потенциале учитывались взаимодействие ПП с искажениями решетки и неоднородность ПП

$$\Phi = \frac{-\alpha_1}{2}q^2 + \frac{\alpha_2}{4}q^4 + \frac{\alpha_3}{6}q^6 + \beta_1\varphi + \frac{\beta_2}{2}\varphi^2 + \frac{\beta_3}{3}\varphi^3 + \\ + \delta q^2\varphi + \gamma_1 M^s\left(q_x\frac{\partial q_y}{\partial z} - q_y\frac{\partial q_x}{\partial z}\right) + \gamma_2 M^r\left[\left(\frac{\partial q_x}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial q_y}{\partial z}\right)^2\right] \qquad (1)$$

где $\alpha_i, \beta_i\ (i = 1...3), \gamma_1, \gamma_2, \delta$ - феноменологические параметры, M - момент кручения, ось которого направлена по пси OZ, φ - плотность дефектов,

q_x, q_y, q_z - компоненты векторного ПП, слагаемые с производными описывают неоднородности структуры. Поскольку в области пластичности величина момента не зависит от числа оборотов, то будем считать, что величина момента в эксперименте работы [1] не зависит от числа оборотов.

Система уравнений Эйлера для потенциала (1) имеет вид

$$\begin{cases} 2\gamma_2 M^s \dfrac{\partial^2 q_x}{\partial z^2} - 2\gamma_1 \dfrac{\partial q_y}{\partial z} + \alpha_1 q_x - \alpha_2 q_x^2 - \alpha_3 q_x^4 - 2\delta q_x \varphi = 0 \\ 2\gamma_2 M^s \dfrac{\partial^2 q_y}{\partial z^2} + 2\gamma_1 \dfrac{\partial q_x}{\partial z} + \alpha_1 q_y - \alpha_2 q_y^2 - \alpha_3 q_y^4 - 2\delta q_y \varphi = 0 \end{cases} \quad (2)$$

Решение этой системы будем искать в виде спиральной структуры

$$\begin{aligned} q_x &= q^* \cos kz \\ q_y &= q^* \sin kz \end{aligned} \quad (3)$$

В приближении постоянства модуля ПП получаем

$$-2\gamma_2 M^s k^2 - 2\gamma_1 M^r k + \alpha_1 - \alpha_2 q^2 - \alpha_3 q^4 - 2\delta\varphi = 0 \quad (4)$$

Поскольку процесс равновесный, то из (4) следует

$$k = -\frac{\gamma_1}{2\gamma_2} M^{r-s} \quad (5)$$

Уравнение (4) является биквадратным относительно модуля ПП. Подставляя (5) в (4) получаем квадратное уравнение относительно модуля ПП и физическое решение в виде

$$q^2 = \frac{-\alpha_2 + \sqrt{\alpha_2^2 + 4\alpha_3 \left(\alpha_1 - 2\delta_1 \varphi + \dfrac{\gamma_1^2 M^{2r-s}}{2\gamma_2} \right)}}{2\alpha_3} \quad (6)$$

При повышении температуры отжига дефектность сплава $Cu_{1-x}Ag_x$ уменьшается. Поэтому положим $\varphi = \mu / T_{отж}$, где μ - некоторый параметр. Для качественного объяснения эффекта зависимости $q(T_{отж})$ [1] степень знаменателя формулы для φ несущественна.

При $M = 0$ график зависимости $q(T_{отж})$ приведен на рис.1 сплошной линией и качественно совпадает с приведенными экспериментальными данными в [1]. При наложении ИДКР кривая $q(T_{отж})$ смещается, причем знак отклонения зависит от знака коэффициента γ_2. Из экспериментальных данных следует, что имеет место некоторая критическая температурная точка T_{kp}, в которой графики при $M = 0$ и $M \neq 0$ пересекаются. Это возможно только в случае, когда коэффициент γ_2 зависит от температуры отжига и в данной точке обращается в бесконечность, а также меняет знак при переходе через критическую точку. Следовательно, график функции $\gamma_2(T_{отж})$ должен иметь точку разрыва второго рода, т.е.

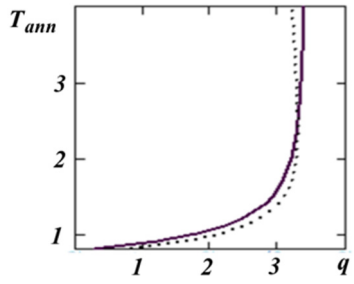


Рис.1. Зависимость $q(T_{ann})$ для сплава $Cu_{1-x}Ag_x$ до (сплошная линия) и после (пунктирная линия) кручения

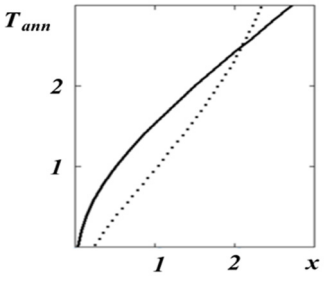


Рис.2. Зависимости $x(T_{отж})$ для сплава $Cu_{1-x}Ag_x$ при $M = 0$ - сплошная линия и $M \neq 0$ - пунктир-ная линия. Все величины в относительных единицах.

$$\gamma_2(T_{отж}) = \frac{\gamma_3}{T_{kp} - T_{отж}} \qquad (7)$$

где γ_3 – феноменологический параметр. График зависимости $q(T_{отж})$ при $M \neq 0$ приведен на рис. 1 пунктирной линией. Видно, что имеет место качественное согласие экспериментальных и теоретических результатов. От знака γ_2 зависит и знак вектора распространения k (5). Отсюда следует, что при прохождении критической температурной точки вектор распространения меняет знак и пространственное вращение спирали будет обратным.

Основываясь на полученных выше результатах рассмотрим поведение процентного содержания серебра при наложении ИДКР как функции от температуры отжига. Согласно фазовой диаграмме, приведенной в [1], при минимальной температуре отжига процентное содержание Ag равно нулю. Следовательно, в этом случае значение ПП будет соответствовать решетке Cu. При увеличении $T_{отж}$ появляется примесь Ag и величина обобщенного ПП будет меняться. Поскольку сумма относительных содержаний Cu и Ag равна единице, то зная выражение для значения обобщенного ПП как функции от ПП меди и ПП серебра можно найти зависимость процентного содержания Ag от температуры отжига. Наилучшим приближением оказалась зависимость вида

$$\frac{1}{q} = \frac{1-x}{q_1} + \frac{x}{q_2} \qquad (8)$$

где q_1, q_2 - ПП решеток Cu и Ag соответственно. На рис.2 сплошной линией приведен результат численного расчета $x(T_{отж})$ в отсутствии кручения. Эта линия – вогнута и качественно совпадает с соответствующей линией на фазовой диаграмме [1]. Пунктирной линией на рис.2 приведен результат численного расчета зависимости $x(T_{отж})$ при наложении ИДКР. Видно, что она не является прямой линией, как указано в работе [1]. Такое расхождение может быть связано либо с неверным приближением, примененным в настоящей работе, либо с недостаточной точностью экспериментальных данных.

Аналогичным образом рассмотрены поведения параметра решетки и концентрации примеси в сплаве $Cu_{1-x}Sn_x$, который имеет в точке (11%, 320^0C) тройную точку (бифуркация). Необходимо отметить, что линия

границы между фазами α и α+ε - выпукла, а между α и α+δ - вогнута, что свидетельствует о существенном различии характера взаимодействий в сплаве. В районе точки бифуркации происходит фазовый переход (ФП) 1 рода, т.е. меняется симметрия, параметры решетки и константы различного рода взаимодействий. На фазовой диаграмме такие изменения практически незаметны. Однако, наложение внешнего интенсивного деформации кручения (ИДКР) позволило увидеть этот переход. На рис.15 работы [1] видно, что на диаграмме температура-решеточный параметр при наложении ИДКР имеет место *S*-образный участок, расположенный в районе точки бифуркации. В результате рассмотрения, проведенное аналогично предыдущему случаю, оказалось, что зависимости $q(T_{отж})$ и $x(T_{отж})$ для сплава $Cu_{1-x}Sn_x$ имеют вид, представленные на рис.3 и рис.4.

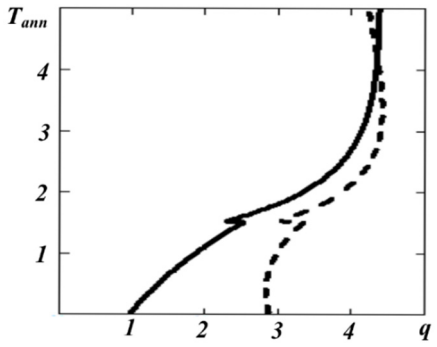


Рис.3. Зависимость $q(T_{ann})$ для сплава $Cu_{1-x}Sn_x$ до (сплошная линия) и после (пунктирная линия) кручения.

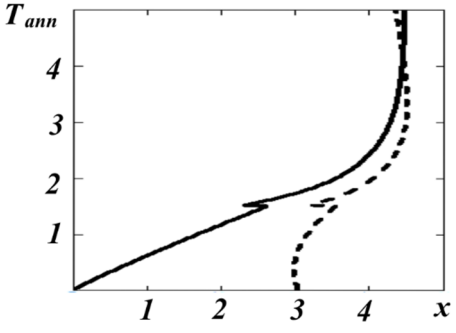


Рис.4. Зависимость $x(T_{ann})$ для сплава $Cu_{1-x}Sn_x$ до (сплошная линия) и после (пунктирная линия) кручения.

[1] B.B. Straumal, A.R. Kilmametov, B. Baretzky, O.A. Kogtenkova, P.B. Straumal, L. Litynska-Dobrzynska, R. Chulist, A. Korneva, P. Zieba. Acta Materialia, **195**, 184 (2020).

Взаимодействие ультразвука и носителей тока в сульфидах марганца RexMn1-xS (Re=Tm, Yb)

С.С.Аплеснин[1,2], О.Б.Романова[1], Ф.В.Зеленов[2], О.Б. Бегишева[2], А. М. Харьков[2], А.Н. Павлова[2]

[1] Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия

[2]Сибирский государственный университет науки и технологий им. ак. М.Ф. Решетнева, Красноярск, Россия

e-mail: apl@iph.krasn.ru

Влияние ультразвука на транспорт носителей тока и тока на затухание звука имеет фундаментальное и прикладное значение. Электромеханические свойства полупроводников с пьезоэлектрическими свойствами используются в качестве устройств обработки информации. Взаимодействие электронов проводимости с акустическим фононами зависит от интенсивности звуковой волны и обнаруживают нелинейные эффекты при меньших интенсивностях звука, чем упругая нелинейность. В работе исследуются локальные деформации структуры, критические температуры локализации электронов и дырок в твердых растворах, определяется влияние ультразвука на ток и затухание звука от внешнего электрического поля, область линейных и нелинейных акустоэлектрических эффектов.

Замещение ионов марганца ионами иттербия и туллия с переменной валентностью приводит к изменению структурных характеристик, которые проявляются при измерении коэффициента теплового расширения и в ИК спектрах [1]. Для образцов допированных тулием в системе $Tm_XMn_{1-X}S$ была установлена корреляция между температурами деформации решетки и конденсацией ИК мод [2]. Деформация решетки обусловлена локализацией электронов на дефектах решетки и заряженных центрах. Из ИК спектров установлено два электронных перехода, которые исчезают при 200 К и при 400 К соответственно.

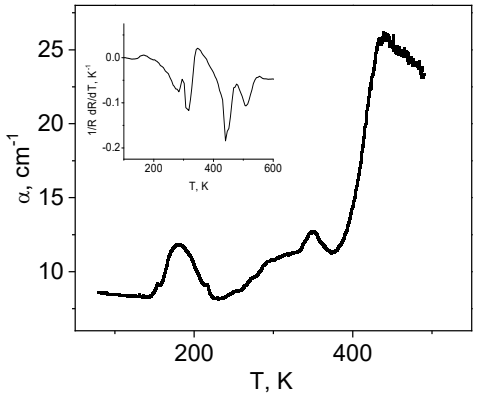


Рис. 1 Коэффициент затухания ультразвука в $Tm_{0.1}Mn_{0.9}S$ от температуры. На вставке: температурный коэффициент электросопротивления от температуры

В твердых растворах $Yb_XMn_{1-X}S$ и $Tm_XMn_{1-X}S$ обнаружена корреляция температур максимумов затухания звука и температурного коэффициента электросопротивления, которые связываются с конденсацией электронов и дырок (Рис.1).

При T<300K затухание ультразвука обусловлено деформационным и пьезоэлектрическим взаимодействием. Найдены максимумы затухания ультразвука в окрестности ромбоэдрического искажения решетки, характерного для исходного моносульфида марганца и локализации дырок. Для концентраций меньше концентрации протекания X_C=0.17 , затухание звука увеличивается при нагревании выше 300 К, и уменьшается в $Yb_{0.2}Mn_{0.8}S$ при протекании ионов иттербия по решетке. Найдено увеличение тока с ростом интенсивности звука, за исключением температуры T=200 К (Рис.2). Установлены области температур с линейной и квадратичной зависимостью затухания ультразвука от электрического поля.

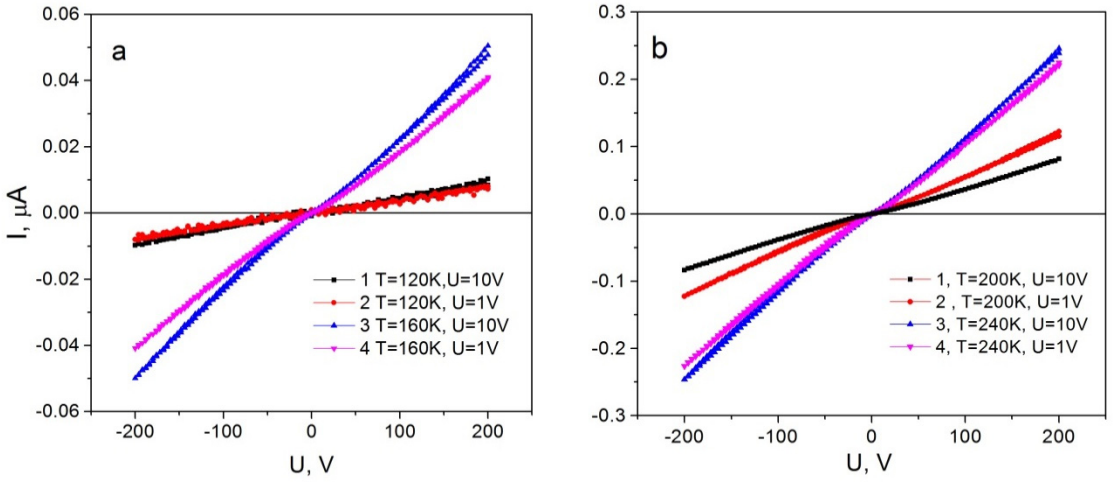


Рис.2 Вольтамперные характеристики для $Tm_{0.1}Mn_{0.9}S$ с напряжением на пьезодатчике U=1 V (1,3) , U=10 V (2,4) при температурах T=120 K (1,2), 160 K (3,4) (a), 200 K (1,2), 240 K (3,4) (b).

Определена критическая температура, связанная с изменением знака электрозвука. Так для образцов $Tm_{0.1}Mn_{0.9}S$ при T=340 К электрозвук меняет знак с положительного на отрицательный и затухание ультразвука достигает максимума. В $Yb_{0.2}Mn_{0.8}S$ электрозвук также увеличивается и при нагревании проходит через максимум при 350 К. Используя электрозвук определили относительную подвижность носителей тока, которая линейно зависит от интенсивности звука. Предложена модель локализации электронов и дырок, и конденсации локальных мод октаэдра в окрестности редкоземельного элемента.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и БРФФИ в рамках научного проекта № 20-52-00005

[1] S.S. Aplesnin, M.N. Sitnikov, A.M. Kharkov, S.O. Konovalov, A.M. Vorotinov, JMMM, **513**, 167104 (2020).
[2] О.Б. Романова, С.С. Аплеснин, Л.В. Удод, ФТТ **63**, 606 (2021).

Динамика упругой подсистемы магнитной пленки возбуждаемой амплитудно-модулированным магнитным полем в асимметричном постоянном магнитном поле

Д.А. Плешев [1,2], А.В. Робеко [1], Ф.Ф. Асадуллин [1,2],
В.С. Власов [2], В.И. Щеглов [3]

[1] Санкт-Петербургский государственный лесотехнический университет им. С. М. Кирова, Санкт-Петербург, Россия

[2] Сыктывкарский государственный университет им. Питирима Сорокина, Сыктывкар, Россия

[3] Институт радиотехники и электроники им. В.А.Котельникова Российской академии наук, Москва, Россия

Широкое применение магнитострикционных преобразователей на основе однокомпонентных и композитных тонкоплёночных ферритовых структур, привело к значительному росту внимания к материалам на основе железоиттриевого граната (ЖИГ), т.к. последние обладают высокой добротностью [1]. Использование геометрии нормально намагниченной тонкой пластины позволяет избежать параметрического возбуждения обменных волн при этом мощность возбуждаемых гиперзвуковых колебаний увеличивается более чем на два порядка [1-3].

В работе [3] показана возможность реализации детектирования амплитудно-модулированного переменного магнитного поля второго порядка, за счет поперечных колебаний упругого смещения. Однако ряд вопросов остался вне поля рассмотрения.

Настоящая работа посвящена исследованию зависимости характера колебаний упругого смещения от направления постоянного магнитного поля при возбуждении магнитной пленки переменным амплитудно-модулированным магнитным полем.

В основе задачи лежит магнитная пленка толщиной d из материала, обладающего кубической кристаллографической симметрией, имеющая магнитоупругие свойства. Задача решается в декартовой системе координат, причем оси Ox, Oy и Oz параллельны ребрам куба кристаллографической ячейки. Пленка находится во внешних постоянном и переменном магнитных полях. Постоянное магнитное поле $\boldsymbol{H}_0 = 2750$ Э ориентировано по нормали к плоскости пленки, но может отклоняться от него на 90° в плоскостях Oxz и Oyz. Возмущающее систему переменное магнитное поле $\boldsymbol{h}_0$ поляризовано в плоскости пленки вдоль оси Ox.

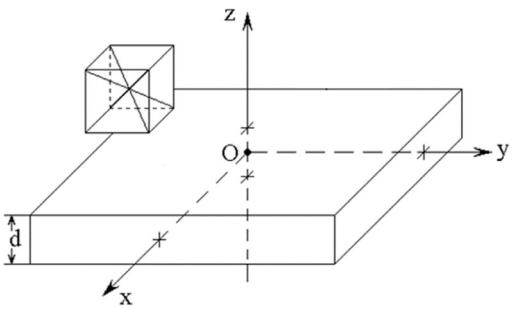


Рис. 1. Геометрия задачи

Полная плотность энергия пленки в магнитном поле $\boldsymbol{H}$ равна сумме плотностей магнитной, упругой и магнитоупругой энергий:

$$U = -M_0 h_x m_x - M_0 h_y m_y - M_0 H_0 m_z + 2\pi M_0^2 m_z^2 + \\ + 2c_{44}\left(u_{xy}^2 + u_{yz}^2 + u_{zx}^2\right) + 2B_2\left(m_x m_y m_{xy} + m_y m_z m_{yz} + m_z m_x m_{zx}\right) \quad (2)$$

Для нормированных на намагниченность насыщения M_0 компонент намагниченности $m_{x,y,z}$ имеем следующие уравнения:

$$\frac{\partial m_x}{\partial t} = -\frac{\gamma}{1+\alpha^2}\cdot\left[\left(m_y + \alpha m_x m_z\right)\cdot H_z - \left(m_z - \alpha m_y m_x\right)\cdot H_y - \alpha\cdot\left(m_y^2 + m_z^2\right)\cdot H_x\right] \quad (2)$$

где γ – гиромагнитная постоянная, α– параметр магнитного затухания, а уравнения для m_y и m_z получаются циклической перестановкой x, y, z. Компоненты упругого смещения $u_{x,y}$ определяются уравнением:

$$\frac{\partial^2 u_{x,y}}{\partial t^2} = -2\beta\frac{\partial u_{x,y}}{\partial t} + \frac{c_{44}}{\rho}\cdot\frac{\partial^2 u_{x,y}}{\partial z^2}, \quad (3)$$

Система уравнений (2-3) решалась численно методом Рунге-Кутта 7-8 порядка точности [4]. При расчете использовались параметры материала, типичные для монокристалла ЖИГ: $4\pi M_0 = 1750$ Гс, $B_2 = 6.96\cdot10^6$ эрг·см$^{-3}$, $c_{44} = 7.64\cdot10^{11}$ эрг·см$^{-3}$, $\rho = 5{,}17$ г·см$^{-3}$. При этом частота ферромагнитного резонанса (ФМР) равнялась 2800 МГц. Частота сигнала модуляции была выбрана равной 2800 МГц, что соответствовало первой моде упругого резонанса на частоте модуляции при толщине пластины $d = 6{,}865$ мкм. Амплитуда переменного поля $\boldsymbol{h}_{0x}$ составляла от 1 до 1500 Э. Глубина модуляции A_m была выбрана равной единице (стопроцентная модуляция). Параметры затухания магнитной и упругой подсистем выбирались следующими $\alpha = 0.02$ и $\beta = 2\cdot10^8$ с$^{-1}$.

На рисунке 2 показаны колебания намагниченности и упругого смещения при полностью симметричной геометрии задачи – постоянное поле $\boldsymbol{H}_0$ направлено по нормали к плоскости пластины вдоль оси Oz.

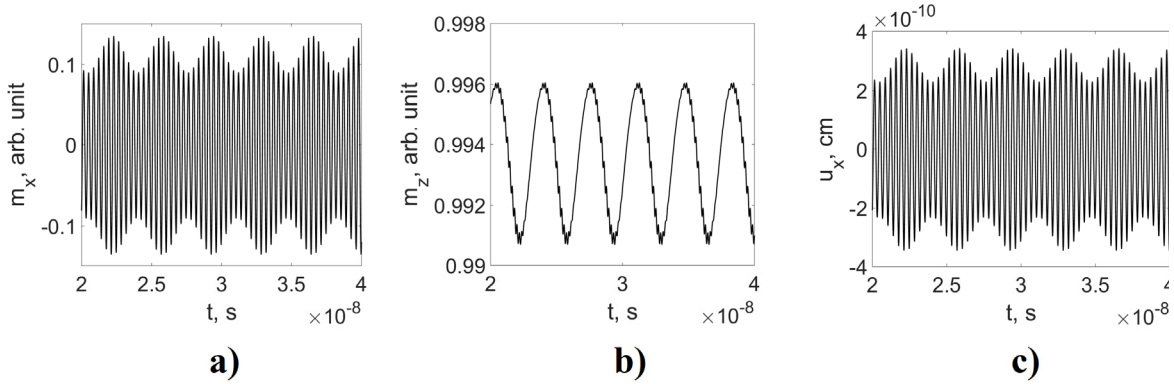


Рис. 2. Развертки во времени колебаний поперечной (a) и продольной (b) компонент намагниченности, а также поперечной компоненты упругого смещения (c) при отсутствии поперечной компоненты постоянного поля.

Рассмотрим теперь несимметричный случай, представленный на рисунке 3, когда постоянное поле отклонено от нормали к плоскости

пластины в плоскости *Oxz* на 30°, так что проекция переменной *z*-компоненты намагниченности на плоскость пластины совпадает с осью *Ox*, вдоль которой приложено переменное поле.

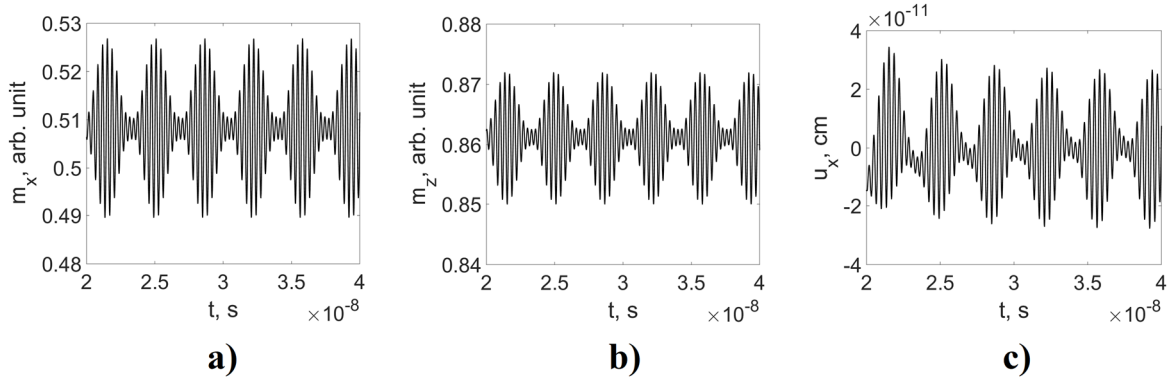


Рис. 3. Развертки во времени колебаний поперечной (a) и продольной (b) компонент намагниченности, а также поперечной компоненты упругого смещения (c) при отклонении постоянного поля $\boldsymbol{H}_0$ от нормали в плоскости Oxz на 30°.

Из рисунка 3 видно увеличение глубины модуляции колебаний компоненты намагниченности m_x и упругого смещения u_x с 30% в случае нормальной ориентации постоянного поля до 80%. Кардинально меняется характер колебаний продольной компоненты намагниченности m_z: колебания на частоте модуляции с примесью колебаний на частоте возбуждения переходят в модулированный сигнал на частоте возбуждения.

Увеличение напряженности переменного поля $\boldsymbol{h}_0$ приводит к нелинейному возбуждению динамики колебаний упругого смещения, характерному для переменных полей более 100 Э. В случае ориентации постоянного магнитного поля вдоль нормали это вызывает искажение модуляции (рис. 4a). Отклонение направления постоянного поля на 15° приводит к переходу колебаний упругого смещения от модулированных колебаний на частоте возбуждения к колебаниям на частоте модуляции с примесью колебаний на частоте возбуждения и увеличению амплитуды колебаний (рис. 4b).

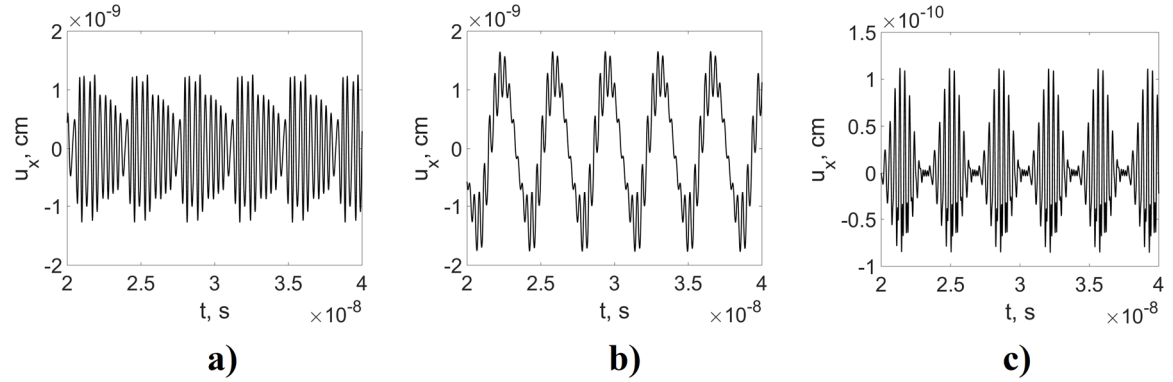


Рис. 4. Развертки во времени колебаний поперечной (a) и продольной (b) компонент намагниченности, а также поперечной компоненты упругого смещения (c) при отклонении постоянного поля $\boldsymbol{H}_0$ от нормали в плоскости Oxz на 30°.

При увеличении угла отклонения до 40°, колебания упругого смещения принимают вид модулированных колебаний на частоте возбуждения с уменьшением амплитуды колебаний до угла 90°.

Подобные эффекты могут быть реализованы только при отклонении направления поля от нормали в плоскости *Oxz*. Таким образом, продольная компонента намагниченности, содержащая существенную составляющую на частоте модуляции, складывается с воздействием поляризованного вдоль оси Ox поля, что в нелинейном режиме приводит к увеличению амплитуды упругих колебаний.

При отклонении поля в плоскостях близких *Oyz* детектирование частоты модуляции также возможно, но с низкими амплитудами – амплитуда колебаний упругого смещения меньше в пять раз.

Можно полагать, что резкие изменение амплитуд колебаний упругого смещения (рис. 4) вызвано особенностями взаимодействия компонент намагниченности m_x и m_z с компонентами упругого смещения. Однако данный вопрос требует существенной проработки и находиться вне рассмотрения данной работы, так что авторы оставляют его в качестве задачи для отдельного исследования.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №21-72-20048) и при поддержке Республики Коми и Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ и Правительства Республики Коми, № 20-42-110004, p_a).

[1] Sementsov D.I., Shuty A.M. Nonlinear regular and stochastic dynamics of magnetization in thin–film structures // Physics Uspekhi. – 2007. – vol. 50, № 8. – P. 793.

[2] Asadullin F., Pleshev D., Vlasov V., Kotov L., Poleshchikov S., Shavrov V., Shcheglov V. Hypersound excitation of magnetization and elastic displacement in case of magnetization reversal // EPJ Web of Conferences 185, 02017 (2018).

[3] Нелинейное детектирование магнитоупругих колебаний в режиме амплитудной модуляции / Власов В.С., Плешев Д.А., Шавров В.Г., Щеглов В.И. // Журнал радиоэлектроники. – 2019. – № 3. – С.1–68.

[4] D. Pleshev, V. Vlasov, F. Asadullin, L. Kotov, S. Poleshchikov, V. Shavrov, V. Shcheglov. Conditions for division and multiplication of frequencies in ferrite // EPJ Web of Conferences 185, 02004 (2018)

Особенности релаксационного процесса магнитных моментов в инварных сплавах легированных хромом

Ш.М.Алиев[1], Ж.Г.Ибаев[1,2]
[1] *Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*
e-mail: ibaev77@mail.ru
[2] *Дагестанский Государственный Университет, Махачкала, Россия*
e-mail: ibaev77@mail.ru

Инварами обычно называют сплавы с ГЦК решеткой системы Fe-Ni с содержанием Ni (25–40) ат%. Физические свойства этих сплавов отличаются рядом особенностей аномального характера. К ним относятся поведение температурных коэффициентов линейного расширения и модуля упругости, резкая зависимость намагниченности насыщения от состава, высокие значения магнитной восприимчивости паропроцесса и объемной магнитострикции [1]. Магнитная структура инварных сплавов неоднородна, в них одновременно могут существовать ферро- и антиферромагнитные компоненты [2,3]. В зависимости от состава сплава, каждая из этих компонент может присутствовать в сплаве в виде кластеров в матрице другой компоненты [3].

В данной работе изучались температурные зависимости эффекта Мёссбауэра и намагниченности инварных сплавов с примесью хрома $Ni_{31}(Fe_{69-x}Cr_x)$, x = 3,4,6 и 8 (ат. %). Цель исследований заключалось в сравнении температур магнитного упорядочения, из магнитных T_c (температура Кюри) и мёссбауэровских T_M измерений. Отметим, что легирование хромом уменьшает T_c сплава в зависимости от концентрации хрома, сохраняя при этом достаточно высокую крутизну кривой намагниченности в области T_c. Поэтому, инварные сплавы легированные хромом применяют в тепловых преобразователях энергии в качестве термомагнитных материалов с заданными значениями T_c [4, 5]. Необходимое значение T_c сплава можно получить, меняя концентрацию компонентов в сплаве [1].

Измерения намагниченности проводились в интервале температур 120-400 К на вибрационном магнитометре ВМ2-А. Мессбауэровские спектры ядер ^{57}Fe снимались на спектрометре ЯГРС-4М с источником γ-излучения $^{57}Co(Cr)$. Образцы для мессбауэровских измерений представляли собой диски диаметром 15 mm и толщиной 30 μm, вырезанные из слитков сплавов и подвергнутых шлифовке с помощью алмазной пасты. Для проведения температурных измерений образец помещался в комбинированную с криостатом температурную камеру с плавной регулировкой температур в интервале 120-400 К. Автоматическая терморегулировка обеспечивала поддержание заданной температуры с точностью ±0,5°. Температура Кюри T_c сплава определялась по температурной зависимости намагниченности, а $T_м$ по

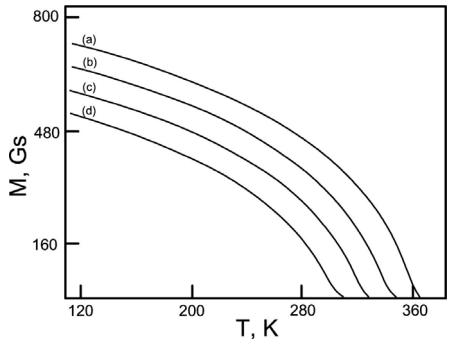


Рис.1 Температурные зависимости намагниченности насыщения сплавов $Ni_{31}(Fe_{69-x}\ Gr_x)$: (a) x = 3; (b) x = 4; (c) x = 6; (d) x = 8.

началу уширения линии поглощения парамагнитного мессбауэровского спектра.

На рис. 1 приведены температурные зависимости намагниченности насыщения сплавов $M_s(T)$, а на рис. 2 мессбауэровские спектры сплавов с x = 3 и 8. Спектры имеют вид релаксационных спектров, для которых характерно уширение линии магнитной сверхтонкой структуры (МСТС), особенно внешних [6]. Полученные значения T_c и $T_м$ приведены в таблице.

$Ni_{31}(Fe_{69-x}Cr_x)$				
x ат. %.	3	4	6	8
T_c, K	363	344	323	302
$T_м$, K	363	344	290	255

Видно, что для сплавов с x = 6 и 8 наблюдается разница в значениях T_c и $T_м$, причем $T_м < T_c$. Отметим, что мессбауэровская спектроскопия успешно применяется для исследования структурных и магнитных свойств магнитных материалов, содержащих частицы или кластеры нанометрового размера [7, 8, 9]. Экспериментально было показано, что в инварных сплавах исследуемых составов, антиферромагнитная компонента может присутствовать в виде кластеров в ферромагнитной матрице [2, 3]. В таких сплавах температура Кюри T_c ферромагнитной компоненты значительно превышает температуру Нееля T_N антиферромагнитной компоненты [3]. В тоже время, из-за присутствия обменного взаимодействия между обеими компонентами, антиферромагнитная компонента не переходит в парамагнитное состояние вплоть до T_c ферромагнитной компоненты [3]. В результате объем ферромагнитной матрицы сплава становится ближе по своей природе к системе суперпарамагнитных кластеров [3]. Об этом свидетельствуют релаксационные формы мессбауэровских спектров (рис. 2). Учитывая эти особенности магнитной структуры, в области T_c и объем ферромагнитной матрицы сплава можно представить как систему суперпарамагнитных кластеров, магнитные моменты которых

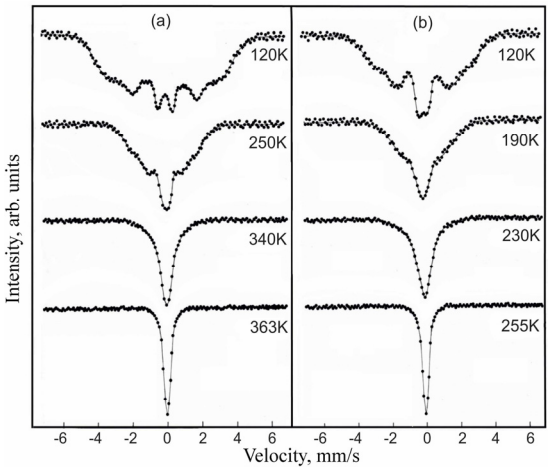


Рис.2 Мессбауэровские спектры сплавов $Ni_{31}(Fe_{69-x}\ Gr_x)$ при различных температурах: (a) x = 3; (b) x=8.

релаксируют между разнозаселенными энергетическими уровнями [10]. Более конкретно, релаксация между состояниями кластера с противоположными направлениями магнитного момента происходит как процесс перехода между разными значениями уровня энергии. В этом случае, во временном интервале релаксационного процесса магнитного момента кластера между противоположными направлениями, одно из направлений преобладает над обратным.

Условием наблюдения МСТС в экспериментах по эффекту Мессбауэра является соотношение [6]:

$$\omega_L \tau_s \geq 1, \qquad (1)$$

где ω_L – частота ларморовской прецессии ядерных спинов в эффективном магнитном поле H_e на ядре, τ_s – время релаксации электронных спинов, создающих это поле, т.е. характерное время флуктуации эффективного поля на ядре.

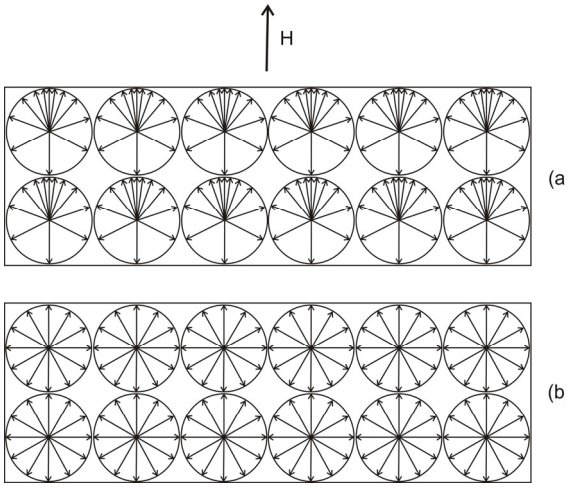


Рис.3 Релаксационный процесс магнитных моментов в системе суперпарамагнитных кластеров с разнозаселенными энергетическими уровнями: (a) при $T < T_c$; (b) при $T = T_c$.

Очевидно, для сплавов с x = 6 и 8 при $T \geq T_м$ условие (1) не выполняется, т.е. вблизи T_c $\omega_L \tau_s < 1$. С учетом разнозаселенности энергетических уровней, при намагничивании системы суперпарамагнитных кластеров (рис. 3a), во временном интервале релаксационного процесса магнитных моментов, направление намагничивающего поля H будет преобладать над обратным. В такой системе естественно будет фиксироваться магнитоупорядоченное состояние как коллективное явление (рис. 3a), независимо от времени релаксации магнитных моментов. Но, если в релаксационном процессе магнитных моментов кластеров соотношение (1) не выполняется, то мессбауэровские спектры не будут фиксировать МСТС ядер ^{57}Fe в такой системе, т.е. в этом случае ядерный спин не будет успевать прецессировать относительно направления эффективного магнитного поля, создаваемого в области ядра электронным спином. При $T = T_c$ временной интервал релаксационного процесса магнитных моментов кластеров между противоположными направлениями выравнивается (рис. 3b), и система переходит в парамагнитное состояние.

Таким образом, при приближении к температуре Кюри T_c магнитную структуру инварных сплавов легированных хромом, можно представить как

систему суперпарамагнитных кластеров, магнитные моменты которых релаксируют между разнозаселенными энергетическими уровнями. Отсутствие МСТС ядер ^{57}Fe в магнитоупорядоченной области температур можно объяснить повышенной частотой релаксации магнитных моментов кластеров между этими уровнями.

[1] А.И. Захаров, Физика прецизионных сплавов с особыми тепловыми свойствами, Металлургия, Москва, (1986).
[2] В.И. Гоманьков, Е.В. Козис, Б.Н. Мохов, ЖЭТФ **70,** 327 (1976).
[3] В.Е. Роде, ЖЭТФ **75**, 780 (1978).
[4] Ш.М. Алиев "Магнитно-тепловой двигатель" Патент на изобретение №2006675, приоритет от 28.02.1991.
[5] Ш.М. Алиев, И.К. Камилов, М.Ш. Алиев, Доклады Академии наук **424**,. 329 (2009).
[6] F. Van der Woude, A. J. Dekker, Phys. Stat. Sol. **9**, 775 (1965).
[7] М.А. Чуев, Письма в ЖЭТФ **98**, 523 (2013).
[8] М.А. Чуев, Письма в ЖЭТФ **99**, 319 (2014).
[9] М.Ш. Алиев, Ж.Г. Ибаев, М.Ш. Алиев, Письма в ЖТФ **45**, 47 (2019).
[10] М.М. Афанасьев, М.А. Чуев, Письма в ЖЭТФ 74, **112** (2001).

Влияние наночастиц на изменение плотности метилбутилкетона при различных температурах и давлениях

Сафаров М.М.[1], Зарипова М.А. [1], Шарипов С.М. [2], Умарзода Шарифмурод У. [1], Тимеркаев Б.А. [3]

[1]Таджикский технический университет имени акад. М.С.Осими, Душанбе, Таджикистан

[2]Бохтарский государственный университет имени Носири Хусрава, Душанбе, Таджикистан

[3]Казанский авиационный университет имени А.Н.Туполева, КАИ, Казань, Россия

Аннотация. В тезисы докладов приводится результаты экспериментальное исследование плотности системы (сажа+70%ОУНТ) в интервале температуры (293-473)К в жидком фазе и давлении (0.101-29.43)МПа. Для исследование плотности растворов нами использованы метод гидростатического взвешивание (установки профессора К.Д. Гусейнова). Данная установка было протестирована с использованием чистого толуола, ксилола и воздуха. Результаты проведение контрольных измерения показало, что в переделе погрешности измерения плотности, результаты контрольных измерения совпадают с литературными данными. Общая относительная погрешность измерения плотности при доверительной вероятности 0,95 равны 0,1%.

На основе экспериментальных данных и закон термодинамического подобия для расчета плотности исследуемых растворов системы (метилбутилкетона+сажа+70%ОУНТ) получен эмпирические уравнения и уравнение состояния, с помощью которого можно рассчитать плотности исследуемых растворов при различных температурах и атмосферном давлении в переделе погрешности опытных данных. Экспериментальные данные по плотности дает возможность рассчитать калорические свойства исследуемых растворов, кроме того коэффициент объемного расширения объектов.

Ключевые слова. метилбутилкетон, плотность, температура, сажа, углеродный нанотрубок, метод гидростатического взвешивания, растворитель, метод индуктивно-связанной плазма.

Введение.

Исследование плотности технически важных композиционных материалов (и их растворов) в жидком фазе в широком интервале температур (293-473)К и давления (0,101-29,43) МПа имеет большое научное и прикладное значение.

Систематические исследования физико-химические свойствах (плотность) дают полезные сведения о природе материалов, позволяют определить практическое их использование, а также служат основой для дальнейшего развития физики жидкостей и растворов. Знание плотности

особенно важно при конструировании промышленных тепловых установок самых разнообразных типов, а также для расчета калорические и термодинамические характеристики исследуемых растворов.

Плотность метилбутилкетона в настоящее время изучены достаточно хорошо [1,2]. Но сведения по плотности с различными добавками углеродных нанотрубок и сажи, а также их механических смесях в литературе практически отсутствуют. Хотя они необходимы для определения возможности их применения в высокотемпературных конструкциях, для расчета и управления термохимическими режимами, оценки их термостойкости и т.д. Надо отметить, что в последнее время, широко рассматривается в энергетическом промышленности в частности солнечной энергетики используются различные модифицированные теплоносители и др. в частности которые будут посвящены наши исследование (т.е. жидкий метилбутилкетона с добавкой сажи и 70% углеродный нанотрубок) измерению плотности имеет необходимость данной направление при различных температурах.

Экспериментальная часть.

Для измерения плотности жидкостей, растворов, электролитов и паров органических жидкостей используют обычно денсиметрическим методом, методом пьезометра и методом гидростатического взвешивание и др. В этой области науки разработали, создали ученные ближнего и дальнего зарубежья, в прошлом столетие уникальные установки, как Ридель, Голубев И.Ф., Гусейнов К.Д., Ахундов Т.С., и др. [1,2].

Эксперимент и обсуждение полученных результатов.

На экспериментальное установке, разработанным профессорами Гусейновым К.Д. и Голубевым И.Ф. нами было исследована плотность х.ч. метилбутилкетона и на его основы наножидкостей системы (жидкий метилбутилкетон и смеси нанопорошков сажи+70% ОУНТ). В работе приведены результаты по синтезу нанотрубок в электродуговой плазме. Диаметры этих нанотрубок порядка 120-150нм, а длина порядка нескольких микрометров.

Отдельные нанотрубки могут достигать до 1 мм. Как показали электронно микроскопические исследования, нанотрубки являются «матрешкой»: они нанизаны на углеродную нанотрубку. Первоначально формируется ломаная углеродная нанотрубка диаметром порядка 30 нм, а затем на него нарастает нанотрубка оксида цинка. Причем, между этими нанотрубками не проглядывается контакта [3].

В аддитивном производстве предъявляются определённые требования к качеству используемого сырья. Так, металлические порошки должны иметь определённый фракционный состав, форму и структуру частиц. Большие возможности имеет способ синтеза и обработки частиц в индуктивно-связанной плазме (ИСП). В этом случае могут быть получены

частицы идеально сферической формы необходимого размера, а также композитные частицы типа «ядро –оболочка». Однако необходимо задать определённые параметры обработки (скорости потоков, температуры, массовый расход порошкового сырья). Один из путей определения оптимальной технологии является математическое моделирование.

В работах [3-4] рассматривается подход описания с помощью математической модели процессов испарения и конденсации паров металлических частиц при их обработке в ИСП. Наночастицы которые было добавленным в метилбутилкетоне получена профессором, член -корр. АН Республики Татарстан Тимеркаевым Б.А. и его школой. Результаты исследование плотности растворов приведены в таблице.

Таблица -Расчетно-экспериментальные значение плотности (ρ,кг/м^3) тернарных растворов на основе химического чистого метилбутилкетона при различных температурах при атмосферном давлении.

Т,К	Обр.№1	Обр.№2	Обр.№3	Обр.№4	Обр.№5
273	982,5	991,5	1010,5	1023,0	1050,2
283	964,6	975,5	988,4	1006,3	1025,3
293	951,4	965,5	975,5	990,3	1010,1
303	941,5	963,8	965,3	978,4	996,5
313	937,5	947,3	960,2	974,0	988,0
323	925,2	938,4	950,5	962,1	982,4
333	922,5	935,1	945,0	959,3	980,0
343	921,3	931,8	943,8	958,2	970,6
353	917,5	927,5	940,0	957,1	968,2
363	917,0	925,1	937,5	952.0	969,0
373	910,0	922,4	935,6	947,3	967,3
383	908,8	921,3	926,0	948,0	962,4
393	906,3	915,3	922,4	943,8	960,0
413	902,5	913,0	918,5	938,7	956,7

Примечание.Обр.№1-100%метилбутилкетон (х.ч); Обр. №2-(метилбутилкетон (х.ч)+ (25% сажа+75%ОУНТ);Обр.№3-(метилбутилкетон (х.ч)+(25%сажа+75%ОУНТ)); Обр. № 4-(метилбутилкетон (х.ч)+(25%сажа+75%ОУНТ));Обр.№5-метилбутилкетон (х.ч)+ (25%сажа+ 75%ОУНТ)).

Результаты, приведенные в таблице, показало, что плотность исследуемых растворов с повышением температуры падает на основе закона прямой линии, а с увеличением концентрации двухкомпонентных сажа и ОУНТ уменьшается по гиперболическому закону повышение давления, приводит к росту плотности коллоидных растворов. На основе данных по плотности и закона термодинамического подобия нами получен аппроксимационные зависимостей, которые дает возможность рассчитать плотности трехкомпонентного раствора на основе жидкого метилбутилкетона. Результаты расчета и эксперимент в пределе погрешности опыта 0,5% совпадают с экспериментальными данными.

[1] Стормс, Э. Тугоплавкие карбиды./Э.Стромс//М.:Атомиздат,1970.-233с
[2] Абдулазизов, Т.А. О фазовом составе продуктов совместного электроискрового диспергирования титана со сплавом V-M в гептане. /Т.А. Абдулазизов, А.С. Сатыволдыев, А.С.Маметова.//Материалы 4 Между-народной научной конференции: “Вопросы физической и координацион-ной химий”, посвященной памяти докторов химических наук, профессоров Якубова Х.М. и Юсуфова З.Н. Душанбе,2019.С.41-45.
[3] Тимеркаев Б.А., Шамсутдинов Р.С. Влияние сверхзвукового потока газа на тлеющий разряд. 1 Всероссийская конференция с меж-дународным участием «Газоразрядная плазма и синтез наност-руктур».Казань,2020.-С.98-101.
[4] Мельников, А.С., Цивильский И.В. Моделирование фазовых переходов металлических частиц при их обработке в индуктивно-связан-ной плазме. 1 Всероссийская конференция с международным участием «Газоразрядная плазма и синтез наноструктур».Казань,2020.-С.56-60.
[5] Дульнев Г.Н.Теплопроводность смесей с взаимопроникающими компонентами // Инженерно-физический журнал. – 1970. – Т.19. - №3. – С. 562 -577.
[6] Дульнев, Г.Н., Заричняк Ю.П., Муратова Б.Л. Теплопроводность зернистых и слабо-спеченных материалов//Инженерно-физический жур-нал. – 1969. – Т.16. - №6. – С. 1019-1028.
[7] Дульнев, Г.Н., Заричняк Ю.П., Муратова Б.Л. Теплопроводность твердых пористых увлажненных материалов//Инженерно-физический журнал. – 1976. – Т.31. - №1. – С. 278-283.
[8] Дульнев, Г.Н., Новиков В.В. Эффективный коэффициент проводи-мости системы с взаимопроникающими компонентами // Инженерно-физи-ческий журнал. – 1977. – Т.32. - №2. – С. 271-274.
[9] Дульнев, Г.Н., Еремеев М.А., Заричняк Ю.П. Теплопроводность связанных систем//Инженерно-физический журнал. – 1974. – Т.25. - №1. – С. 55-62.
[10] Дульнев Г.Н., Муратова Б. Л., Трибель Т. В., Маджидов Х., Са-фаров М.М.Метод расчета теплопроводности пористой гранулированной окиси алюминия в зависимости от концентрации меди и температуры в различных средах//ИФЖ. Т. 50, №1. Деп. №4471 – 85, 1986. С.11.

Динамические процессы в каплях слобозакрученных нематических жидких кристаллах в электрическом поле

Ю.И.Тимиров, Е.Р.Басырова
Институт физики молекул и кристаллов-обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения УФИЦ РАН, Уфа, Россия
e-mail: timirov@anrb.ru

В последние годы активно изучаются жидкие кристаллы (ЖК) в топологически ограниченных трёхмерных контейнерах [1], представляющих собой капли, которые приобретают очень сложные пространственные структуры и могут управлять самосборкой иерархических материалов высокого порядка [2]. Однако в большинстве работ исследуются равновесные состояния систем, где дефекты представляют собой в основном статические структуры, но в закрученных нематических ЖК-каплях дефекты формируются благодаря комбинации топологических ограничений, деформации капель и внешнего воздействия, что создает множество динамических состояний [3]. Так в работе [4], было предсказано, что в электрических полях в каплях слабозакрученных НЖК при определенных условиях возможны периодические трансформации между биполярной и радиальной структурами. Предметом же данной работы является экспериментальное подтверждение периодических транформаций, инициируемых внешним электрическим полем на примере системы слабозакрученных НЖК микрокапель.

В качестве образца использовался закрученный НЖК на основе n-(4-метоксибезилиден)-4-бутиланилина (TCI, Япония) и холестерилхлорида (Реахим, Россия) в пропорции 99.95:0.05% весовых, с равновесным шагом спирали P=238 мкм. В качестве безразмерного параметра принято считать N=4R/P как отношение размера капли к хиральному шагу, т.е. это характеризует количество поворота директора *n* на угол *pi* на расстояние 2R (в нашем случае *N=0.6)*.

Оптические изображения структур и эффектов, возникающих в ХЖК-каплях под действием переменного электрического поля, наблюдались в поляризационно-оптическом микроскопе. Обработка экспериментальных изображений осуществлялась на языке Python с помощью алгоритмов и методов, реализованных на OpenCV. Таким образом, используя методику получения капель ХЖК из изотропного расплава, в отличие от метода исследования топологических переходов в стационарных системах распределения поля директора [4] за счет изменения граничных условий и хиральности в наборе разных капель, мы можем наблюдать эти процессы непрерывно в динамике на наборе идентичных капель во внешнем

электрическом поле. Этому способствует, также, факт слабого сцепления молекул ХЖК на границе раздела с изотропной фазой ~ 10−5 Н/м2 [6].

Начальная структура полученных капель является биполярной. Включение электрического поля приводит к трансформации биполярной структуры с двумя диаметрально противоположными дефектами (буджумами) в каплю с формированием несингулярной дисклинационной линией. С увеличением приложенного напряжения дисклинационная линия переориентируется перпендикулярно полю, а электроконвективный вихрь, сформированный внутри капли, трансформирует структуру капли между биполярной и радиальной конфигурацией. Далее рассмотрена динамика структурных изменений в каплях в зависимости от величины приложенного электрического поля. Также получены зависимости циклической частоты ω процесса трансформации радиальная – биполярная – радиальная структура капли от величины приложенного переменного электрического поля.

Таким образом, в данной работе показано, что при определенных условиях в переменном электрическом поле структура капли слабозакрученного нематического ЖК перестает быть стационарной и в ней развиваются периодические структурные переходы, предсказанные в [4]. В частности, с увеличением напряжения наблюдается непрерывный периодический переход от биполярной структуры к радиальной сферической структуре. Как и результаты работы [5], в которой наблюдаются статические переходные структуры капель, обусловленные заданными граничными условиями и закруткой шага спирали *(*для $N>=2.5$*)*, то в случае слабозакрученных НЖК ($N<2.5$) можно предположить, что внешнее электрическое поле формирует в капле несингулярную дисклинационную линию, которая при определенных значениях электрического поля инициирует периодические трансформации между биполярной и радиальной структурой

[1] M. Urbanski, C. G. Reyes, J. Noh, A. Sharma, Y. Geng, V. S. R. Jampani, & J.P. Lagerwall, J. Phys.: Cond. Matt., 29(13), 133003 (2017).
[2] X.Wang, D. Miller, E. Bukusoglu, J. J. de Pablo & N. L. Abbott, Nature Mater. 15, 106–112 (2016).
[3] О. А. Скалдин, И. И. Клебанов, Ю.И. Тимиров, Е.Р. Басырова, В. А. Делев, Письма в ЖЭТФ 107(11), 728–731 (2018).
[4] D. Sec, T. Porenta, M. Ravnik, S. Zumer, Soft Matter 8, 11982 (2012).
[5] Y. Zhou, E. Bukusoglu, J. A. Mart´ınez-Gonz´alez, M. Rahimi, T. F. Roberts, R. Zhang, X. Wang, N. L. Abbott, and J. J. de Pablo, ACS Nano 10 (7), 6484–6490 (2016).
[6] V. A. Gunyakova, A. M. Parshin and V. F. Shabanov, Eur.Phys. J. E 20, 467 (2006).

Квантовый эффект Холла в квантовых ямах InGaAs: активационная проводимость

С.В.Гудина[1], Ю.Г. Арапов[1], В.Н. Неверов[1], А.П. Савельев[1], К.В.Туруткин[1], С.М. Подгорных[1], Н. Г. Шелушинина[1], М.В. Якунин[1], И. С. Васильевский[2], А.Н. Виниченко[2]

[1] Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: svpopova@imp.uran.ru
[2] Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

В классических полупроводниковых структурах на основе AIIIBV поиск путей повышения проводимости и управления незарядовыми степенями свободы, такими как, спин, эффективная масса и процессы рассеяния носителей тока, остается актуальным как с фундаментальной точки зрения исследования свойств низкоразмерных систем, так и для технологических применений. Так, интерес к структурам InGaAs/InAlAs связан с разработкой квантовых каскадных лазеров, быстродействующих транзисторов и других элементов полупроводниковой электроники и спинорбитроники.

Возникновение плато с квантованными значениями холловского сопротивления $\rho_{xy}(B)$ при соответствующем стремлении к нулю значений продольного сопротивления ρ_{xx} связано с существованием вызванных беспорядком щелей подвижности в плотности состояний двумерной (2D) системы в сильном магнитном поле, а переходы между плато квантового эффекта Холла (КЭХ) есть квантовые фазовые переходы диэлектрик-металл. Когда уровень Ферми в режиме КЭХ оказывается в щели между соседними уровнями Ландау, наблюдается термоактивационное поведение ρ_{xx} благодаря возбуждению электронов в узкую полосу делокализованные состояний (шириной Г) вблизи середины уширенного беспорядком уровня Ландау. Использование метода термоактивационной проводимости, наряду с анализом осцилляционной картины магнитосопротивления, является эффективным методом восстановления энергетического спектра 2D электронного газа в квантующих магнитных полях и определения параметров носителей заряда [1, 2].

Исследованы две серии структур, отличающихся содержанием InAs в квантовой яме: (I) псевдоморфные PHEMT-гетероструктуры n-$In_yGa_{1-y}As$/GaAs (y=0.2) и (II) метаморфные MHEMT-гетероструктуры n-$In_yGa_{1-y}As$/$In_xAl_{1-x}As$ (x=0.82, 0.81; y=0.85, 0.90). Измерены продольное ρ_{xx} и холловское ρ_{xy} сопротивления в магнитных полях, B, до 12 Тл и температурах T от 0.3 до 35 К. Параметры носителей заряда определены из анализа осцилляций магнитосопротивления: концентрация n=(I) 2.3, (II)4.6, 6.8×10^{15} м$^{-2}$, подвижность μ=(I) 1.1, (II) 4.6, 20 м^2/В·с, эффективная масса m^*

= (I) $0.058m_0$, (II) $0.037m_0$, квантовое время жизни τ_q= (I) 2.5×10^{-12}, (II) 0.9×10^{-13} с.

Анализ термоактивационной проводимости в квантующих магнитных полях позволил оценить величину g-фактора электронов, большие значения которого могут свидетельствовать в пользу необходимости учета обменного усиления и спин-орбитального расщепления [3, 4].

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Электрон», при поддержке РФФИ и Свердловской области № 20-42-660004.

[1] S. V. Gudina, V. N. Neverov, E. G. Novik, E. V. Ilchenko, G. I. Harus, N. G. Shelushinina, S. M. Podgornykh, M. V.Yakunin, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretsky, Low temperature physics, **43**, 485 (2017).
[2] I. L. Drichko, A. A. Dmitriev, V. A. Malysh, I. Yu. Smirnov, H. von Känel, M. Kummer, D. Chrastina, G. Isella, Journal of Applied Physics **123**, 165703 (2018).
[3] С.С. Криштопенко, К.П. Калинин, В.И. Гавриленко, Ю.Г. Садофьев, M. Goiran, ФТП, **46**,1186 (2012).
[4] W. Desrat, F. Giazotto, V. Pellegrini, F. Beltram, F. Capotondi, G. Biasiol, L. Sorba, D. K. Maude, Phys. Rev. B **69**, 245324 (2004).

Квантовые ямы на основе теллурида ртути с энергетическим спектром вблизи точки инверсии зон: спин-орбитальное расщепление Рашбы

С.В.Гудина[1], В.Н. Неверов[1], М.Р. Попов[1], К.В.Туруткин[1], С.М. Подгорных[1], Н. Г. Шелушинина[1], М.В. Якунин[1], С. А. Дворецкий[2], Н. Н. Михайлов[2]

[1] Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: svpopova@imp.uran.ru
[2] Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия

Благодаря особенностям зонной структуры квантовые ямы HgTe позволяют исследователям совершать множество интригующих наблюдений. В гетероструктурах на основе HgTe и CdTe скомбинированы широкозонный (CdTe) и бесщелевой (HgTe) полупроводники, основные зоны в которых образуются состояниями симметрии Г8 и Г6. При изменении ширины, d, одиночные квантовые ямы (КЯ) HgTe между барьерами, образованными CdTe (или HgCdTe с большой запрещенной щелью), могут быть реализованы в двух существенно различных вариантах энергетической структуры [1]. Для квантовых ям малой ширины открытая щель формируется между подзоной электрон-подобных легких частиц ($E1$) симметрии Г6 и подзоной тяжелых дырок ($H1$) симметрии Г8, что соответствует нормальному (тривиальному) порядку зон. С увеличением ширины квантовой ямы подзона $E1$ опускается ниже подзоны тяжелых дырок и обретает дырочный характер, в то время как подзона $H1$ становится электронной. Такие квантовые ямы обладают инверсной зонной структурой. Кроме того, инверсия зон происходит при изменении содержания кадмия в катионной решетке HgCdTe, что также справедливо и для двумерной системы при другом значении критической ширины $d = d_c$ квантовой ямы, чем в случае КЯ из чистого HgTe, где d_c=6.3 нм.

Наличие в энергетическом спектре квантовых ям на основе теллурида трути точки инверсии зон при изменении ширины КЯ или содержания кадмия в катионной подрешетке приводит ко множеству необычных следствий. В частности, состояния s- и p- типа пересекаются при критическом значении толщины d_c без антипересечения, и энергетическая щель при $d = d_c$ исчезает. Т.е. в КЯ HgTe критической толщины образуется двумерная однодолинная бесщелевая дираковская фермионная система с зонной структурой очень похожей на структуру графена [2], но с точкой Дирака, расположенной в центре зоны Бриллюэна, без долинного вырождения. Показано [3], что инверсия зон как функция увеличения d соответствует квантовому фазовому переходу между состояниями тривиального изолятора и квантового спинового холловского изолятора (2D топологический изолятор). Таким образом, в квантовых ямах

HgTe/(CdHg)Te было продемонстрировано существование в одном материале существенно различных по топологии фаз.

Важными факторами, способствующими большой величине спин-орбитального расщепления Рашбы [4] в квантовых ямах II-VI HgTe, являются малая величина энергетической щели и инвертированный тип зонной структуры в квантовых ямах с шириной слоя больше 6 нм, когда край зоны проводимости формируется p-состояниями зоны Γ_8, а не s-состояниями зоны Γ_6, как в традиционных гетеросистемах. Типичные значения энергии расщепления Рашбы, составляют от 17 мэВ [5] до 30 мэВ [6, 7], что заметно больше, чем для узкощелевых систем III-V (3-5 мэВ) [8].

Для определения параметров спин-орбитального расщепления Рашбы в КЯ наиболее распространено исследование области квантующих магнитных полей для обнаружения и анализа биений осцилляций Шубникова-де Гааза (ШдГ). Слагаемое, ответственное за спин-орбитальное расщепление Рашбы в законе дисперсии двумерной подзоны, в низшем порядке по $k_{||}$ *(kx, ky, 0)* для зон *s*- (зона Γ_6) и *p*- типа (зона Γ_8) получено в виде [9]:

$$\varepsilon_{\Gamma 6}^{SO} = \pm\langle\alpha E_z\rangle k_{||} \text{ и } \varepsilon_{\Gamma 8}^{SO} = \pm\langle\beta E_z\rangle k_{||}^3, \quad (1)$$

где α и β - коэффициенты спин-орбитальной связи, E_z - эффективное электрическое поле в направлении *z*. Исходя из разницы концентраций носителей, Δn, в спиновых подзонах, найденной из Фурье-спектров осцилляций ШдГ, имеется возможность экспериментального определения префакторов $\langle\alpha E_z\rangle$ и $\langle\beta E_z\rangle$ в формулах (1).

Исследована серия образцов $Hg_{1-x}Cd_xTe/Cd_{1-y}Hg_yTe$ с шириной квантовой ямы 7 – 15 нм, симметрично (x=0; 0.11; y=0.78; 0.64) и асимметрично (x=0.15; 0.05; y=0.85; 0.53) легированных в барьере, с концентрацией носителей заряда $n \approx 1.3 - 4\cdot10^{12}$ см$^{-2}$. Самосогласованный расчет в приближении Хартри [10] показал, что один из асимметрично легированных образцов (15 нм) обладал инвертированной зонной структурой, тогда как другой (13 нм) – нормальным порядком зон, но в последнем электронная подзона все же содержит заметную долю волновых функций p-типа. Из Фурье-анализа осцилляций магнитосопротивления было найдено, что параметры $\langle\alpha E_z\rangle = 3.7\times 10^{-6}$ мэВ·см (13 нм) и $\langle\beta E_z\rangle = 5.0\times 10^{-19}$ мэВ·см^3 (15 нм), в асимметричных структурах, и $\langle\alpha E_z\rangle = 0.5\times 10^{-7}$ мэВ·см - в симметричных. По значению параметра спин-орбитального взаимодействия, а также из магнитополевой зависимости величины полного спинового расщепления, полученной из анализа положения узлов биений осцилляций ШдГ, определены значения спин-орбитального расщепления на уровне Ферми, которые достигают 27 мэВ для асимметрично легированных ям и 5 мэВ – для симметрично легированных, а также получены оценки значения g фактора $|g| \geq 40$. Значение спин орбитального расщепления Рашбы столь велико благодаря

сочетанию сильной структурной асимметрии квантовых ям, высокой концентрации электронов и большой доли состояний *p*- типа в нижней подзоне зоны проводимости

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, грант 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024).

[1] M. Konig, S. Wiedmann, C. Brune, A. Roth, H. Buhmann, L.W. Molenkamp, X.-L. Qi, S.-C. Zhang, Science **318**, 766 (2007).
[2] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S.Novoselov, and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
[3] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, S. C. Zhang, Science **314**, 1757 (2006).
[4] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, J. Phys. C **17**, 6039 (1984).
[5] X. C. Zhang, A. Pfeuffer-Jeschke, K. Ortner, V. Hock, H. Buhmann, C. R. Becker, G. Landwehr, Phys. Rev. B **63**, 245305 (2001).
[6] Y. S. Gui, C. R. Becker, N. Dai, J. Liu, Z. J. Qiu, E. G. Novik, M. Schäfer, X. Z. Shu, J. H. Chu, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, Phys. Rev. B 70, 115328 (2004).
[7] К. Э. Спирин, А.В. Иконников, А.А. Ластовкин. В.И. Гавриленко, С.А. Дворецкий, Н.Н. Михайлов, Письма в ЖЭТФ **92**, 65 (2010).
[8] W.Z. Zhou, T. Lin, L.Y. Shang, G. Yu, Z.M. Huang, S.L. Guo, Y.S. Gui, N. Dai, J.H. Chu, L.J. Cui, D.L. Li, H.L. Gao, Y.P. Zeng, Solid State Communications **143**, 300(2007)
[9] R. Winkler, Phys. Rev. B **62**, 4245 (2000).
[10] Л.С. Бовкун, К.В. Маремьянин, А.В. Иконников, К.Е. Спирин, В.Я. Алешкин, M.Potemski, B. Piot, M. Orlita, Н.Н.Михайлов, С.А. Дворецкий, В.И. Гавриленко, ФТП **52**, 1274 (2018).

АВТОРСКИЙ СПИСОК

A

Abdulagatov I.M. 25
Agalarov A.M. 264
Alekseeva E.S. 264
Aliev A. 25

B

Batyrova R.G. 25
Belo J.H. 229

C

Chen X.M. 23

G

Gebara P. 254

M

Medvedev S.A. 111

N

Netesova N.P. 138

P

Polikhronidi N.G. 25
Potapov A.A. 264

R

Rassadin A.E. 264

А

Абакарова Н.С. 231
Абдулагатов И.М. 27
Абдулкадирова Н.З. 254
Абдуллаев Н.А. 201
Абуев Я.К. 65
Агзамова П.А. 58
Акманова Г.Р. 98
Алибеков А.Г. 159, 197
Алигулиева Х.В. 201
Алиев А.Д. 126
Алиев А.М. 229, 252, 254
Алиев З.С. 201
Алиев Р.А. 231
Алиев Ш.М. 284
Алиева В.Б. 146
Алиханов Н.М. 248
Алыев Ю.И. 144
Амирасланов И.Р. 201
Амиров А.А. 229
Амирова А.А. 268
Аплеснин С.С. 278, 166
Арапов Ю.Г. 294
Арсланов Т.Р. 228
Асадуллин Ф.Ф. 280
Атаева Г.Я. 68
Ахметова А.А. 179
Ашурбеков Н.А. 102

Б

Бабаев А.А. 257
Бабаев А.Б. 6, 68
Бабаев М.А. 68
Бабанлы М.Б. 201
Бабушкин А.Н. 130, 159, 197
Бадиев М.К. 65
Байгутлин Д.Р. 52, 181, 185, 220
Бакмаев А.Г. 240
Бакмаев А.М. 148
Бандурина О.Н. 206
Барышникова О.В. 136
Басырова Е.Р. 292
Бегишева О.Б. 172, 278
Беленков Е.А. 37, 47
Беленков М.Е. 37, 39
Биккулова Н.Н. 88, 98
Билалов А.Р. 240, 244
Блинов М.И. 15
Боднарук А.В. 236
Больгинов В.В. 188
Бородако К.А. 213, 224
Бострем И.Г. 261
Бражник В.В. 96
Бржезинская М. 37
Бучельников В.Д. 52, 80, 84, 181, 185, 220
Бычков И.В. 152, 192, 193, 195

В

Вакилов А.Н. 96
Вальков В.И. 236
Васильевский И.С. 294
Вахитов Р.М. 179
Виниченко А.Н. 294
Власов В.В. 192
Власов В.С. 280

Волосников Д.В. 256

Г

Гаджиалиев М.М. 159
Гаджиев А.Б. 252
Гаджиев Г.Г. 268
Гаджиев Г.М. 231
Галимзянов Б.Н. 32
Галлямов Э.М. 136
Гамзатов А.Г. 228, 231, 252, 254
Гареева З.В. 23
Гельгорн А.В. 168
Глезер А.М. 216
Говор Г.А. 252
Головин И.С. 80
Головчан А.В. 232, 236
Грановский А.Б. 15
Грешняков В.А. 37, 47
Грибанов И.Ф. 232
Григорьев П.Д. 17
Гриднев С.А. 100
Грушевская Г.В. 60
Гудин С.А. 228
Гудина С.В. 294, 296

Д

Давыдейко Н.В. 236
Дворецкий С.А. 296
Дейнеко Д.В. 112, 114, 175
Джабаров С.Г. 142
Джамалудинов М.Р. 108
Довгий В.Т. 236
Доронина М.А. 32

Е

Евстафьева Ю.К. 162
Екомасов Е.Г. 72, 261
Ерагер К.Р. 220

З

Заворотнев Ю.Д. 274
Загребин М.А. 52, 80, 84, 213, 224
Залетова И.А.
Зарипова М.А. 288
Захаров Н.А. 126
Захарова Т.В. 126
Захвалинский В.С. 159, 197
Звездин А.К. 23
Зверев В.Н. 201
Зеленов Ф.В. 278
Зобов Е.М. 257

И

Ибавов Н.В. 272
Ибаев Ж.Г. 49, 284
Ибрагимова С.И. 142
Исаев И.А. 27
Исаева З.М. 102

К

Каллаев С.Н. 148, 240, 244, 248
Каракозов А.Е. 132
Каратеев И.А. 216
Карелина Л.Н. 188
Карпенков А.Ю. 217
Карцовник М.В. 17
Кауль А.Р. 231
Киселев М.Р. 126
Кишине Дж. 261
Ковалев О.Е. 232, 236
Коваль Е.М. 126
Коледов В.В. 33, 232
Коновалов С.О. 206
Коротков Л.Н. 116
Кравченко З.Ф. 236
Кретинин В.В. 206
Крылова Н.Г. 60
Кугель К.И. 8
Кузьмин Д.А. 152, 192, 193, 195
Курбангулов А.Р. 88, 98
Курбанова Д.Р. 45

Л

Лазоряк Б.И. 136
Лупицкая Ю.А. 230
Лях А.С. 11

М

Магницкая М.В. 132
Магомедов М.А. 45, 56, 64, 65, 76, 105, 107, 108, 109
Магомедов М.-Р.М. 268
Магомедова Л.К. 107
Мазагаева М.К. 56
Мамедов Н.Т. 201
Мамонова М.В. 41, 162

Маренкин С.Ф. 159, 197
Маркелова М. 231
Матвеев В.В. 126
Матюнина М.В. 52, 80, 84
Маширов А.В. 232
Мельникова Н.В. 159, 197
Метлов Л.С. 33, 274
Мирошкина О.Н. 52, 181, 185
Мирская В.А. 272
Митаров Р.Г. 148, 244, 248
Митюк В.И. 232, 252
Михайлин Н.Ю. 175
Михайлов В.И. 236
Михайлов Н.Н. 296
Мокшин А.В. 32, 92
Мосунов В.А. 136
Муртазаев А.К. 6, 45, 49, 56, 64, 65, 68, 76, 105, 108, 109
Муртазаев К.Ш. 76
Муртазаева А.А. 102, 109
Мухучев А.А. 229

Н

Назаревич Д.А. 272
Назаров В.Н. 72
Неверов В.Н. 294, 296
Никитин С.А. 217
Никитинский О.С. 168
Никифоров И.В. 112, 114

О

Овчинников А.С. 261
Омаров З.М. 244, 248
Орлов М.А. 126

П

Павлова А.Н. 278
Павлухина О.О. 52
Панкратов Н.Ю. 217
Парфеньев Р.В. 175
Печина Е.А. 216
Плешев Д.А. 280
Поволоцкий И.И. 256
Подгорных С.М. 294
Подгорных С.М. 296
Попов И.И. 100
Попов М.Р. 296
Пресняков М.Ю. 216
Прудников В.В. 11, 162
Прудников В.Н. 15
Прудников П.В. 11, 162

Р

Рабаданов К.М. 102
Рамазанов М.К. 45
Рамазанов М.К. 56, 64, 65, 76, 108, 109
Рамазашвили Р. 17
Расулов С.М. 27
Рахманов А.Л. 8
Резниченко Л.А. 240, 244, 248
Резниченко С.А. 148
Ризванова Т.Р. 109
Риль А.И. 159, 197
Робеко А.В. 280
Рожков А.В. 8
Ромазев П.Е. 230
Романова О.Б. 166, 206, 209, 278

С

Саадуева А.О. 257
Савельев А.П. 294
Садыков С.А. 248
Сайпулаева Л.А. 159, 197
Самсонов К.Ю. 72
Сафаргалиев Д.И. 88, 98
Сафаров М.М. 288
Сбойчаков А.О. 8
Севрюков О.Н. 213
Сиваченко А.П. 232
Синицын В.Е. 261
Ситников М.Н. 166, 168, 172
Ситников Н.Н. 213, 216, 224
Скрипов П.В. 256
Соколовский В.В. 52, 80, 84, 181, 185, 220
Солонецкий Р.В. 179
Стекленева Л.С. 116
Стрельцов С.В. 58
Сундеев Р.В. 216
Сурсаева В.Г. 118

Т

Тарасенко Т.Н. 236
Тебеньков А.В. 159, 197

Темиров А.Т. 148
Темнов В.В. 192
Теруков Е.И. 257
Техтелев Ю.В. 33
Тимеркаев Б.А. 288
Тимиров Ю.И. 292
Ткачев А.Г. 257
Томашевская Е.Ю. 274
Туруткин К.В. 294, 296

У

Удод Л.В. 166, 209
Удодов В.Н. 19
Умарзода Ш.У. 288
Усик М.О. 195
Устинов В.В. 155

Ф

Фахретдинов М.И. 261
Филиппов М.А. 179

Х

Хайруллина Р.Р. 92
Ханов Л.Н. 252
Харитонова О.Г. 193, 195
Харьков А.М. 168, 172, 278
Хизриев К.Ш. 197
Хоменко М.Р. 217
Христов А.В. 122
Хуснутдинов Р.М. 92

Ч

Червинский Д.А. 122
Черемных Н.А. 172
Чернов В.М. 39
Черногорова О.П. 216

Ш

Шавров В.Г. 33, 152, 192, 195
Шалимова А.В. 216
Шамшур Д.В. 175
Шарипов С.М. 288
Шахсинов Г.Ш. 102
Шелест В.В. 122
Шелехов Е.В. 126
Шелушинина Н.Г. 294, 296
Шеляков А.В. 213, 224

Щ

Щеглов В.И. 280
Щетников О.П. 130

Э

Эркенов Ш.А. 188

Я

Якунин М.В. 294, 296
Якшибаев Р.А. 98
Янушкевич К.И. 209
Ясюлевич И.А. 155