

XXI ВСЕРОССИЙСКАЯ ШКОЛА-СЕМИНАР
ПО ПРОБЛЕМАМ ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА



ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН
Институт теплофизики УрО РАН
Институт электрофизики УрО РАН
Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
Уральское отделение Российской академии наук
ООО «Сигнифика»



Тезисы докладов

XXI Всероссийской школы–семинара
по проблемам физики конденсированного состояния вещества
(СПФКС–21)

18 – 25 марта 2021 года

г. Екатеринбург
2021

УДК 538.9(043.2)
ББК 22.37я431

ISBN 978-5-6045774-1-7

© Авторы, содержание тезисов, 2021
© ИФМ УрО РАН, оформление, 2021

Финансовая поддержка

Уральского отделения РАН
Института физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН

Спонсоры-участники



МНИЦ “Когерентная
рентгеновская оптика”

Оргкомитет

- * **Гудин Сергей Анатольевич**, к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН (председатель оргкомитета)
- * **Блинова Ю.В.**, к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН (зам. председателя оргкомитета)
- * **Гохфельд Н.В.**, к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН (зам. председателя оргкомитета)
- * **Давыдов Д.И.**, к.т.н., ИФМ УрО РАН (зам. председателя оргкомитета)
- * **Радзивончик Д.И.**, ИФМ УрО РАН (зам. председателя оргкомитета)
- * **Андбаева В.Н.**, к.ф.-м.н., ИТФ УрО РАН (ученый секретарь)
- * **Байтимиров Д.Р.**, к.ф.-м.н., УрФУ
- * **Незнахин Д.С.**, к.ф.-м.н., УрФУ

Программный комитет

- * **Сташков Алексей Николаевич**, к.т.н., ИФМ УрО РАН (председатель программного комитета)
- * **Игошев П.А.**, к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН (зам. председателя программного комитета)
- * **Агзамова П.А.**, к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- * **Бахарев С.М.**, к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- * **Волкова З.Н.**, к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- * **Волосников Д.В.**, к.ф.-м.н., ИТФ УрО РАН
- * **Гамзатов А.Г.**, к.ф.-м.н., ИФ ДФИЦ РАН
- * **Горбачёв И.И.**, к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- * **Гудина С.В.**, к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- * **Кругликов Н.А.**, к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- * **Павлов Н.С.**, к.ф.-м.н., ИЭФ УрО РАН
- * **Пронин А.А.**, к.ф.-м.н., ИОФ РАН
- * **Столбовский А.В.**, к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- * **Чичай К.А.**, к.ф.-м.н., БФУ им. И. Канта
- * **Шкварин А.С.**, к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН

Локальный комитет

- * **Ширинкина Ирина Геннадьевна**, к.т.н., ИФМ УрО РАН (председатель локального комитета)
- * **Гапонцева Н.Н.**, ИФМ УрО РАН
- * **Девятериков Д.И.**, ИФМ УрО РАН
- * **Зяц С.В.**, ИЭФ УрО РАН
- * **Мальцева В.Е.**, УрФУ
- * **Меренцов А.И.**, к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- * **Панасенко А.С.**, ИТФ УрО РАН
- * **Постников М.С.**, ИФМ УрО РАН
- * **Хотиенкова М.Н.**, ИТФ УрО РАН

Содержание

Вступительная статья	1
Аналитический отчет о XX Юбилейной Всероссийской школе-семинаре по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-20)	4
Лекции	11
Методы исследования магнитокалорического эффекта в циклических магнитных полях, <i>Алиев А.М.</i>	13
Неэрмитовы вейлевские фермионы типов 3 и 4, <i>Алисултанов З.З.</i>	14
Мультикалорические материалы и эффекты, <i>Амиров А.А.</i>	15
Физико-химические аспекты получения функциональных кристаллических материалов, <i>Беккер Т.Б.</i>	16
Перспективы применения металлоорганических перовскитов в фотонике и фотовольтаике, <i>Болдырев К.Н., Аникеева В.Е., Семенова О.И., Попова М.Н.</i>	17
Критическая динамика бозонной системы вблизи квантового фазового перехода, <i>Васин М.Г.</i>	18
Рентгеновская спектроскопия поглощения: элементочувствительный метод для изучения локальной атомной и электронной структуры, <i>Велигжанин А.А.</i>	19
Аддитивное производство постоянных магнитов и магнитных систем, <i>Волегов А.С., Болячкин А.С., Мальцева В.Е., Окулов И.В.</i>	20
Анизотропный сверхпроводящий переход в квазидвумерных проводниках, <i>Григорьев П.Д., Кешарпу К.К., Кочев В.Д., Орлов А.П., Фролов А.В., Синченко А.А.</i>	21
Логарифмические фракталы в живой природе, <i>Григорьев С.В.</i>	22
Киральные спиновые структуры в нецентросимметричных кубических кристаллах, <i>Григорьев С.В.</i>	23
Дизайн наноматериалов для диагностики и терапии рака, <i>Дёмин А.М.</i>	24
Фундаментальные основы эффективной переработки техногенных отходов ферросплавного производства, <i>Заякин О.В., Жучков В.И., Сычев А.В.</i>	25
Высокотемпературная проводимость редкоземельных металлов и сплавов в твердом состоянии, <i>Ивлиев А.Д.</i>	26
Новые твердотельные материалы с фазовыми переходами для альтернативной энергетики, <i>Коледов В.В.</i>	27
Инженерия наноструктур для медицинской спинтроники, <i>Коплак О.В., Моргунов Р.Б.</i>	28

Методы создания и применения высоких магнитных полей для исследований перспективных магнитных материалов, <i>Кошкидько Ю.С.</i>	29
Резонансные взаимодействия в акусто–магнито–плазмонике, <i>Кузьмин Д.А., Бычков И.В., Власов В.В., Шавров В.Г., Темнов В.В.</i>	30
Фазы высокого давления в сплавах, <i>Меньшикова С.Г., Бражкин В.В.</i>	31
Микроскопическая коллективная динамика модельной однокомпонентной плазмы, <i>Мокшин А.В., Файрушин И.И.</i>	32
Особенности магнитной анизотропии высокоанизотропных интерметаллических соединений, <i>Незнахин Д.С., Болячкин А.С., Барташевич М.И., Андреев А.В., Горбунов Д.И., Барташевич А.М., Радзивончик Д.И., Лукоянов А.В., Скоков К.П.</i>	33
Суперкомпьютерное атомистическое многомасштабное моделирование: подходы, объекты исследования, соревнование школ в настоящем и перспективы в будущем, <i>Норман Г.Е.</i>	34
Моделирование критических свойств сложных систем, <i>Прудников П.В.</i>	35
Методы машинного обучения в физике конденсированного состояния, <i>Рыльцев Р.Е., Щелкачев Н.М., Балякин И.А.</i>	36
Теплофизические свойства растворов хладагентов в компрессорных маслах: к 75-летию профессора Виталия Петровича Железного, <i>Скрипов П.В.</i>	37
Теоретические подходы к описанию магнитокалорического эффекта в ферромагнитных сплавах, <i>Соколовский В.В., Бучельников В.Д.</i>	38
Релаксация вблизи бинадали, <i>Сон Л.Д.</i>	39
Получение и свойства проводников с градиентной электропроводностью для разработки индукторов сильного магнитного поля, <i>Спирин А.В., Паранин С.Н., Крутиков В.И., Заяц С.В., Хрустов В.Р., Колеух Д.С., Зайцев Е.Ю.</i>	40
Атомистическое моделирование радиационных повреждений материалов ядерной энергетики: диффузия нанополостей, <i>Стегайлов В.В.</i>	41
Спин-орбитальное взаимодействие в $4d - 5d$ оксидах переходных металлов, <i>Стрельцов С.В.</i>	42
Вакуумная и твердотельная спинтроника, <i>Терещенко О.Е.</i>	43
Сплавы и соединения для магнитного охлаждения при комнатных и криогенных температурах: ретроспектива и перспективы, <i>Ховайло В.В., Таскаев С.В.</i>	44
Магнитные явления	45
Магнитокалорический эффект в сплавах $La - Fe - Co - Si$ в переменных магнитных полях, <i>Абдулкадирова Н.З., Алиев А.М., Гамзатов А.Г., Gebara P.</i>	47

Корреляция магнитокалорических и теплофизических свойств вблизи фазовых переходов в системе La – Fe – Co – Si, Абдулкадирова Н.З., Гамзатов А.Г., Алиев А.М., Gebara P.	48
Магнитное состояние наноструктурированного синтетического пирротина, Акрамов Д.Ф., Селезнева Н.В., Майков В.В., Баранов Н.В.	49
Моделирование процессов перемагничивания аморфных магнитных микропроводов, Алехина Ю.А., Перов Н.С.	50
Электронный транспорт в магнитном поле в новых ферромагнитных топологических изоляторах $MnBi_8Te_{13}$ и $MnBi_{10}Te_{16}$, Абдуллаев Н.А., Алигулиева Х.В., Алиев З.С., Амирасланов И.Р., Зверев В.Н., Шикин А.М., Мамедов Н.Т., Чулков Е.В.	51
Допированный марганцем полупроводник $CdGeP_2$: Разбавленный магнитный полупроводник или неоднородный микрокомпозит?, Kilanski L., Арсланов Т.Р., Lewicka S., Khaliq A., Minikaev R., Reszka A., Ślawska-Waniewska A., Kowalski B.J., Dobrowolski W., Федорченко И.В., Маренкин С.Ф.	52
Полевая зависимость магнитокалорического эффекта порошка Gd, полученного в шаровой мельнице, Архипов А.В., Андреев С.В., Незнахин Д.С., Курляндская Г.В., Свалов А.В.	53
Синтез и магнитные свойства цилиндрических нанопроводов разного диаметра и длины, Боймурадова Ш.К., Кулеш Н.А., Васьковский В.О.	54
Неравновесное критическое поведение мультислойных магнитных наноструктур, Болдырева М.М., Прудников П.В., Прудников В.В., Мамонова М.В.	55
Исследование низкотемпературного магнитного состояния бинарного интерметаллида Ho_7Rh_3 методами нейтронной дифракции и АС магнитной восприимчивости, Ваулин А.А., Баранов Н.В., Прекул А.Ф., Тсутоака Т., Губкин А.Ф.	56
Исследование динамики фазовых превращений в сплавах на основе FeRh по данным нейтронной дифракции и Холловской магнитометрии, Ваулин А.А., Сантос А.М., Гимаев Р.Р., Губкин А.Ф., Зверев В.И.	57
Теплоемкость и магнитокалорический эффект в манганитах $La_{0.7}Sr_{0.3-x}Ba_xMnO_3$, Гаджиев А.Б., Гамзатов А.Г., Dwi Nanto S., Kurniawan B., Yu S.C., Алиев А.М.	58
Магнитокалорический эффект системы $Mn_{1-x}Fe_xAs$ в циклических магнитных полях, Гаджиев А.Б., Гамзатов А.Г., Алиев А.М., Митюк В.И., Говор Г.А.	59
Методы определения магнитокалорического эффекта по данным теплофизических измерений вблизи магнитных фазовых переходов, Гамзатов А.Г.	60
Зарождение цилиндрических магнитных доменов с 90-градусной доменной границей электрическим полем положительной и отрицательной полярности, Гареев Т.Т., Антипин К.С., Мясников Н.В., Николаева Е.П., Пятаков А.П.	61

Спин-переориентационные фазовые переходы в (110)-пленках феррита висмута, <i>Гареев Т.Т., Пятаков А.П., Гареева З.В., Звездин А.К.</i>	62
Определение монокристаллического состояния и фазовый анализ ферромагнитных наночастиц по данным ЯМР, <i>Гермов А.Ю., Прокопьев Д.А., Михалёв К.Н., Голобородский Б.Ю., Конев А.С.</i>	63
Аномальное изменение размера спинового полярона в парамагнитной области температур, <i>Гудин С.А., Солин Н.И.</i>	64
Контролируемое перемагничивание (PrDy)(FeCoB) микроигл различной геометрии, <i>Дворецкая Е.В., Коплак О.В.</i>	65
Микромагнитное моделирование нанокompозитных сплавов на основе магнитомягкой и магнитотвердой фаз, <i>Деньгина Е.Ю., Болячкин А.С., Волегов А.С.</i>	66
Магнитокалорический эффект в сплаве GdZn в циклических магнитных полях, <i>Джабраилов Ш.З., Алиев А.М., Franco V.</i>	67
Сегрегация сплавов $Ni_2Mn_{1+x}Sb_{1-x}$ из первых принципов, <i>Ерагер К.Р., Соколовский В.В., Бучельников В.Д.</i>	68
Подвижность магнитного геликоида в нанослое гольмия, <i>Заворницын Р.С., Наумова Л.И., Миляев М.А., Макарова М.В., Проглядо В.В., Максимова И.К., Устинов В.В.</i>	69
Формирование однонаправленной магнитной анизотропии в спиновом клапане, содержащем слой Dy, <i>Заворницын Р.С., Наумова Л.И., Миляев М.А., Макарова М.В., Проглядо В.В., Устинов В.В.</i>	70
Магнитострикция кристаллической структуры A2 в сплавов Fe – (Ga, Ge, Al): исследования <i>ab initio</i> , <i>Матюнина М.В., Загребин М.А., Соколовский В.В., Бучельников В.Д.</i>	71
Новый механизм аномального магнитокалорического эффекта в металлических системах, <i>Ивченко В.В., Игошев П.А.</i>	72
Поведение термодинамических и магнитных параметров модели дендримера, <i>Исаева М.М., Магомедов М.А.</i>	73
Магнитотранспортные, теплофизические и магнитокалорические свойства манганита $La_{0.8}Ag_{0.1}MnO_3$, <i>Кадырбардеев А.Т., Алиев Г.М., Ашуров Г.Г., Абдуразаков Р.Р., Гаджимурадов Р.Р., Ибрагимов Д.Н., Рамазанов Г.М., Шахруханов У.М., Гамзатов А.Г.</i>	74
Прямой и обратный магнитокалорический эффект в сплаве Гейслера $Ni_{47}Mn_{40}Sn_{12.5}Cu_{0.5}$ в импульсных магнитных полях до 500 кЭ, <i>Каманцев А.П., Кошкидько Ю.С., Гамзатов А.Г., Алиев А.М., Varzaneh A.G., Kameli P., Sarsari I.</i>	75

Зарождение диффузных магнитных неоднородностей в тонких плёнках феррита граната за счёт магнитоэлектрического эффекта, <i>Каминский А.С., Ядвичук А.В., Николаева Е.П., Пятаков А.П.</i>	76
Влияние ориентации подложки MgO и толщины слоя Gd на относительную охлаждающую мощность в многослойных структурах W/Gd/W/MgO, <i>Кашин С.Н., Коплак О.В.</i>	77
Численный расчет эффекта магнитного импеданса многослойной пленочной структуры: фокус на создание детекторов давления, <i>Козлов Н.В., Волчков С.О., Членова А.А., Курляндская Г.В.</i>	78
Магнитострикция в сплавах Fe – Si: исследования из первых принципов, <i>Кошкин А.Б., Загребин М.А., Матюнина М.В., Соколовский В.В., Бучельников В.Д.</i>	79
Теоретические аспекты магнитной гипертермии в ансамбле неподвижных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц, <i>Кузнецова А.А., Елфимова Е.А.</i>	80
Применение методов машинного обучения для прогнозирования свойств пленочных структур с однонаправленной магнитной анизотропией, <i>Кулеш Н.А., Пермьяков Н.Е., Зверев В.С., Болячкин А.С., Кошелев А.А.</i>	81
Спери- и сперомагнетизм в многослойных пленках [Tb – Co/Si] _n , <i>Макаровичкин И.А., Кудюков Е.В., Степанова Е.А., Свалов А.В.</i>	82
Процессы перемагничивания в наноструктурированных сплавах системы Pr – Fe – В, <i>Мальцева В.Е., Андреев С.В., Солдатов И.В., Волегов А.С.</i>	83
Первопринципные расчеты магнитной анизотропии пленок Fe и Co на поверхности платины., <i>Мамонова М.В., Макеев М.Ю., Зенова А.А.</i>	84
Изменение свойств газораспыленного порошка сплавов системы Fe – Nd – В при длительном изотермическом отжиге, <i>Марухин А.О., Савин В.В., Савина Л.А., Сороковиков М.Н., Чайка В.А.</i>	85
Тетрагональная магнитострикция в сплавах Fe – (Ga, Ge): исследования из первых принципов, <i>Матюнина М.В., Загребин М.А., Соколовский В.В., Бучельников В.Д.</i>	86
Многослойные пленочные структуры для высокочувствительных магнитных биосенсоров на основе магнитоимпедансного эффекта, <i>Мельников Г.Ю., Лепаловский В.Н., Курляндская Г.В.</i>	87
Противокражные системы (изучение магнитных свойств элементов противокражных систем), <i>Меренцова К.А., Незнахин Д.С.</i>	88
Влияние термообработки на процесс перемагничивания тонких пленок сплава Finemet, <i>Михалицына Е.А., Катаев В.А.</i>	89

Влияние химического состава на температуру спиновой переориентации в соединениях типа $Fe_{7-x}M_xSe_8$, <i>Мозговых С.Н., Баранов Н.В., Волегов А.С., Селезнева Н.В.</i>	90
Магнитокалорический эффект и намагниченность в сплавах $Gd_5(Si_xGe_{1-x})_4$ в циклических магнитных полях, <i>Мухучев А.А., Амиров А.А., Velo J.H., Алиев А.М.</i> ..	91
Влияние обработки ацетоном на магнитные характеристики аморфного магнитомягкого сплава $Co - Ni - Fe - Cr - Mn - Si - B$, <i>Некрасов Е.С., Денисов Н.Д., Скулкина Н.А.</i>	92
Влияние концентрации железа на структуру и физические свойства высокоинтеркалированных соединений $Fe_xTiS_{1.7}Se_{0.3}$, <i>Носовец В.С., Шерокалова Е.М.</i>	93
Система $GdFeAl - GdFeSi$ со сменой типа решетки, <i>Платонов С.П., Кучин А.Г., Гавико В.С., Яковлева М.Ю.</i>	94
Прямой и обратный магнитокалорический эффект соединений $Nd(Co_{1-x}Fe_x)_2$ ($x = 0 - 0.16$), <i>Аникин М.С., Потапов Е.В., Тарасов Е.Н., Незнахин Д.С., Рагозина М.В., Зинин А.В.</i>	95
Микромагнитное моделирование процессов перемагничивания в нанокристаллических пленках с однонаправленной магнитной анизотропией, <i>Пушкарев И.А., Кулеш Н.А., Васьковский В.О., Москалев М.Е., Аданаква О.А.</i>	96
Измерение спин-волновой жесткости в гелимагнетиках с взаимодействием Дзялошинского-Мория, <i>Пшеничный К.А., Алтынбаев Е.В., Григорьев С.В.</i>	97
Исследование магнитных и магнитотепловых свойств соединений $Ho_{1-x}Y_x(Co_{0.84}Fe_{0.16})_2$, <i>Аникин М.С., Рагозина М.В., Тарасов Е.Н., Незнахин Д.С., Андреев С.В., Потапов Е.В., Зинин А.В.</i>	98
Спиновый переход в $LuCo_3$, <i>Радзивончик Д.И., Незнахин Д.С., Лукоянов А.В.</i>	99
Влияние состава на структуру и магнитные свойства плёнок системы $Dy-Co$, <i>Русалина А.С., Кудюков Е.В., Аданаква О.А., Степанова Е.А., Кравцов Е.А., Васьковский В.О.</i>	100
Влияние амплитуды переменного магнитного поля на динамический отклик феррожидкости, <i>Русанов М.С., Зверев В.С., Елфимова Е.А.</i>	101
Исследование из первых принципов структурных свойств сплавов Гейслера $CoNiSn$, <i>Саносян А.А., Соколовский В.В., Бучельников В.Д.</i>	102
Описание нейтронограмм при замещении Zd -ионов в оливин структуре, <i>Сёмкин М.А., Урсова Н.В., Хосер А., Пирогов А.Н.</i>	103
Термодинамические и магнитные свойства ансамбля неподвижных суперпарамагнитных феррочастиц, <i>Соколовский С.А., Соловьева А.Ю., Елфимова Е.А.</i>	104

Кристаллическая и спиновая структура низкоразмерного фрустрированного магнетика $\text{Li}_2\text{MnTeO}_6$, определённая методом нейтронной порошковой дифракции, <i>Суслопарова А.Е., Курбаков А.И., Помякушин В.Ю.</i>	105
Исследование трехслойной магнитотвердой/магнитомягкой гетероструктуры, <i>Тааев Т.А., Хизриев К.Ш., Муртазаев А.К.</i>	106
Поиск фазы $L1_0$ в сплавах на основе Fe – Ni, <i>Ульянов М.Н., Таскаев С.В., Гаврилова М.А., Богуш М.Ю., Гундеров Д.В.</i>	107
Магнитокалорический эффект и стеклообразующая способность в объёмно-аморфных сплавах Gd – Sc – Co – Ni – Al, <i>Упоров С.А., Упорова Н.С., Рыльцев Р.Е., Быков В.А., Эстемирова С.Х., Щелкачев Н.М.</i>	108
Процессы перемагничивания в постоянных магнитах систем Nd – Fe – В и Sm – Co, <i>Уржумцев А.Н., Мальцева В.Е., Шарин М.К., Таранов Д.В., Волегов А.С.</i>	109
Применение магниторезистивного индикатора для исследования магнитострикции тонких плёнок, <i>Фещенко А.А., Кудюков Е.В., Лепаловский В.Н., Балымов К.Г., Васьковский В.О.</i>	110
Тепловые, магнитные и магнитокалорические свойства сплавов Гейслера $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{28}\text{Ga}_{22-x}(\text{Cu}, \text{Zn})_x$ ($x = 0; 1.5$), <i>Хизриев Ш.К., Гамзатов А.Г., Батдалов А.Б., Алиев А.М., Abdolhosseini I.S., Kameli P., Ghotbi A.</i>	111
Прямой и обратный магнитокалорические эффекты в ленточном образце сплава Гейслера $\text{Ni}_{45}\text{Co}_5\text{Mn}_{31}\text{Al}_{19}$, <i>Хизриев Ш.К., Гамзатов А.Г., Алиев А.М.</i>	112
Временные и пространственные резонансные явления спиновых волн в магнитных диэлектрических микродисках, возбуждаемых ультракороткими высокочастотными лазерными импульсами, <i>Храмова А.Е., Савочкин И.В., Кокецки М., Кожаев М.А., Шапошников А.Н., Бержанский В.Н., Звездин А.К., Яковлев Д.Р., Баер М., Белотелов В.И.</i>	113
Волны намагниченности в разбавленной системе, <i>Циберкин К.Б.</i>	114
Намагниченность системы димеров со случайной энергией связи, <i>Циберкин К.Б., Струнина Я.Ю.</i>	115
Особенности измерения магнитных свойств постоянных магнитов в замкнутой магнитной цепи, <i>Черепанова А.С., Волегов А.С.</i>	116
Динамика киральных магнитных скирмионов в тонких пленках, индуцированная электрическим током, <i>Чичай К.А., Кучкин В.М., Рыбаков Ф.Н., Блюгель Ш., Киселёв Н.С.</i>	117
Функциональные пленочные наноструктуры с гигантским магнитным импедансом, <i>Членова А.А., Курляндская Г.В.</i>	118

Модуляционный метод измерения намагниченности, Юсупов Д.М., Амиров А.А., Алиев А.М.	119
Исследование поведения уровней Ландау и g-факторов двумерной сурьмы в рамках модели сильной связи, Яковлев И.А., Пушкарёв Г.В., Степанов Е.А., Мазуренко В.В., Руденко А.Н.	120
Фазовые переходы и критические явления	121
Плавление и кристаллизация пленок нитрида бора в модели кристаллического фазового поля, Анкудинов В.Е.	123
Расчет относительных дисперсий намагниченности, восприимчивости и теплоемкости в слабо разбавленной модели Поттса на основе методов компьютерного моделирования., Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Атаева Г.Я., Муртазаева А.А.	124
Критические свойства модели Изинга в магнитном поле, Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Магомедов М.А., Бадиев М.К.	125
Нестабильность электронной структуры в сплавах Ni – Mn – Ga, Байгутлин Д.Р., Соколовский В.В., Мирошкина О.Н., Загребин М.А., Бучельников В.Д.	126
Система Mn – Mg – В – О: кристаллографические и магнитные исследования, Бельская Н.А., Казак Н.В., Мошкина Е.М., Васильев А.Д., Безматерных Л.Н., Еремин Е.В., Гаврилкин С.Ю., Овчинников С.Г.	127
Исследование критического поведения одноосного гелимагнетика методом Монте-Карло, Борзилов В.О., Прудников П.В., Евсин Д.В., Мамонова М.В., Поспелов Е.А., Бакшеев Г.Г.	128
Моделирование поведения и магнитных свойств спин-вентильной структуры, Дроворуб Е.В., Прудников В.В., Прудников П.В.	129
Первопринципные расчёты магнитных свойств одноосного гелимагнетика, Евсин Д.В., Борзилов В.О., Ложников В.Е., Прудников П.В., Мамонова М.В.	130
Расчет магнитосопротивления мультислойных магнитных структур и эффектов старения в магнитосопротивлении, Евстафьева Ю.К., Прудников В.В., Прудников П.В.	131
Моделирование методом Монте-Карло магнитных свойств мультислойных и спин-вентильных структур, описываемых изотропной и анизотропной моделью Гейзенберга, Егорина А.С., Прудников П.В.	132
Расчет равновесных характеристик тонких гранулированных пленок методами Монте-Карло, Зайчикова С.Н., Прудников П.В.	133
Механизмы нуклеации в однокомпонентных металлических стеклах, Кирова Е.М., Писарев В.В.	134

Влияние старения на структуру, фазовый состав, физико-механические свойства холоднокатаных биосовместимых сплавов $Ti - 39Nb - 5Zr$ и $Ti - 39Nb - 5Zr - 2Sn$, <i>Коренев А.А., Илларионов А.Г., Лиштван Р.Н.</i>	135
Влияние режимов кратковременного отжига на структуру и модуль упругости холоднодеформированного биосовместимого титанового сплава $Ti - 39Nb - 5Zr$, <i>Коренев А.А., Илларионов А.Г., Кочешева Н.С.</i>	136
Прогнозирование количества нитридов титана и сульфидов титана и марганца, образующихся при кристаллизации стали, <i>Корзунова Е.И., Попов В.В., Горбачев И.И.</i>	137
Изучение системы $Ni - TiSe_2$ методом ЭДС на модифицированных электрохимических ячейках $M M^+ Ni_xTiSe_2$ ($M = Cu, Na$), <i>Кузнецова А.Ю., Суслов Е.А., Титов А.Н.</i>	138
Исследование фазовых превращений в нестехиометрическом сплаве $NiMnIn$, <i>Кузнецов Д.Д., Кузнецова Е.И., Маширов А.В., Лошаченко А.С., Данилов Д.В., Шандрюк Г.А., Шавров В.Г., Коледов В.В.</i>	139
Плазмоника метаповерхностей на основе 2D материалов и материалов с фазовыми переходами, <i>Кузьмин Д.А., Бычков И.В., Усик М.О., Харитонов О.Г., Толкачев В.А., Шавров В.Г.</i>	140
Термодинамика щелочных металлов в газовой фазе. Уравнение состояния, <i>Мирзиярова Д.А., Мокшин А.В.</i>	141
Эффект возникновения автоколебаний в свободно подвешенной ленте сплава Ti_2NiCu под воздействием электрического тока, <i>Морозов Е.В., Коледов В.В., Шавров В.Г.</i> . .	142
Влияние магнитного поля на термодинамические и магнитные свойства антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке, <i>Муртазаев К.Ш., Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К., Курбанова Д.Р.</i>	143
Кинетика фазовых превращений в сплавах $Fe - Ga$, <i>Павлухина О.О., Соколовский В.В., Бучельников В.Д., Загребин М.А., Матюнина М.В., Мирошкина О.Н., Байгутлин Д.Р.</i>	144
К молекулярно-статистической теории ферромагнитных жидкокристаллических суспензий, <i>Петров Д.А.</i>	145
Микроскопическая динамика переохлажденных жидкостей и стекол, <i>Писарев В.В.</i>	146
Влияние магнитного поля на магнитные свойства антиферромагнетика $RbFe(MoO_4)_2$, <i>Рамазанов М.К., Муртазаев А.К., Магомедов М.А., Мазагаева М.К.</i>	147
Фрустрации и упорядочение в модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на решетке Кагоме с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей, <i>Ризванова Т.Р., Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Магомедов М.А.</i>	148

Исследование активационного барьера кристаллизации метастабильной жидкости методом метадинамики, <i>Розанов Е.О., Проценко С.П., Байдаков В.Г.</i>	149
Моделирование гистерезисных явлений в спин-вентильной структуре, <i>Симаков Н.С., Прудников В.В., Прудников П.В.</i>	150
Модель структурного перехода жидкость-жидкость для сплавов Fe – Mn – С, <i>Синицин Н.И., Чикова О.А., Вьюхин В.В.</i>	151
Исследование влияния изотермической и электроимпульсной обработки на структуру быстрозакалённых лент $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ с тонким поверхностным кристаллическим слоем, <i>Ситников Н.Н., Сивцова Г.В., Шеляков А.В., Грешнякова С.В., Залетова И.А.</i>	152
Структурные переходы в хиральной жидкокристаллической суспензии квадрупольных частиц, <i>Сокольчик Д.П., Макаров Д.В.</i>	153
Вычисление среднего числа молекул в капле-зародыше воды при гомогенном зародышеобразовании из пара, <i>Сыроватко Ю.В.</i>	154
Влияние потенциала ионизации металла решётки-хозяина на координацию интеркаланта в слоистых дихалькогенидах со структурой 1Т, <i>Титов А.Н.</i>	155
Высокотемпературный фазовый переход в диселениде ванадия, <i>Топорова Н.М., Шерокалова Е.М., Селезнева Н.В., Казанцев В.А., Баранов Н.В.</i>	156
Квантовая запутанность двух взаимодействующих спинов, равных единице, <i>Бострем И.Г., Овчинников А.С., Федоров А.Е.</i>	157
Особенность коллективной динамики в окрестности точки фазового перехода флюидов, <i>Флейта Д.Ю.</i>	158
Твердотельноподобные свойства металлических расплавов на основе никеля, <i>Хайруллина Р.Р., Хуснутдинов Р.М.</i>	159
Исследование эффектов гистерезиса в магнитных структурах с дефектами, <i>Шакиров Р.С., Прудников П.В.</i>	160
Численное исследование трёхмерной модели Изинга вблизи порога перколяции, <i>Шляхтич М.А., Прудников П.В.</i>	161
Проводимость и транспортные явления	163
Электрические и гальваномагнитные эффекты в антиферромагнитном топологическом изоляторе $MnBi_2Te_4$, <i>Абдуллаев Н.А., Алигулиева Х.В., Алиев З.С., Амирасланов И.Р., Зверев В.Н., Шикин А.М., Мамедов Н.Т., Чулков Е.В.</i>	165
Аномальный фазовый сдвиг осцилляций Шубникова - де Гааза в квантовой яме $HgTe$ с инвертированным энергетическим спектром, <i>Боголюбский А.С., Гудина С.В., Неверов В.Н., Шелушина Н.Г., Якунин М.В.</i>	166

Квантовые осцилляции магнитосопротивления в гетероструктурах HgTe/HgCdTe: определение эффективной массы и g-фактора электронов 2D- системы, Боголюбский А.С., Гудина С.В., Неверов В.Н., Шелушнина Н.Г., Якунин М.В.	167
Электро- и магнитосопротивление монокристаллов MoTe ₂ и WTe ₂ до и после закалки, Доможирова А.Н., Наумов С.В., Подгорных С.М., Чистяков В.В., Марченкова Е.Б., Huang J.C.A., Марченков В.В.	168
Зарядовое упорядочение в варвиките Fe _{1.75} V _{0.25} VO ₄ , Князев Ю.В., Балацкий Д.В., Баюков О.А., Бельская Н.А., Казак Н.В., Руденко В.В., Громилов С.А., Овчинников С.Г.	169
Исследование термоЭДС материалов на основе халькогенидов циркония и ванадия при высоком давлении до 10 ГПа, Коробейников И.В., Морозова Н.В., Овсянников С.В., Шкварина Е.Г., Титов А.Н.	170
Межслоевая проводимость в углах Ямаджи в слоистых металлах в магнитном поле, Могилюк Т.И., Григорьев П.Д.	171
Крупномасштабный примесный потенциал в режиме квантового эффекта Холла в структурах InGaAs/InAlAs, Савельев А.П., Арапов Ю.Г., Гудина С.В., Неверов В.Н., Шелушнина Н.Г.	172
Электрические и магнитные свойства сплавов Гейслера Co ₂ MnZ (Z = Si, Al, Ge, Ga), Семянникова А.А., Перевозчикова Ю.А., Марченков В.В.	173
Магнитный пробой в валентной зоне квантовой ямы HgTe/HgCdTe с инвертированной зонной структурой в полуметаллической фазе, Гудина С.В., Боголюбский А.С., Неверов В.Н., Туруткин К.В., Шелушнина Н.Г., Якунин М.В.	174
Резонансные явления	175
Плазмонные возбуждения в эллипсоидальных наноструктурах меди, Вагапов А.Ш., Киряков А.Н., Зацепин А.Ф.	177
Микромагнитное моделирование авторезонансного возбуждения колебаний намагниченности в тонких пленках ЖИГа, Теплов В.С., Бессонов В.Д., Баталов С.В., Телегин А.В.	178
Структурные и механические свойства твёрдых тел	179
Сегнетоэлектрические фазы на основе AgNbO ₃ , Безбородова П.А., Лулицкая Ю.А. ...	181
Термодинамический анализ равновесия кубического и тетрагонального бейнита в сталях при условии запрета на образование карбидов, Булдашев И.В., Мирзаев Д.А.	182
Фазовый состав и микротвёрдость наплавки хромистой стали, Гохфельд Н.В., Филипов М.А., Коробов Ю.С., Морозов С.О.	183

Напряжения несоответствия от дилатационной нити в клине со свободными поверхностями, <i>Гудкина Ж.В., Гуткин М.Ю., Аргунова Т.С., Красницкий С.А.</i>	184
Влияние тугоплавких элементов на структуру кобальтовых жаропрочных сплавов, <i>Давыдов Д.И.</i>	185
Электронная структура и плотность состояний ZnO, <i>Джафарова В.Н.</i>	186
Гибридная технология механохимической обработки и СВС процесса синтеза углекомпозиционных материалов, легированных литием, для рентгеновской оптики, <i>Жеребцов И.С., Нарикович А.С., Савин В.В., Чайка В.А., Баранников А.А.</i>	187
Динамика плотности дислокаций α -титана при его нагреве: <i>in-situ</i> экспериментальные данные и моделирование методом молекулярной динамики, <i>Иванов И.В.</i>	188
Структурная релаксация в аморфной фазе тонкопленочного наногранулированного композита $(x)\text{Ni} - (1 - x)\text{PZT}$, <i>Калгин А.В.</i>	189
Получение, структура и свойства тройного композита Al/Cu/Mg, <i>Калонов А.А., Волков А.Ю., Бродова И.Г.</i>	190
Свойства керамики на основе карбида кремния, полученной методом плазменно-искрового спекания (SPS), <i>Кардашова Г.Д., Ризаханова С.У., Дибиргаджиев Д.Ш.</i>	191
Структура и транспортные характеристики монокристаллов $(\text{ZrO}_2)_{0.91-x}(\text{Sc}_2\text{O}_3)_{0.09}(\text{Yb}_2\text{O}_3)_x$ в зависимости от концентрации оксида иттербия, <i>Борик М.А., Кораблёва Г.М., Кулебякин А.В., Курицына И.Е., Ломонова Е.Е., Маякова М.Н., Мызина В.А., Табачкова Н.Ю., Числов А.С.</i>	192
Коррозионная стойкость детонационных покрытий $\text{Fe}_{66}\text{Cr}_{10}\text{Nb}_5\text{V}_{19}$, <i>Кучумова И.Д., Батраев И.С., Черкасова Н.Ю.</i>	193
Исследование механизмов изнашивания $\text{Fe}_{66}\text{Cr}_{10}\text{Nb}_5\text{V}_{19}$ детонационных покрытий в условиях трения о нежестко закрепленные частицы абразива, <i>Кучумова И.Д., Рыбин Д.К., Черкасова Н.Ю.</i>	194
Высокотемпературный отжиг тонких пленок нестехиометрического $\alpha - \text{SiO}_x$, <i>Лунев Н.А., Меркулова И.Е., Баранов Е.А., Замчий А.О.</i>	195
Влияние температуры отжига на золото-индуцированную кристаллизацию тонких пленок $\alpha - \text{SiO}_{0.2}$, <i>Лунев Н.А., Меркулова И.Е., Баранов Е.А., Замчий А.О.</i>	196
Синтез материалов из прекерамической бумаги на основе Ti_3SiC_2 методом искрового плазменного спекания, <i>Мингазова Ю.Р., Седанова Е.П., Сыртанов М.С.</i>	197
Определение эффективных механических свойств в зависимости от температурных изменений, <i>Мосина Р.М., Кузьмин И.М.</i>	198

Сравнительный анализ влияния состава сплава на структуру и свойства сплавов систем Cu – Sn и Cu – Ni наноструктурированных методом КВД, Мурзинова С.А., Столбовский А.В., Фалахутдинов Р.М., Попов В.В., Чикунова Н.С.	199
Изучение механических свойств пористого аморфного нитинола, Никифоров Г.А., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.	200
Зернограничная диффузия ⁵⁷ Со в никеле, Осинников Е.В., Мурзинова С.А., Попов В.В., Столбовский А.В., Фалахутдинов Р.М.	201
Структурно-фазовые превращения в покрытиях на основе хрома, осажденных на цирконии, при атмосферном окислении, Пирожков А.В., Сыртанов М.С., Сиделёв Д.В.	202
Особенности электронной и кристаллической структур Cu _x ZrSe ₂ , Постников М.С., Шкварин А.С., Меренцов А.И., Ярмошенко Ю.М., Шкварина Е.Г., Мостовщикова Е.В., Титов А.А., Упоров С.А., Мельчаков С.Ю., Титов А.Н., Pis I., Bondino E	203
Воздействие больших пластических деформаций на структуру и свойства аморфно-кристаллического сплава Ti ₂ NiCu, Сундеев Р.В., Шалимова А.В., Ситников Н.Н., Черногорова О.П., Глезер А.М., Пресняков М.Ю., Каратеев И.А., Печина Е.А.	204
Микроструктура магния после интенсивной пластической деформации, Токарев М.А., Антонова О.В., Комкова Д.А.	205
Структура отожженной гафниевой бронзы, деформированной интенсивной пластической деформацией методом кручением под высоким давлением, Фалахутдинов Р.М., Столбовский А.В., Попов В.В., Мурзинова С.А., Ширшова П.Ю.	206
Кристаллическая структура Cr _x ZrS ₂ , Шкварина Е.Г., Титов А.А., Постников М.С., Меренцов А.И., Шкварин А.С., Пряничников С.В., Титов А.Н.	207
Вакансии кубической фазы магнетита в рамках DFT+U, Шутикова М.И., Стегайлов В.В.	208
Динамика мартенситного превращения при фрикционном нагружении, Эмурлаев К.И.	209
Анализ структурных преобразований в условиях трения с использованием синхротронной дифрактометрии, Эмурлаев К.И.	210
Влияние бора на структуру графита, формирующуюся при высоком давлении, Филоненко В.П., Баграмов Р.Х., Зибров И.П., Ляпин С.Г., Энкович П.В.	211

Неразрушающий контроль

213

Применение высокоразрешающей рентгеновской микроскопии в физике высоких давлений, Баранников А.А., Ершов П.А., Федотенко Т.М., Коэмец Е.Г., Ханфланд М., Дубровинская Н.А., Дубровинский Л.С., Снигирева И.И., Снигирев А.А.	215
---	-----

Метрологический подход неразрушающей диагностики рентгеновских преломляющих линз, <i>Нарикович А., Зверев Д., Лятун И., Баранников А., Панормов И., Синицин А., Снигирева И., Снигирев А.</i>	216
Магнитные и электрические свойства образцов из стали 09Г2С, изготовленных методом селективного лазерного сплавления, <i>Сташков А.Н., Щапова Е.А., Ничипурук А.П.</i>	217
Магнитные и механические свойства пластически деформированной стали У8 с различной морфологией перлита, <i>Щапова Е.А., Сташков А.Н., Ничипурук А.П., Афанасьев С.В.</i>	218
Теплофизика	219
Измерения показателя преломления жидкого н-водорода на линии насыщения в интервале температур 17 – 21 К, <i>Акашев А.А., Гурашкин А.Л.</i>	221
Влияние малых добавок гелия на теплофизические свойства алканов и инертных газов, <i>Андбаева В.Н.</i>	222
Коэффициенты температуропроводности полипропиленгликолей и их водных растворов, <i>Богатищева Н.С.</i>	223
Исследование угла раскрытия свободной струи перегретой воды при истечении через цилиндрический канал, <i>Бусов К.А., Томин А.С.</i>	224
Интенсификация теплообмена при спинодальном распаде водных растворов полипропиленгликолей, <i>Волосников Д.В., Поволоцкий И.И., Васин М.Г., Скрипов П.В.</i>	225
Измерение коэффициента теплопроводности водного раствора ППГ-425, <i>Галкин Д.А., Скрипов П.В.</i>	226
Оценка критических параметров частично-растворимых бинарных соединений, <i>Игольников А.А., Рютин С.Б., Скрипов П.В.</i>	227
Предсказание теплофизических свойств углеводородов методами молекулярной динамики, <i>Кондратюк Н.Д., Писарев В.В.</i>	228
Применение скоростной видеосъемки для изучения фронта испарения перегретого н-пентана при гетерогенном вскипании в стеклянном капилляре, <i>Липнягов Е.В., Паршакова М.А.</i>	229
Изучение влияния наиболее вероятных центров парообразования на кинетику спонтанного вскипания перегретого н-пентана, <i>Паршакова М.А., Липнягов Е.В.</i>	230
Исследование фазовой диаграммы расслаивающихся растворов октен-фторированный углерод, <i>Поволоцкий И.И., Волосников Д.В., Скрипов П.В.</i>	231

Плотность и электросопротивление сплавов Al–Ni–Co–РЗМ, склонных к формированию аморфного состояния, <i>Русанов Б.А., Мороз А.И., Сидоров В.Е., Швец П., Швец ст. П., Яничкович Д.</i>	232
Электрофизика	233
Исследование условий формирования капель в процессе испарения Nd:Y ₂ O ₃ излучением волоконного лазера, <i>Гашков М.А., Зубарев Н.М., Кочурин Е.А., Лисенков В.В., Осипов В.В., Платонов В.В., Тихонов Е.В.</i>	235
Изучение композитов на основе титана, полученных магнитно-импульсным прессованием нанопорошков, <i>Заяц С.В., Кайгородов А.С., Паранин С.Н.</i>	236
Генерирование субнаносекундных импульсов мощностью 54 ГВт гиромангнитными линиями, <i>Педос М.С., Рукин С.Н., Тимошенко С.П., Аличкин Е.А.</i>	237
Определение стойкости индуктора с градиентным электрическим сопротивлением при генерации сильных импульсных магнитных полей, <i>Русских П.А., Болтачев Г.Ш., Паранин С.Н.</i>	238
Наноматериалы	239
Влияние гадолиния на свойства углеродных нанотрубок, <i>Абасзаде Р.Г., Алиев О.А., Мамедова С.А.</i>	241
Исследование малоугловым рентгеновским рассеянием растворов наночастиц системы «ядро-оболочка», <i>Амарантов С.В., Дериков Я.И.</i>	242
Экспериментальное и теоретическое исследование электрофизических свойств нанокompозита на основе алюминия, <i>Баранов Д.К., Некрасов И.А., Бекетов И.В., Багазеев А.А., Малкин А.И., Князев Н.С.</i>	243
Влияние избыточного кислорода на электрические свойства композитных тонких пленок Fe–ZrO ₂ , <i>Анисимов И.А., Березутский А.Л., Дыбов В.А., Смирнов А.Н., Стогней О.В.</i>	244
Изучение тонких пленок, полученных из коллоидных растворов наночастиц сульфида серебра, <i>Воронцова Е.С., Кузнецова Ю.В., Ремпель С.В.</i>	245
Физические свойства и структура Er ₃ Fe ₅ O ₁₂ , <i>Дмитренко И.П., Абдулвахидов К.Г., Сирота М.А., Мардасова И.В., Витченко М.А.</i>	246
Наноматериалы для анодов литий-ионных аккумуляторов, <i>Чиркунова Н.В., Подлеснов Е., Сауц А.В., Дорогов М.В.</i>	247
Примесные Mn ²⁺ дефекты в оптической нанокерамике MgAl ₂ O ₄ , <i>Дутов В.А., Киряков А.Н., Зацепин А.Ф., Фокин А.В., Дьячкова Т.В., Тютюнник А.П., Зайнулин Ю.Г.</i>	248

Структура нанокристаллов тенорита по данным электронной микроскопии, <i>Калмыков А.Е., Мясоедов А.В., Сорокин Л.М., Дорогов М.В.</i>	249
Влияние состава аморфных сплавов на коррозию в водном растворе хлорида натрия, <i>Карфидов Э.А., Русанов Б.А., Никитина Е.В., Сидоров В.Е., Швец П., Яничкович Д.</i>	250
Особенности магнитных свойств наноструктурированных пленок FeAl, <i>Комлев А.С., Перов Н.С., Strusch T., Semisalova A.S.</i>	251
Термодинамические и кинетические аспекты кристаллизации теллура в среде водорода и инертных газов (He, Ar), <i>Кузьмин А.О., Рабаданов М.Р., Шапиев И.М., Исмаилов А.М.</i>	252
Газочувствительные свойства тонких пленок Cr_2O_3 , <i>Кушнарёв Б.О., Алмаев А.В.</i>	253
Синтез функционального интерметаллида PtAl_2 методом размола элементарных порошков в шаровой мельнице, <i>Ливинец А.А., Козлов К.А., Кошевой П.С., Волков А.Ю.</i>	254
Электронная структура V_2O_5 , легированного Mo, <i>Лосев Т.С., Бухвалов Д.В., Кханна А., Жидков И.С., Курмаев Э.З.</i>	255
Результаты анализа рентгеновских фотоэлектронных спектров плёнок твёрдых растворов $\text{Cd}_x\text{Pb}_{1-x}\text{S}$, <i>Лосев Т.С., Жидков И.С., Поздин А.В., Маскаева Л.Н., Курмаев Э.З.</i>	256
Детектор терагерцового излучения на основе термоэлектрического материала $\text{Bi}_{88}\text{Sb}_{12}$, <i>Макарова Е.С., Асач А.В., Тхоржевский И.Л., Сединин А.Д., Зыков Д.В., Зайцев А.Д., Демченко П., Тукмакова А.С., Новотельнова А.В., Каблукова Н.С., Ходзицкий М.К.</i>	257
Антиоксидантная активность наночастиц диоксида церия, <i>Маслова С.А., Бажукова И.Н., Бакшеев Е.О.</i>	258
Влияние материала подложки на структуру покрытия кубического карбида вольфрама WC_{1-x} , нанесенного плазмодинамическим методом, <i>Насырбаев А., Сивков А.А., Никитин Д.С.</i>	259
Термостимулированная люминесценция в облучённых нанотрубках диоксида циркония, <i>Петренёв И.А., Вохминцев А.С., Силенкова Е.А., Камалов Р.В., Вайнштейн И.А.</i>	260
Кристаллизация аморфных сплавов Al – Ni – Co – R ($R = \text{Nd, Gd, Yb}$), <i>Русанов Б.А., Сидоров В.Е., Швец П., Швец ст. П., Яничкович Д., Карфидов Э.А.</i>	261
Хромовые покрытия для защиты циркониевого сплава Э110 при высокотемпературном атмосферном окислении, <i>Ручкин С.Е., Сиделёв Д.В.</i>	262

Влияние режима охлаждения капли расплава RE-TM-B на морфологию и механические свойства магнитных микропроводов, <i>Сидоров В.Л., Коплак О.В., Дворецкая Е.В.</i>	263
Синтез и модификация наноструктурного диоксида титана для улучшения его фотокаталитических свойств, <i>Сушникова А.А., Дорошева И.Б., Валеева А.А., Ремпель А.А.</i>	264
Сенсоры низких концентраций H_2 на основе структур Pt/ $\alpha - Ga_2O_3/\epsilon - Ga_2O_3/Pt$ с островковыми слоями платины на поверхности, <i>Яковлев Н.Н., Алмаев А.В.</i>	265
Сверхпроводимость и физика низких температур	267
Влияние совместного допирования титаном и диоксидом титана на структуру, фазовый состав и сверхпроводящие свойства соединения $Fe_{1.02}Se$, <i>Кислов Е.В., Селезнева Н.В., Баранов Н.В.</i>	269
Двухузельное приближение Бете для системы локальных бозонов на квадратной решетке, <i>Спевак Е.Л., Панов Ю.Д., Москвин А.С.</i>	270
Фазовая диаграмма модельного купрата, <i>Чиков А.А., Улитко В.А., Панов Ю.Д., Москвин А.С.</i>	271
Оптика и спектроскопия	273
Инфракрасная спектроскопия гибридного перовскита $CH_3NH_3PbI_3$: Структурные фазовые переходы и динамика органического катиона, <i>Аникеева В.Е., Болдырев К.Н., Попова М.Н., Семенова О.И.</i>	275
Люминесцентные свойства квантовых точек core/shell Ag_2S/SiO_2 , синтезированных в этиленгликоле, <i>Овчинников О.В., Асланов С.В., Смирнов М.С., Перепелица А.С.</i> .	276
ИК спектроскопические исследования формирования core/shell квантовых точек Ag_2S/SiO_2 , <i>Перепелица А.С., Овчинников О.В., Смирнов М.С., Кондратенко Т.С., Гревцева И.Г., Асланов С.В., Хохлов В.Ю.</i>	277
Терагерцовая электродинамика монокристаллов гексаферритов бария М-типа $Ba_{0.2}Pb_{0.8}Al_xFe_{12-x}O_{19}$ с замещениями Pb^{+2} и Al^{+3} , <i>Ахмед А.Г., Прохоров А.С., Анзин В., Винник Д., Горшунов Б.П., Алябьева Л.Н.</i>	278
Терагерцовая мягкая мода в гексаферрите М-типа $Ba_{1-x}Pb_xFe_{12}O_{19}$, <i>Ахмед А.Г., Прохоров А.С., Анзин В.Б., Абалмасов В.А., Буш А.А., Горшунов Б.П., Алябьева Л.Н.</i>	279
Динамика предельно коротких оптических импульсов в фотонном кристалле со сверхрешеткой, <i>Белоненко А.М., Двужилова Ю.В., Двужилков И.С., Белоненко М.Б.</i>	280

Рентгеновская рефлекто-интерферометрия на базе лабораторного микрофокусного источника, <i>Воеводина М.А., Лятун С.С., Баранников А.А., Лятун И.И., Снигирева И.И., Снигирев А.А.</i>	281
Индикатриса рассеяния гемоглобина, <i>Гибизова В.В., Исаева А.И., Майков Э.</i>	282
Проявление плекситонной связи в люминесцентных свойствах ассоциатов коллоидных квантовых точек $Zn_{0.5}Cd_{0.5}S$ и наночастиц золота, <i>Гревцева И.Г., Чевычелова Т.А., Дерепко В.Н., Овчинников О.В., Смирнов М.С., Перепелица А.С.</i> ..	283
Спектральные проявления формирования core/shell наночастиц Au/SiO ₂ , <i>Гревцева И.Г., Чевычелова Т.А., Еникеев Э.И., Дерепко В.Н., Перепелица А.С.</i>	284
Спектроскопия иттриевого скандата, легированного ионом тулия, <i>Алимов О.К., Добрецова Е.А., Кашин В.В., Кутовой С.А., Русанов С.Я., Цветков В.Б.</i>	285
Оптические свойства фторидов твердых растворов BaF ₂ – SrF ₂ – ErF ₃ , <i>Добрецова Е.А., Жмыхов В.Ю., Кузнецов С.В., Цветков В.Б., Конюшкин В.А., Накладов А.Н., Федоров П.П.</i>	286
Формирователи рентгеновского пучка на основе элементов преломляющей оптики для когерентных источников излучения, <i>Зверев Д.А., Снигирева И.И., Кузнецов С.М., Юнкин В.А., Снигирев А.А.</i>	287
Разработка метода минимизации влияния рентгеновских глитчей, <i>Климова Н.Б., Ефанов О.М., Снигирев А.А.</i>	288
Синтез и спектральные характеристики кристаллов гептатанталата тербия TbTa ₇ O ₁₉ , <i>Кузьмин Н.Н., Болдырев К.Н., Рассулов В.А., Волкова Е.А., Стефанович С.Ю., Мальцев В.В.</i>	289
Формирование периодических структур из стеклянных микросфер, <i>Кучугуров А.В., Зубарева К.А., Шардаков Н.Т.</i>	290
Бериллиевая рентгеновская оптика для когерентных источников рентгеновского излучения, <i>Лятун И.И., Лятун С.С., Снигирева И.И., Снигирев А.А.</i>	291
Разгорание и затухание полос импульсной катодолюминесценции в Nd:ИАГ, <i>Макарова А.С., Соломонов В.И., Спирина А.В.</i>	292
Спектроскопия тонких пленок оксида индия-олова, <i>Мегедь М.С., Чжан Т., Шахмин А.А., Ходзицкий М.К.</i>	293
Алмазные микролинзы для когерентных методов рентгеновской диагностики, <i>Медведская П.Н., Лятун И.И., Шевырталов С.Н., Поликарпов М.В., Снигирева И.И., Юнкин В.А., Снигирев А.А.</i>	294

Формирование структурных фрагментов в системе $Cr_xTi_{1-x}Ch_2$ ($Ch = S, Se$), <i>Меренцов А.И., Шкварин А.С., Постников М.С., Gregoratti L., Amati M., Zeller P., Moras P., Титов А.Н.</i>	295
Электронная структура $Nb_xV_{1-x}Se_2$ по результатам рентгеновской резонансной фотоэлектронной спектроскопии, <i>Шкварин А.С., Меренцов А.И., Селезнева Н.В.,</i> <i>Шерокалова Е.М., Pis I, Bondino F, Титов А.Н.</i>	296
Динамика решётки и магнитные свойства ортобората кобальта $Co_3(BO_3)_2$, <i>Молчанова А.Д., Болдырев К.Н., Попова М.Н.</i>	297
Когерентная рентгеновская оптика и устройства на ее основе для источников синхротронного излучения, <i>Нарикович А., Зверев Д., Лятун И., Лятун С.,</i> <i>Воеводина М., Медведская П., Баранников А., Панормов И., Синицин А., Чичай К.А.,</i> <i>Шевырталов С., Снигирева И., Снигирев А.</i>	298
DARIA — проект компактного источника для исследований методами нейтронного рассеяния, <i>Павлов К.А., Коваленко Н.А., Коник П.И., Воронин В.В., Григорьев С.В.</i>	299
Фотолюминесценция анионных центров в нанотубулярных массивах диоксида циркония, <i>Петренёв И.А., Вохминцев А.С., Камалов Р.В., Вайнштейн И.А.</i>	300
Изучение особенностей взаимодействия молекул коллагена и коллагеназы методом динамического рассеяния света при наличии модуляторов, <i>Петрова А.В.,</i> <i>Сергеева И.А., Петрова Г.П.</i>	301
Морфология и состав нановключений в $Fe_{0.25}Ni_{0.25}TiSe_2$, <i>Постников М.С., Шкварин А.С.,</i> <i>Меренцов А.И., Патраков Е.И., Титов А.Н., Betz-Guttner E., Gregoratti L., Amati M.,</i> <i>Zeller P.</i>	302
Спектроскопия высокого разрешения кристаллов квантовой оптики в сильных электрических полях, <i>Сектаров Э.С., Болдырев К.Н.</i>	303
Конструирование и апробация мобильного интерференционного микроскопа, <i>Тимохин А.С.</i>	304
Влияние типа контактов на фотоэлектрические характеристики УФ детекторов на основе тонких пленок оксида галлия, <i>Цымбалов А.В., Калыгина В.М.</i>	305
Анализ спектров диффузного отражения и особенностей температурного тушения фотолюминесценции в микропорошке HfO_2 , <i>Шилов А.О., Савченко С.С.,</i> <i>Вохминцев А.С., Вайнштейн И.А.</i>	306
Электронная и кристаллическая структуры би-интеркалированного диселенида титана $Cu_xNi_yTiSe_2$, <i>Шкварина Е.Г., Меренцов А.И., Постников М.С., Шкварин А.С.,</i> <i>Пряничников С.В., Титов А.Н.</i>	307

Электронная и кристаллическая структура Cr_xZrTe_2 , Шкварин А.С., Титов А.А., Постников М.С., Шкварина Е.Г., Меренцов А.И., Агзамова П.А., Титов А.Н.	308
Влияние самоинтеркаляции на электронную структуру TiSe_2 , Шкварин А.С., Меренцов А.И., Титов А.Н.	309
Теория конденсированного состояния	311
Численное моделирование динамического отклика обездвиженных взаимодействующих дипольных частиц в переменном линейно-поляризованном поле, Амбаров А.В., Елфимова Е.А., Зверев В.С.	313
Потенциалы взаимодействия на основе нейронных сетей в расплавах TiZrHfNb и TiZrHfSc , Балякин И.А., Рыльцев Р.Е., Упоров С.А., Ремпель А.А.	314
Учет электронных корреляций при расчете электронной структуры, магнитных и оптических свойств тройных интерметаллидов RCuGe , Граматеева Л.Н., Лукоянов А.В., Князев Ю.В., Кузьмин Ю.И., Гупта С., Суреш К.Т.	315
Первопринципная модель двухслойного графена: исследование электронных свойств, Каплун М.В., Бескачко В.П., Аникина Е.В.	316
Фазовые состояния системы полужестких бозонов: роль локальных корреляций, Конев В.В., Панов Ю.Д.	317
Критерий Иоффе-Регеля и бозонный пик в аморфных телах с точки зрения теории случайных матриц, Конюх Д.А., Бельтюков Я.М.	318
Численное моделирование волновой капиллярной турбулентности в анизотропной геометрии, Кочурин Е.А.	319
Исследование заместительной адсорбции пленки железа на поверхности серебра, Мамонова М.В., Макаричева А.С.	320
Магнитный переход в $3d$ -подрешетке интерметаллидов $\text{GdMn}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Si}$ для $x = 0 - 1$, Мухачев Р.Д., Лукоянов А.В.	321
Электронная структура аналога железного сверхпроводника BaCo_2P_2 , Павлов Н.С., Некрасов И.А., Евтушинский Д.В.	322
Орбитальная магнитная восприимчивость двумерной сурьмы в слабых магнитных полях в рамках приближения сильной связи, Пушкарев Г.В., Яковлев И.А., Прищенко Д.А., Мазуренко В.Г., Руденко А.Н.	323
Дисперсия фононов в нецентросимметричном микрополярном кристалле, Kishine J., Овчинников А.С., Терещенко А.А.	324
Четырёхножная спиновая трубка с фрустрирующим обменным взаимодействием: свободная энергия и определение основного состояния, Тимофеева А.С., Бострем И.Г., Овчинников А.С.	325

<i>Jmulti</i> – программа для моделирования реннингеровских отражений, <i>Устюгов А.М., Козловская К.А.</i>	326
Угловые возбуждения в двумерном топологическом изоляторе с киральной сверхпроводимостью на треугольной решетке, <i>Федосеев А.Д., Шустин М.С.</i>	327
Электронная структура и магнитные свойства соединений FeAlO_3 и FeSiO_3 , <i>Чернов Е.Д., Лукоянов А.В.</i>	328
Структура и динамика решетки $\text{Nd}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$: <i>ab initio</i> расчет, <i>Чернышев В.А., Глухов К.И., Агзамова П.А.</i>	329
Спин-зарядовые флуктуации в проблеме реализации топологических фаз в сильно коррелированных сверхпроводящих системах, <i>Шустин М.С., Злотников А.О.</i>	330
Первопринципные молекулярно-динамические исследования свойств газовых гидратов, <i>Юнусов М.Б., Хуснутдинов Р.М., Мокшин А.В.</i>	331
Биофизика	333
Возрастные изменения состава и структуры костей крыс, <i>Григорьева С.В., Усачёв В.А., Хацко С.Л., Кулеш Н.А., Сёмкин М.А.</i>	335
Влияние структуры поверхности на формирование остеозамещающей ткани, <i>Коробенков М.В., Киселева Т.А.</i>	336
Использование барообработки для повышения всхожести семян солодки уральской, <i>Кругликов Н.А., Быструшкин А.Г., Беляев А.Ю.</i>	337
Авторский указатель	339

ВСТУПИТЕЛЬНАЯ СТАТЬЯ

ДВАДЦАТЬ ПЕРВАЯ ШКОЛА-СЕМИНАР

*Не покупают никакой еды —
Все экономят вынужденно деньги:
Холера косит стройные ряды, —
Но люди вновь смыкаются в шеренги.
Закрит Кавказ, горит «Аэрофлот»,
И в Астрахани лихо жгут арбузы, —
Но от станка рабочий не уйдет,
И крепнут все равно здоровья узы.
Убытки терпит целая страна,
Но вера есть, все зиждется на вере, —
Объявлена смертельная война
Одной несчастной, бедненькой холере.
На трудовую вахту встал народ
В честь битвы с новоявленной порчей, —
Но пасаран, холера не пройдет,
Холере — нет, и все, и бал окончен!*
В.С. Высоцкий, «Холера»

Не хочется в очередной раз напоминать о коронавирусе, но от этого никуда не деться, так как практически все события 2020 года так или иначе связаны с ним. Есть поверье, что високосный год приносит несчастья. В январе наступившего 2020 года еще ничего не предвещало пандемии, обрушившейся на нас в феврале и продолжающейся до сих пор. 2020 год оказался тяжелым годом как для отдельного человека, так и для страны и мира. Людям пришлось перестроить свою жизнь, возникли новые стереотипы поведения, кажется, что мир уже никогда не станет таким, каким он был раньше. Наступление эры всеобщей цифровизации ускорилося. Множество конференций перешло в онлайн формат, люди начали учиться и работать на удаленке.

Свою вступительную статью я начал с песни В.С. Высоцкого «Холера», посвященной вспыхнувшей на Черноморском побережье СССР в 1970 году эпидемии холеры. Ситуация в 1970 году напоминала нынешнюю. Астрахань, Керчь и Одесса были закрыты на полный карантин, еще в 15 городах выявлены отдельные случаи страшного заболевания (в Волгограде более 30). В масштабах всего СССР через обсервацию прошло около 180 тысяч человек. Но эпидемия была побеждена, и сейчас практически никто не помнит об этом событии. Вспомнил я о происшествии 1970 года для того, чтобы показать, что все в мире преходяще, лет через 5–10, перечитывая эту статью, мы будем удивляться, вспоминая события 2020 году. Я уверен, Ковид–19 вскоре будет побежден!

В связи с создавшейся осенью напряженной эпидемиологической обстановкой, мы не стали переводить СПФКС–21 в онлайн режим, а перенесли СПФКС–21 с ноября 2020 на март 2021 года. Из ваших писем становится ясно, что все ратуют за проведение СПФКС–21 «вживую», ни один участник не написал о своем желании, чтобы школа прошла онлайн. Каковы шансы проведения весной школы–семинар в старом формате? На мой взгляд достаточно большие. Сейчас нет абсолютного запрета на проведение массовых мероприятий (есть только ограничения по заполняемости залов), заболеваемость в стране пошла на спад, началась массовая вакцинация населения, достаточно много людей уже приобрело иммунитет.

Можно найти в переносе сроков проведения и другие плюсы. Периодически проходящие конференции после своего имени имеют уточнение — год или номер конференции. Раньше год проведения и номер СПФКС отличались на 1 (СПФКС-21 должна была пройти в 2020). Это вызывало постоянную путаницу. Часто задавали вопросы об ошибке в обозначении, среди предложений по улучшению работы школы не раз в шутку предлагали отдохнуть год, чтоб устранить эту разницу в цифрах. Перенос сроков проведения сдвинул нумерацию, теперь номер школы и номер года проведения совпадают, и в дальнейшем проблем с нумерацией не должно возникать. Будем считать, что ковид-19 помог выполнить это ваше желание. Перенос на раннюю весну дает возможность покататься на лыжах и коньках (на базе отдыха есть прокат и крытый каток), погулять по лесу, подышать весенним воздухом, послушать капель. Ориентируясь на ваши отзывы после проведения СПФКС-21 будет принято решение, когда лучше проводить школы-семинары, весной или осенью.

Несмотря на все трудности прошедшего года, на СПФКС-21 зарегистрировалось 344 человека, тезисов принято к публикации — 295. По зарегистрировавшимся участникам цифра близка к рекорду 2019 года (рис. 1), а по принятым тезисам установлен новый рекорд, прошлый был установлен аж в 2013 году.

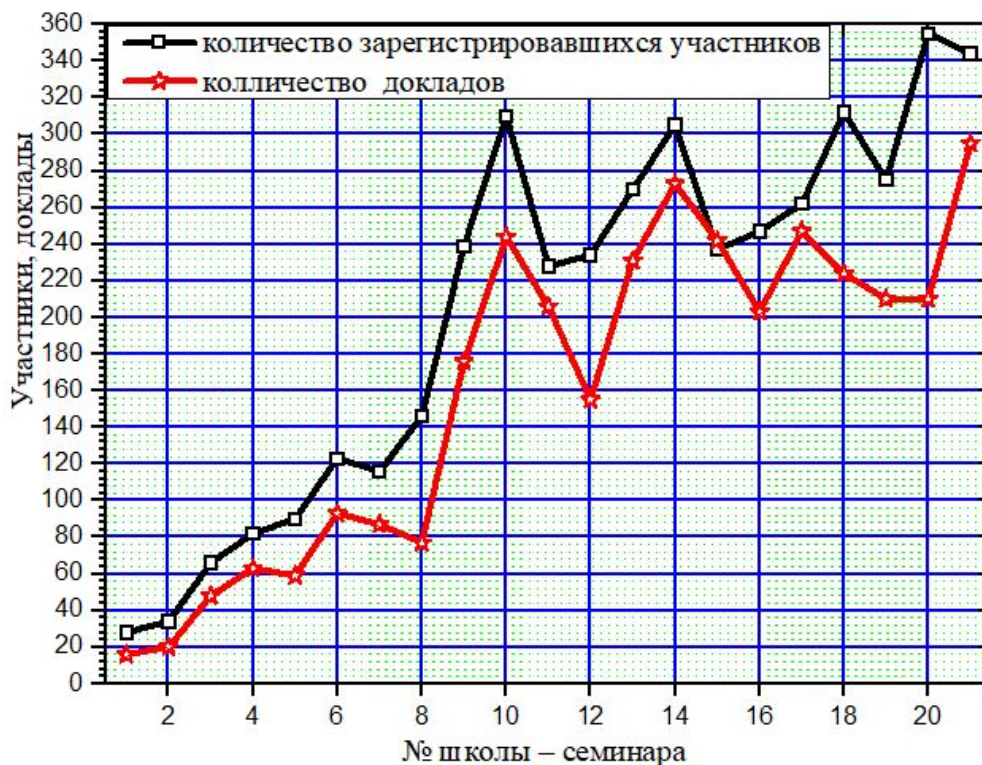


Рис. 1. Динамика изменения числа участников и докладов на СПФКС.

Нам очень дорого, что в такой непростой момент вы не забываете про школу-семинар, что хотите на нее приехать. Прошедшая СПФКС-20 была юбилейной, прошла она на подъёме, и этот уровень проведения мы постараемся сохранить и на СПФКС-21. Из нововведений, запланирована публикация отдельным выпуском журнала Физика твердого тела 25 статей по материалам школы-семинара. Два новых члена программного комитета, Адлер Гамзатов (г. Махачкала) и Ксения Чичай (г. Калининград), организуют специализированные секции, посвященные магнитокалорическому эффекту и работе на установках класса мегасайенс. На секции приглашены ведущие специалисты, работающие в этих направлениях. На школе-

семинаре запланировано проведение 37 лекций, которые представят лектора из 26 организаций Екатеринбурга, Москвы, Санкт–Петербурга, Челябинска, Калининграда, Махачкалы, Казани, Новосибирска, Черногловки, Ижевска, Омска, Вроцлава (Польша).

От традиций СПФКС отказываться мы тоже не собираемся. Вас ждет теплая, дружеская, творческая, рабочая атмосфера, обширный и интересный досуг, захватывающие доклады и жаркие дискуссии, интеллектуальные беседы за чашкой кофе и ночные игры в мафию, традиционный костер и зимний футбол, ребусы и загадки, встречи со старыми друзьями и знакомства с новыми, и еще очень и очень многое. Мы ждем вас на СПФКС–21!

Традиционно я хочу поблагодарить всех, кто приложил руку к организации этого Дела — школы–семинара СПФКС. СПАСИБО ВАМ! Хочется выделить всех до одного и поблагодарить всю дружную команду оргкомитета за самоотверженный труд, неугасающий энтузиазм и преданность Делу! Ну а участникам СПФКС хочу сказать: «Двери оргкомитета открыты для всех! Если вам нравится СПФКС, если хотите повариться в этом котле, если хотите почувствовать, что такое организация Всероссийской школы–семинара СПФКС, приходите, мы будем рады новым людям!»

Цели, поставленные перед школой–семинаром:

- 1) обучение участников, повышение их профессионального уровня, расширение научного кругозора;
- 2) объединение молодежи, создание нового круга общения, установление научных связей;
- 3) приобретение опыта научного общения, участия и организации конференций;
- 4) создание определенного психологического климата, помогающего молодым участникам лучше раскрыть свои личность и талант, почувствовать свою научную значимость.

*Председатель оргкомитета
школы-семинара СПФКС-21
к.ф.-м.н. С.А. Гудин*

АНАЛИТИЧЕСКИЙ ОТЧЕТ О XX ЮБИЛЕЙНОЙ ВСЕРОССИЙСКОЙ ШКОЛЕ-СЕМИНАРЕ ПО ПРОБЛЕМАМ ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

1. Общая статистическая информация

XX Юбилейная Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-20) проводилась с 21 по 28 ноября 2019 г. на б/о «Солнечный остров» в с. Мостовское Верхнепышминского района Свердловской области. Организаторами СПФКС-20 являлись Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН (ИФМ УрО РАН), Институт теплофизики УрО РАН, Институт электрофизики УрО РАН, Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Уральское отделение Российской Академии наук, ООО «Сигнифика» при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, ИФМ УрО РАН, УрФУ.

Школа-семинар СПФКС-20 проводилась в формате научной конференции с элементами образовательной направленности. Большинство участников СПФКС-20 составили молодые сотрудники, студенты и аспиранты институтов РАН и высших учебных заведений России. С целью повышения квалификации, расширения кругозора молодых специалистов, а также привлечения молодых ученых к исследованиям по актуальным научным тематикам (в том числе поддерживаемым РФФИ, см. ниже анализ тематики научной программы) были организованы лекции, посвященные широкому спектру проблем фундаментального, технологического и прикладного характера. В качестве лекторов (приглашенных докладчиков) выступили ведущие ученые РАН, университетов и институтов Москвы, Красноярска, Омска, Казани, Екатеринбурга, Калининграда, Махачкалы, Новосибирска, Сыктывкара и др. Общее количество зарегистрированных участников школы-семинара составило 298 человек. Состав участников: 4 академика РАН и 3 члена-корреспондента РАН, 29 докторов наук, 91 кандидат наук, 171 молодой учёный без степени. Всего в ходе проведения школы-семинара было сделано 230 докладов, из них: лекций (приглашенных докладов) — 30, устных докладов (кратких сообщений) — 102, стендовых докладов — 98. Всего в СПФКС-20 участвовали докладчики из 17 городов РФ, представляющие 45 научных и образовательных учреждений.

Использование оргкомитетом электронной системы онлайн-регистрации и обработки заявок на участие в конференции позволяет существенно улучшить процессы учета и обработки статистических данных. Результаты обработки этой информации можно сопоставлять с данными за предыдущие годы, прослеживая временную динамику различных показателей (см. таблицы 1-4, все цифры приведены согласно фактической программе конференции и сборнику тезисов докладов). Дополнительная информация, включающая научную программу, а также видеозаписи лекций и фотоархивы СПФКС-20 и предыдущих конференций, размещена в сети Интернет на сайте Совета молодых ученых ИФМ УрО РАН по адресу <http://smu.imp.uran.ru/spfks>.

Как следует из вышеприведенных данных, большая часть участников конференции является молодыми учеными. В ходе конференции были проведены конкурсы студенческих и аспирантских докладов, победители конкурса награждены дипломами СПФКС-20, а его результаты выложены на сайте школы-семинара. Как количественное, так и процентное соотношение лекций, устных и стендовых докладов за последние несколько лет меняется незначительно, что объясняется стабильным форматом мероприятия и одинаковым общим временем сессий.

Таблица 1. Категории докладов.

Год	Всего	Лекции	Устные	Стеновые
2007	77	19 (25%)	39 (51%)	19 (25%)
2008	176	19 (10.8%)	73 (41.5%)	49 (27.8%)
2009	244	27 (11.1%)	83 (34.0%)	119 (48.8%)
2010	206	24 (11.7%)	63 (30.6%)	95 (46.1%)
2011	155	19 (12%)	46 (29.3%)	55 (35%)
2012	231	27 (11.7%)	73 (31.6%)	86 (37.2%)
2013	273	27 (10%)	78 (28.6%)	106 (38.8%)
2014	223	20 (9%)	76 (33%)	59 (26%)
2015	203	23 (11%)	60 (29%)	55 (27%)
2016	240	26 (10%)	71 (29%)	87 (36%)
2017	224	27 (12%)	89 (40%)	91 (41%)
2018	210	29 (14%)	108 (51%)	73 (35%)
2019	230	30 (13%)	102 (44%)	98 (43%)

Таблица 2. Персональный состав докладчиков.

Год	Члены РАН	Доктора наук	Кандидаты наук	Аспиранты, уч. без степени*	Студенты
2007	3 (4%)	5 (6%)	22 (29%)	34 (44%)	13 (17%)
2008	3 (1.7%)	5 (2.8%)	35 (19.9%)	85 (48.3%)	48 (27.3%)
2009	3 (1.2%)	8 (3.3%)	41 (16.8%)	88 (36.1%)	82 (33.6%)
2010	3 (1.5%)	12 (5.8%)	31 (15%)	119 (58%)	40 (19.4%)
2011	2 (1.3%)	11 (7%)	25 (16%)	85 (54%)	32 (20.4%)
2012	4 (1.7%)	17 (7.4%)	51 (22.1%)	117 (50.6%)	43 (18.6%)
2013	2 (1%)	14 (5.1%)	72 (26.4%)	135 (49.5%)	52 (19%)
2014	3 (1.3%)	16 (7%)	56 (24.5%)	120 (52.4%)	37 (16.2%)
2015	2 (1%)	17 (8%)	42 (20%)	88 (43%)	55 (27%)
2016	4 (1.7%)	16 (6.7%)	62 (25.8%)	103 (43%)	55 (22.8%)
2017	1 (0.5%)	13 (5.8%)	61 (27%)	95 (42%)	54 (24%)
2018	3 (1.4%)	19 (9%)	82 (39%)	63 (30%)	43 (20.5%)
2019	7 (3%)	20 (8.7%)	66 (28.7%)	99 (43%)	41 (17.8%)

* Колонка с обозначением «Аспиранты и уч. без степени» включает в себя всех докладчиков, не вошедших в другие колонки.

Благодаря многолетнему плодотворному взаимодействию оргкомитета с администрацией ИФМ УрО РАН и Уральского федерального университета (включая дополнительную финансовую поддержку), учащиеся и сотрудники этих организаций в последние годы в сумме составляют около половины от общего количества докладчиков (51% в 2018 г., 51% в 2019 г.). Как следует из таблицы 3, за последние 10 лет суммарный процент докладчиков из организаций Екатеринбурга составляет примерно 60%-70% (67% в 2018 г., 66% в 2019 г.) от общего количества. Как количественный, так и процентный состав участников из других регионов России растет пятый год подряд. Таким образом, оргкомитетом созданы условия для развития межрегионального и международного научного сотрудничества, а молодые российские ученые имеют возможности для обмена результатами исследований.

Таблица 3. Географический состав докладчиков (организации, страны, города).

Год	ИФМ	ИТФ	ИЭФ	УрФУ	Россия*	Иностр. участн.**	Екатеринбург
2007	33 (43%)	6 (8%)	н/д	25 (32%)	8 (10%)	н/д	69 (90%)
2008	41 (23%)	12 (7%)	н/д	31 (18%)	70 (40%)	4 (2.3%)	94 (53.4%)
2009	59 (24%)	15 (6%)	12 (5%)	53 (22%)	78 (32%)	3 (1.2%)	150 (61%)
2010	52 (25%)	14 (7%)	8 (4%)	51 (25%)	76 (37%)	3 (1.5%)	127 (61%)
2011	51 (32%)	11 (7%)	3 (2%)	39 (25%)	50 (32%)	2 (1.3%)	105 (67%)
2012	71 (31%)	15 (7%)	8 (3.5%)	41 (18%)	86 (37%)	2 (0.9%)	144 (62%)
2013	67 (25%)	12 (5%)	8 (3%)	73 (27%)	99 (36%)	4 (1.5%)	173 (61%)
2014	60 (26%)	11 (5%)	15 (7%)	50 (22%)	84 (37%)	7 (3%)	145 (63%)
2015	56 (27%)	13 (6%)	12 (6%)	72 (35%)	49 (24%)	2 (1%)	155 (75%)
2016	54 (22%)	14 (6%)	16 (7%)	84 (35%)	67 (28%)	3 (1.2%)	176 (72%)
2017	63 (20%)	15 (5%)	12 (4%)	76 (24%)	94 (31%)	16 (5%)	202 (64%)
2018	77 (28%)	16 (6%)	12 (4%)	62 (23%)	90 (33%)	8 (3%)	185 (67%)
2019	88 (30%)	20 (7%)	14 (5%)	62 (21%)	101 (34%)	1 (0.5%)	196 (66%)

* Колонка «Россия» в таблице 3 не включает участников из Екатеринбурга.

** В колонку с обозначением «Иностр. участн.» включены зарегистрированные участники из других стран.

2. Анализ тематики научной программы конференции

Таблица 4. Распределение тематики докладов по секциям за последние 4 года.

Секция / Год	2015	2016	2017	2018	2019
Магнитные явления	43 (21%)	61 (25.1%)	39 (16,6%)	48 (21.7%)	46 (20%)
Фазовые переходы и крит. явления	12 (5.8%)	19 (7.8%)	20 (9%)	27 (12.2%)	31 (13.5%)
Проводимость и транспорт	24 (12%)	16 (6.6%)	12 (5.4%)	16 (7.2%)	26 (11.3%)
Оптика и спектроскопия	10 (5%)	12 (4.9%)	23 (10.3%)	11 (4.9%)	9 (3.9%)
Резонансные явления	2 (1%)	7 (2.9%)	8 (3.6%)	6 (2.7%)	3 (1.3%)
Структурные и механические св-ва	18 (8.7%)	21 (8.6%)	29 (13%)	22 (10%)	29 (12.6%)
Неразрушающий контроль	9 (4.4%)	8 (3.3%)	5 (2.2%)	3 (1.4%)	7 (3%)
Теплофизика	19 (9.2%)	17 (7%)	14 (6.3%)	21 (9.5%)	22 (9.7%)
Электрофизика	10 (5%)	9 (3.7%)	6 (2.8%)	9 (4.1%)	6 (2.6%)
Наноматериалы	34 (17%)	34 (14%)	37 (16.5%)	13 (5.8%)	13 (5.7%)
Биофизика	4 (1.9%)	7 (2.9%)	2 (0.9%)	9 (4.1%)	10 (4.3%)
Теория КС	15 (7.3%)	32 (13.2%)	26 (11.6%)	16 (7.2%)	20 (8.7%)
Сверхпроводимость и ФНТ	2 (1%)		2 (0.9%)	10 (4.5%)	8 (3.5%)

Как следует из таблицы 4, популярность секции «Магнитные явления» на СПФКС традиционно превосходит все остальные направления (21.7% от общего количества докладов в 2018 г. и 20% от общего количества докладов в 2019 г.), что связано в первую очередь с преобладанием данной тематики как в ИФМ УрО РАН, так и в других организациях уральского региона. Доклады в данной секции затрагивали фундаментальные основы магнетизма, а также касались прикладных аспектов.

На открытии школы-семинара СПФКС-20 с приглашенными докладами выступили член-корреспондент РАН Салютин Виктор Иванович «Химические элементы в медицине» и д.т.н. Куркин Михаил Иванович «Новая квантовая модель спиновых подрешеток».

На СПФКС-20 в секции «Магнитные явления» с приглашенными докладами выступили профессор Васьковский В.О. «Физико-технологические основы формирования функциональных свойств плёночных нанокомпозитов для магнитомикроэлектроники» из УрФУ (г. Екатеринбург), а также молодой ученый из Балтийского федерального университета им. И. Канта (г. Калининград) Чичай К.А. «Скирмионы в магнитных материалах». Васьковский В.О. в своем докладе рассказал о новых материалах, перспективных для микроэлектроники: пленочных структурах с обменным смещением, искусственных мультиферроиках металл/полимер, гранулированных пленках. Чичай К.А. рассказала о магнитных вихрях намагниченности (скирмионах) и перспективах их использования в устройствах хранения информации. На секции также были сделаны устные и стендовые доклады, в которых прозвучали результаты исследований магнитокалорического эффекта в сплавах с различным стехиометрическим составом. Сообщалось о магнитных свойствах быстрозакаленных лент нового состава, композиционных материалов на основе редкоземельных металлов, низкоразмерных фрустрированных магнетиках, об обменном взаимодействии между зёрнами нанокристаллических сплавов.

Как и на предыдущих конференциях, была проведена отдельная сессия по теплофизике (9.7% докладов от общего количества докладов). Секция по теплофизике была преимущественно представлена докладами научных сотрудников и аспирантов из Института теплофизики УрО РАН (г. Екатеринбург). С приглашенными докладами от ИТФ УрО РАН выступили Скрипов Павел Владимирович, Решетников Александр Васильевич. Институт физики им. Х.И. Амирханова, ДагНЦ РАН (г. Махачкала) с приглашенным докладом представил Абдулагатов Ильмутдин Магомедович. Доклад Скрипова П.В. был посвящен обсуждению пионерских экспериментальных исследований теплофизических свойств околокритических и сверхкритических флюидов, а также перспектив применения сверхкритических флюидных сред в технологических процессах. В докладе Решетникова А.В. обсуждались результаты опытов по истечению вскипающих воды и этанола при различных скоростях вращения завихрителя. Актуальность данного исследования связана с проблемой безопасности элементов энергетического оборудования и с широкой сферой применения закрутки потока в различных технологических процессах. В устных докладах участников секции прозвучали результаты исследований теплофизических свойств различных жидкостей в стабильном и неустойчивом состояниях.

Секция «Биофизика» объединила в себе работы, сделанные на стыке трех научных направлений — биологии, медицины и физики. Доклады в данной секции расширяют научный кругозор и, как правило, вызывают интерес у физиков. На секции с приглашенными докладами выступили представитель Института органического синтеза им. академика И.Я. Постовского (г. Екатеринбург) Дёмин Александр Михайлович «Функционализация Fe_3O_4 магнитных наночастиц векторными пептидами» и представитель Ботанического сада УрО РАН (г. Екатеринбург) Быструшкин Андрей Геннадьевич «Эволюция — как это было на самом деле». Лекция Дёмина А.М. была посвящена магнитным наночастицам на основе оксидов железа, часто используемым в дизайне диагностических и терапевтических препаратов для лечения и мониторинга онкологических заболеваний. Быструшкин А.Г. сообщил о последних достижениях ученых-биологов в области исследований процессов эволюции растений и животных за многомиллиардный период на планете Земля.

Доклады секции «Электрофизика» были посвящены теоретическим основам и экспериментальным результатам исследований электрических свойств материалов и конструкций. На секции с приглашенными докладами выступили представители Института электрофизики УрО РАН (г. Екатеринбург): Каменецких Александр Сергеевич «Вакуумно-плазменные

методы нанесения покрытий» и Осипов Владимир Васильевич «Создание и исследование высокопрозрачных керамик».

В секции «Неразрушающий контроль» прозвучали лекции представителя Института физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН профессора Я.Г. Смородинского о роли неразрушающих методов в организации безопасной эксплуатации опасных производственных объектов, а также представителя коммерческой организации ООО «НПЦ «ВТД» о внутритрубной диагностике магистральных трубопроводов. Устные доклады касались развития магнитной методики контроля механических напряжений в стальных объектах и контроля качества пайки токоведущих соединений электрических машин большой мощности.

Обширная секция «Структура и механические свойства твердых тел» (12.6% докладов от общего количества докладов) была представлена приглашенным докладом Дегтярева Михаила Васильевича (ИФМ УрО РАН) о влиянии температуры деформации на структурные превращения при сдвиге под давлением, приглашенным докладом член-корреспондента РАН Макарова Алексея Викторовича (ИФМ УрО РАН) о роли Д.И. Менделеева в развитии черной металлургии и металловедения на Урале, приглашенным докладом Волкова Алексея Юрьевича (ИФМ УрО РАН) о влиянии атомного упорядочения на физико-механические свойства сплавов медь-золото, приглашенным докладом Заякина Олега Вадимовича (Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург) о перспективах развития металлургии ферросплавов в Российской Федерации. Тематики устных и стендовых докладов были посвящены изучению различных интеркалатных соединений, материалов с эффектом памяти формы, тонких пленок, мультислойных структур, монокристаллов и наночастиц, влиянию барообработки на сохраняемость пищевых продуктов.

Доклады секции «Наноматериалы» были посвящены вопросам синтеза и изучения свойств слоистых и объемных наноструктур на основе железа, кремния, редкоземельных металлов и композитов.

Доклады секции «Оптика и спектроскопия» были посвящены изучению оптических свойств новых материалов, а также спектроскопическим исследованиям (ЯМР, XANES, XPS, рамановская спектроскопия и др.) чистых элементов, а также двойных и тройных соединений с различной стехиометрией. На секции выступил представитель г. Троицк Болдырев Кирилл Николаевич с лекцией «Применения терагерцовой спектроскопии в физике твердого тела». В докладе отмечалось, что помимо применений в области физики твердого тела, терагерцовые волны применяются в медицине, биологии, системах безопасности, пищевой промышленности и других областях народного хозяйства.

На объединенной секции «Сверхпроводимость, проводимость и транспортные явления» были представлены доклады, посвященные изучению проводящих свойств сверхпроводников, в том числе высокотемпературных, а также полупроводниковых соединений и материалов, электрических свойств сплавов Гейслера и тонких пленок. С лекциями на секции выступили представитель Уральского федерального университета имени Б.Н. Ельцина Москвин Александр Сергеевич «Природа высокотемпературной сверхпроводимости купратов», представитель Казанского (Приволжского) федерального университета (г. Казань) Ларионов Игорь Александрович «Температурные зависимости электросопротивления, коэффициента холла и термо-эдс нормальной фазы оптимально допированных высокотемпературных сверхпроводников» и представитель Института физики микроструктур РАН (г. Нижний Новгород) Савинов Денис Александрович «Экспериментальное наблюдение S фазы в тонких пленках ВТСП». Москвин А.С. в своем докладе сделал обзор последних экспериментальных данных о различных физических свойствах нормального и сверхпроводящего состояния ВТСП купратов, а также новых подходов к описанию механизма формирования их необыч-

ных свойств. Лекция Савинова Д.А. была посвящена обзору основных свойств сверхпроводников. Сообщено о имеющейся микроскопической модели сверхпроводников. Также были сообщены последние экспериментальные данные о формировании S фазы в грязных сверхпроводниках d типа при постепенном уменьшении средней длины свободного пробега носителей тока.

На секции «Теория конденсированного состояния» были представлены доклады с результатами теоретических расчетов и моделирования структуры, магнитных, оптических, проводящих и других свойств различных соединений и систем. По уже сложившейся за последние годы традиции, устные теоретические доклады были вынесены в параллельную секцию, на которой авторам предоставлялась возможность более подробно (без жесткого ограничения по времени) представить свой доклад. На секции с приглашенными докладами выступили: Розенфельд Евгений Владимирович «Влияние структуры энергетического спектра и entangling and non-entangling interactions на фазовую диаграмму в приближении среднего поля» (ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург), Михеенков Андрей Витальевич «Непрерывные переходы в локальной структуре спиновой жидкости» (Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный), Васин Михаил Геннадьевич «Медленные и немонотонные релаксационные процессы в эвтектических расплавах» (Институт физики высоких давлений им. Л.В. Верещагина РАН, Москва), Прудников Павел Владимирович «Моделирование спиновых систем, суперкомпьютерные и квантовые вычисления» (Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, г. Омск), Рыльцев Роман Евгеньевич «Эффективные взаимодействия в теории конденсированного состояния: от твердых сфер до нейронных сетей» (Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург).

На школе-семинаре СПФКС-20 был проведен круглый стол на тему «Цифровая трансформация в России и мире». Представитель ИТ-индустрии Давыдов Александр Анатольевич рассказал о переменах, грядущих в обществе с внедрением новых цифровых технологий и инструментов. Он ответил на вопросы о плюсах и минусах цифровизации, о роли компаний-разработчиков программного обеспечения в изменении сферы услуг и трансформации рабочих мест в различных отраслях экономики.

Традиционно в субботу и воскресенье на СПФКС-20 проводилась стендовая секция, в которой большой процент докладов был сделан студентами, аспирантами и молодыми учеными ведущих высших учебных заведений и научных организаций России (представлено 98 докладов).

Большинство представленных на конференции докладов направлены на решение наиболее актуальных, с точки зрения мировой науки, проблем физики конденсированных сред и вполне соответствуют мировому уровню исследований по указанным выше тематикам, некоторые работы ведутся по проектам с участием как отечественных, так и зарубежных специалистов. Конференция традиционно охватывает широкий спектр тематик физики конденсированного состояния вещества, что связано с желанием привлечь как можно большее число молодых ученых России и уральского региона, в частности. Многие доклады на СПФКС-20 делались представителями сложившихся и известных в России на сегодняшний день научных школ, которые помнят свои корни и ведут политику преемственности поколений. В таких коллективах молодые научные кадры пополняются, в основном, за счет студентов ВУЗов. Отметим лишь нескольких представителей таких коллективов: Прудников П.В. (Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, г. Омск), Болдырев К.Н. (Институт спектроскопии РАН, г. Москва), Шустин М.С. (Институт физики СО РАН, г. Красноярск), Волосников Д.В. (Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург).

Анализируя степень взаимного соответствия проблематики докладов, поддержанных РФФИ, и перечня упомянутых выше актуальных проблем физики конденсированного состояния вещества, можно отметить следующее: грантами РФФИ в 2019 г. было поддержано 51% от общего количества докладов, в 25% докладов указаны другие источники финансирования. Общее количество докладов, имеющих грантовое финансирование, составляет 76%. Это указывает на высокую актуальность работ, проводимых участниками и представленными в докладах на СПФКС-20, а также значительную поддержку Российским фондом фундаментальных исследований научной активности в области физики конденсированного состояния вещества. На заключительном заседании в выступлениях участников конференции и членов оргкомитета отмечалось значительное число интересных докладов и их высокий научный уровень, отличная организация научных сессий. По итогам проведения СПФКС-20 было принято решение о проведении следующей, двадцать первой Всероссийской школы-семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-21) в 2020 г.

*Отчёт составлен С.А. Гудиным, А.Н. Сташковым,
А.А. Прониным, Н.Н. Гапонцевой, С.В. Гудиной*

ЛЕКЦИИ

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В ЦИКЛИЧЕСКИХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

А.М. Алиев

Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
e-mail: lowtemp@mail.ru

Технология твердотельного охлаждения, в частности, технология, основанная на использовании магнитокалорического эффекта (МКЭ), в настоящее время рассматривается как экологически чистая и энергетически эффективная альтернатива традиционной парожидкостной технологии. Материалы для практического использования в реальных холодильных машинах должны обладать целым набором физических свойств. Основным требованием к таким материалам является наличие большой величины магнитокалорического эффекта при относительно небольшом изменении магнитного поля. До недавнего времени не уточнялось, при каких условиях должен наблюдаться большой магнитокалорический эффект. Учитывая, что большинство материалов с гигантским МКЭ — это материалы с магнитоструктурными фазовыми переходами первого рода, то величина МКЭ при первом и последующих циклах приложения магнитного поля часто оказываются существенно разными, в силу необратимого характера магнитоструктурных фазовых переходов в магнитных полях. Даже при обратимых фазовых переходах, магнитокалорические свойства материалов могут изменяться с изменением частоты приложенного магнитного поля. Соответственно, возникает необходимость исследования магнитокалорических свойств в циклических магнитных полях.

В связи с этим, в настоящее время разработаны различные варианты методов исследования магнитокалорических свойств материалов в циклических магнитных полях. В данной работе приводится краткий обзор классических методов измерения МКЭ, а также подробно рассматриваются современные методы измерения магнитокалорического эффекта в циклических магнитных полях. Приводится также описание источников постоянных и переменных магнитных полей, использующихся для исследования МКЭ в циклических магнитных полях. В работе обсуждаются преимущества и недостатки методов измерения в постоянных и переменных магнитных полях.

Делается краткий обзор результатов исследования магнитокалорических свойств различных материалов в циклических магнитных полях, и обсуждаются перспективы их использования в технологии твердотельного охлаждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФ (грант № 18-12-00415) и РФФИ (грант № 20-52-00047).

НЕЭРМИТОВЫ ВЕЙЛЕВСКИЕ ФЕРМИОНЫ ТИПОВ 3 и 4

З.З. Алисултанов

Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
e-mail: zaur0102@gmail.com

В работе [1] были предложены вейлевские фермионы нового поколения. Такого типа точки возникают при общем описании наклонного вейлевского спектра в терминах формализма тетрадного поля теории гравитации. Из базовых соображений стандартной квантовой механики вытекает, что такая ситуация может быть описана методом функций Грина и гамильтонов подход тут не применим. В оригинальной работе [1] было высказано предположение, что вейлевские точки нового поколения могут быть следствием сильных многочастичных эффектов. Мы же показали, что такие фермионы все же можно описывать с помощью гамильтониана, однако, он оказывается неэрмитовым. Более того, гамильтониан нового типа может возникнуть уже в рамках одночастичной задачи при общем построении зонной структуры вейлевских полуметаллов. Для исследования свойств такого гамильтониана мы развили общую теорию неэрмитовых квантовых систем, в частности, нашли необходимое и достаточное условие действительности собственных значений произвольного гамильтониана в самой общей форме. Мы исследовали свойства такого гамильтониана, а также особенности гильбертова пространства для исследуемой системы. Мы предложили как минимум два возможных одночастичных механизма возникновения гамильтониана, описывающего вейлевские фермионы нового поколения.

Доклад будет содержать обзор топологических электронных систем, в частности, основных идей неэрмитовой топологической зонной теории.

1. J.J. Nissinen, G.E. Volovik, *Pis'ma v ZhETF* **105**, 442 (2017).

МУЛЬТИКАЛОРИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ И ЭФФЕКТЫ

А.А. Амиров

Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия

Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

e-mail: amiroff_a@mail.ru

В последние годы значительно вырос интерес к поиску и исследованию материалов, в которых наблюдаются гигантские калорические эффекты (КЭ) различной природы, в связи с возможностью их практического использования в альтернативных традиционным, энергоэффективных и экологически безопасных системах охлаждения, использующих в качестве элементной базы твердотельные соединения. Известны магнитокалорический (МКЭ), электрокалорический (ЭКЭ), барокалорический (БКЭ) и эластокалорический (ЭлКЭ) эффекты, природа возникновения которых обусловлена изменениями температуры и энтропии при изменении величин соответствующих внешних магнитных, электрических или упругих полей. Одним из современных и активно исследуемых в последние годы направлений в физике конденсированного состояния является подход, основанный на идее использования парных КЭ. Основанный на наблюдении хотя бы двух из известных КЭ подход к исследованию термодинамических свойств материалов получил название «мультикалорический».

Мультикалорическим эффектом называется явление, заключающееся в обратимом изменении температуры (энтропии) вещества под воздействием двух или более внешних полей (магнитное, электрическое, механическое напряжение) в адиабатических (изотермических) условиях. Материалы, демонстрирующие эти эффекты, получили объединительный термин «мультикалорики» и рассматриваются в качестве перспективной основы для улучшения эффективности энергетических систем, основанных на одиночных калорических эффектах.

На сегодняшний день не существует общепринятой классификации мультикалориков, однако она, очевидно, может быть аналогична классификации мультиферроиков. Можно выделить: а) «природные» мультикалорики — однофазные соединения, природа калорических и мультикалорических эффектов в которых связана с магнитным, электрическим упорядочением и их взаимосвязью со структурой, а также магнитоэлектрическим взаимодействием; б) искусственные мультикалорики — композитные структуры различного типа связности, калорические и мультикалорические эффекты в которых являются продуктом свойств каждой из компонент, а также результатом их межфазного взаимодействия.

В настоящее время в экспериментальных исследованиях мультикалорических эффектов можно выделить следующие тенденции: а) поиск, получение и исследование новых композитных структур (смесевых керамических, полимерных), цилиндрических, слоистых, состоящих из компонентов с исходными высокими значениями калорических эффектов, магнитострикционных и пьезоэлектрических параметров в области комнатных температур; б) развитие и совершенствование экспериментальных методик одновременного приложения постоянных и циклических внешних полей (магнитного, электрического и механического) в «природных» мультикалориках. Описанные подходы помогут в поиске и прогнозировании новых структур с высокими значениями мультикалорических эффектов для энергетики и стрейнтроники.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (проект № 18-79-10176).

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПОЛУЧЕНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Т.Б. Беккер

Институт геологии и минералогии СО РАН, Новосибирск, Россия
Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

e-mail: bekker@igm.nsc.ru

В докладе будет рассмотрена актуальность исследования фазовых равновесий при выращивании функциональных кристаллов боратов из высокотемпературных растворов методом TSSG (top-seeded solution growth): эффективных нелинейных преобразователей лазерного ИК излучения в видимый и УФ диапазон (низкотемпературная модификация бората бария β -BaB₂O₄ (BBO), триборат лития LiB₃O₅ (LBO)), поляризаторов УФ и терагерцового излучения (метаборат бария-натрия Ba₂Na₃(B₃O₆)₂F) и др.

Будет освещено изучение фундаментальных характеристик (спектроскопических, оптических) нового класса боратов с «антицеолитным» Ba₁₂(BO₃)₆⁶⁺ каркасом и их взаимосвязь со структурой, собственными и примесными дефектами. В противоположность цеолитам они характеризуются положительно заряженным каркасом и отрицательно заряженными гостевыми компонентами в его полостях. Установлено, что: 1) симметрия гостевой анионной группы определяет отсутствие или наличие центра симметрии; 2) степень заполнения каркаса анионными группами в значительной степени влияет на свойства кристаллов, такие как, поглощение излучения в видимом и УФ-диапазоне (цвет кристаллов может изменяться от бесцветного до темно-коричневого), положение края поглощения, дихроизм, температура плавления и др. (рис. 1). Наличие каналов в структуре «антицеолитных» фторидоборатов позволяет контролировать их свойства путем изменения типа и количества гостевых анионных групп [1,2].

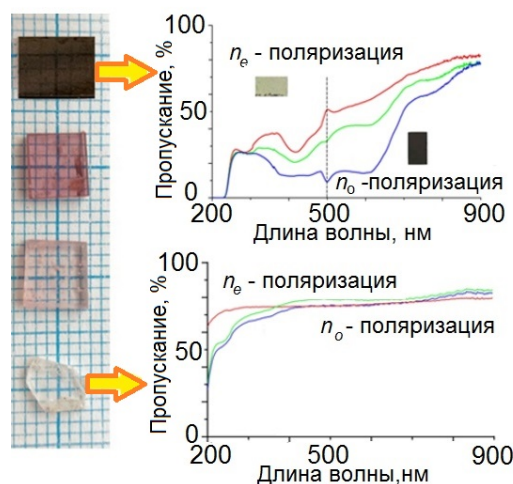


Рис. 1. Влияние собственных дефектов структуры на оптические свойства кристаллов Ba₁₂(BO₃)₆[BO₃][LiF₄] [1].

1. T. V. Bekker *et al.*, *Inorganic Chemistry* **59**, 18 (2020).
2. T. V. Bekker *et al.*, *Crystal Growth & Design* **20**, 6 (2020).

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТАЛЛОРГАНИЧЕСКИХ ПЕРОВСКИТОВ В ФОТНИКЕ И ФОТОВОЛЬТАИКЕ

К.Н. Болдырев*, В.Е. Аникеева, О.И. Семенова, М.Н. Попова

Институт спектроскопии РАН, Москва, Троицк, Россия

*e-mail: kn.boldyrev@gmail.com

Органо–неорганические гибридные галогенидные перовскиты привлекают неослабевающий интерес исследователей из-за их огромного потенциала в качестве функциональных материалов, в первую очередь, для солнечных элементов, а также для светодиодов, лазеров, фотодетекторов и термоэлектрических устройств. Было показано, что эффективность преобразования энергии солнечных элементов на основе гибридных перовскитов уже превышает 20% с преимуществом экономичных методов низкотемпературного синтеза. Исключительная функциональность гибридных галогенидных перовскитов обусловлена такими физическими свойствами, как варьируемая ширина оптической запрещенной зоны, высокий коэффициент поглощения, длительные времена жизни носителей и их высокая подвижность, большая длина диффузии и низкая теплопроводность.

Многие из этих функциональных свойств тесно связаны с особенностями фононного спектра и электрон-фононным взаимодействием. Электрон-фононное взаимодействие определяет релаксацию горячих носителей, их подвижность, время рассеяния носителей заряда. Более конкретно, в перовскитах галогенида свинца носители заряда взаимодействуют с низкоэнергетическими фононами, связанными с подрешеткой галогенида свинца. Это взаимодействие также объясняет высокая устойчивость к дефектам по отношению к электронно-дырочной рекомбинации. Сверхнизкая теплопроводность объяснялась малыми групповыми скоростями из-за ультрамягких акустических мод и коротким временем жизни фононов, обусловленным сильной акусто-оптической связью. Сверхбыстрый ориентационный беспорядок молекулярных диполей действует как дополнительный источник рассеяния для оптических фононов, а также для носителей заряда. Все это обеспечивает невероятные перспективы практических применений таких материалов в широких технологических областях.

В лекции будут приведен обзор физических свойств, возможных и уже реализованных применений, а также дана новая информация, полученная нами [1] в результате высокопрецизионных спектроскопических исследований гибридных металлорганических перовскитов.

Работа представлена при поддержке Российского Научного Фонда (грант № 19-72-10132).

1. K.N. Boldyrev, V.E. Anikeeva, O.I. Semenova, M.N. Popova, *Infrared Spectra of the $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ Hybrid Perovskite: Signatures of Phase Transitions and of Organic Cation Dynamics*, The Journal of Physical Chemistry C, accepted DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c06103.

КРИТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА БОЗОННОЙ СИСТЕМЫ ВБЛИЗИ КВАНТОВОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

М.Г. Васин

Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Москва, Россия
e-mail: dr_vasin@mail.ru

Рассмотрена неравновесная динамика фазового перехода Березинского–Костерлица–Таулеса в представлении модели Синус–Гордона с использованием техники Келдыша–Швингера и методов ренормгруппового анализа. Показано, что в высокотемпературном пределе результаты рассмотренной динамической теории согласуются с известными результатами стационарного подхода. Обсуждается отклонение критического поведения системы от «канонического» в квантовом пределе при уменьшении разупорядочивающего действия ослабевающих тепловых флуктуаций $T \rightarrow 0$.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 18-02-00643.

РЕНТГЕНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПОГЛОЩЕНИЯ: ЭЛЕМЕНТО-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫЙ МЕТОД ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ

А.А. Велигжанин

Российский научный центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
e-mail: veligzhanin_aa@nrcki.ru

Поглощение рентгеновских лучей вызвано преимущественно фотоэффектом, при котором образуется свободный фотоэлектрон. В зависимости от энергии рентгеновского кванта меняется энергия и импульс фотоэлектрона и он служит пробником для исследования локальной структуры вокруг атома, на котором произошло поглощение.

Рентгеновская спектроскопия поглощения объединяет два метода исследования — спектроскопия прикраевой тонкой структуры спектров поглощения (NEXAFS — Near Edge X-ray Absorption Fine Structure) и спектроскопия протяженной тонкой структуры спектров поглощения рентгеновских лучей (EXAFS — Extended X-ray Absorption Fine Structure). Метод XANES чувствителен к химическому состоянию возбуждаемого атома, к структуре электронных уровней вблизи уровня Ферми и к симметрии локального атомного окружения. Метод EXAFS позволяет измерять расстояния до нескольких ближайших координационных сфер и оценивать тип и количество соседей, окружающих возбуждаемый атом.

В лекции обсуждаются физические основы метода, особенности его реализации с использованием экспериментального оборудования, получаемые из экспериментальных данных параметры структуры, методы обработки экспериментальных данных и используемое программное обеспечение. Подробно обсуждаются особенности конструкции станции «Структурное Материаловедение», реализующей метод рентгеновской спектроскопии поглощения на Уникальной научной установке «Курчатовский источник синхротронного излучения».

В качестве примеров использования метода приводятся задачи исследования эволюции структуры гетерогенных катализаторов, определения локальной координации атомов в перспективных магнитных материалах и исследование изменений локальной структуры в металлических стеклах, подвергнутых мегапластической деформации.

АДДИТИВНОЕ ПРОИЗВОДСТВО ПОСТОЯННЫХ МАГНИТОВ И МАГНИТНЫХ СИСТЕМ

А.С. Волегов^{1*}, А.С. Болячкин¹, В.Е. Мальцева¹, И.В. Окулов^{1,2}¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия²Университет Бремена, Бремен, Германия*e-mail: alexey.volegov@urfu.ru

Потребность в постоянных магнитах последние десятилетия ежегодно возрастает приблизительно на 10 – 15%. Постоянные магниты стали неотъемлемой частью высокотехнологичных устройств, среди которых роботы, электродвигатели, ветрогенераторы, левитирующие устройства, аналитическое оборудование и др. Постоянные магниты могут быть использованы без применения магнитопроводов и концентраторов магнитного потока только в простых случаях, поскольку они хоть и являются «бесплатными» источниками магнитных полей, но создают не те конфигурации, которые необходимы для функционирования сложных устройств. По этой причине кроме постоянных магнитов используется большое количество магнитомягких материалов, выполняющих роль магнитопроводов и концентраторов магнитного потока. Это приводит к увеличению массогабаритных характеристик магнитных систем. Решить эту проблему, по крайней мере частично, может возможность изготовления постоянных магнитов произвольных форм. Но существующие технологии не позволяют производить такие магниты без обработки резанием с соответствующей деградацией магнитных свойств магнитов и создания большого количества отходов. Также магнитомягкие элементы вследствие рассеяния магнитного потока требуют увеличения объема постоянных магнитов по сравнению с необходимым. Создание постоянных магнитов и магнитных систем произвольной формы возможно методами аддитивных технологий. На этом пути возникает ряд трудностей как принципиального, так и технологического характера. Доклад будет посвящен этим трудностям и возможным способам их преодоления. Будут показаны основные мировые и российские достижения в области печати постоянных магнитов и магнитных систем.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ МК-1746.2020.2.

АНИЗОТРОПНЫЙ СВЕРХПРОВОДЯЩИЙ ПЕРЕХОД В КВАЗИДВУМЕРНЫХ ПРОВОДНИКАХ

П.Д. Григорьев^{1,2*}, К.К. Кешарпу², В.Д. Кочев², А.П. Орлов³, А.В. Фролов³, А.А. Синченко^{3,4}

¹Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Черноголовка, Россия

²Национальный Исследовательский Технологический Университет «МИСиС», Москва

³Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия

⁴Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

*e-mail: grigorev@itp.ac.ru

Во многих соединениях сверхпроводимость зарождается неоднородно выше T_c в виде изолированных островков, например, из-за легирования или конкуренции различных электронных неустойчивостей. При этом очень часто относительное падение электрического сопротивления $\Delta\rho_i/\rho_i$ выше T_c максимально вдоль оси наименьшей проводимости, например, перпендикулярно проводящим слоям, что долго оставалось загадкой. В стандартной теории флуктуаций [1] $\Delta\rho_i/\rho_i$ почти изотропно, поскольку области флуктуаций имеют размер порядка длины когерентности и ту же анизотропию, как и проводимость в степени $1/2$. Легко объяснить [1] обратную ситуацию, когда сверхпроводимость возникает в двумерных слоях и распространяется поперек слоев из-за эффекта Джозефсона, который легко подавляется температурой; в этом случае падение сопротивления (и даже T_c) максимальны вдоль проводящих слоев, что тоже наблюдается в слоистых сверхпроводниках.

Наблюдаемое анизотропное падение сопротивления выше T_c , с максимальным эффектом вдоль оси наименьшей проводимости, мы качественно описываем в Максвелловском приближении эффективной среды [2], обобщенном нами на анизотропные проводники [3-8]. Наблюдаемая анизотропия перехода в нулевое сопротивление [7,9,10] объясняется [8] когда рассматриваются конечные размеры и (в нашем случае) плоская форма образцов. Наши результаты позволяют объяснить многие эксперименты [3-10] и оценить объемную долю и типичные форму и размер сверхпроводящих островков вдали от поверхности образца. Например, мы наблюдаем [7] и объясняем [8], что температура сверхпроводящего перехода в тонких образцах FeSe значительно повышается при уменьшении их толщины с 300 до 50 нм. Наши модель и расчеты применимы ко многим неоднородным сверхпроводникам, включая высокотемпературные, где размер сверхпроводящих островков много больше длины когерентности.

Работа выполнена при частичной поддержке проектов РФФИ № 17-29-10007, 19-02-01000 и № 21-52-12027.

1. А.А. Варламов и А.И. Ларкин, Теория флуктуаций в сверхпроводниках. — Москва: «Добросвет» (2007).
2. S. Torquato, Random Heterogeneous Materials. — New York: Springer (2002).
3. A. A. Sinchenko, P. D. Grigoriev, A. P. Orlov, A. V. Frolov, A. Shakin, D. A. Chareev, O. S. Volkova, and A. N. Vasiliev, Phys. Rev. B **95**, 165120 (2017).
4. P.D. Grigoriev, A.A. Sinchenko, K.K. Kesharpu *et al.*, JETP Lett. **105**, 786 (2017).
5. S.S. Seidov, K.K. Kesharpu, P.I. Karpov, P.D. Grigoriev, Phys. Rev. B **98**, 014515 (2018).
6. K.K. Kesharpu, V.D. Kochev, P.D. Grigoriev, Crystals **11**, 72 (2021);
7. T. I. Mogilyuk, P. D. Grigoriev, K. K. Kesharpu, I. A. Kolesnikov, A. A. Sinchenko, A. V. Frolov, and A. P. Orlov, Physics of the Solid State **61**, 1549 (2019).
8. V.D. Kochev, K.K. Kesharpu, P.D. Grigoriev, Phys. Rev. B **103**, 014519 (2021).
9. N. Kang, B. Salameh, P. Auban-Senzier, D. Jerome, C. R. Pasquier, and S. Brazovskii, Phys. Rev. B **81**, 100509(R) (2010).
10. A. Narayanan, A. Kiswandhi, D. Graf, J. Brooks, and P. Chaikin, Phys. Rev. Lett. **112**, 146402 (2014).

ЛОГАРИФМИЧЕСКИЕ ФРАКТАЛЫ В ЖИВОЙ ПРИРОДЕ

С.В. Григорьев

Петербургский Институт Ядерной Физики, НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия
Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
e-mail: grigoryev_sv@npi.nrcki.ru

Метод малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновского (МУРН и МУРР) излучения используют для классификации фрактальных объектов в трехмерном пространстве на масштабах от 1 нм до 10^4 нм. Многочисленные эксперименты с использованием МУРН и МУРР и теория рассеяния нейтронного излучения на фракталах показали, что используя степенной закон интенсивности рассеяния от переданного импульса ($I \sim q^{-\Delta}$), можно различить класс поверхностных фракталов ($3 < \Delta < 4$) от класса объемных фракталов ($2 < \Delta < 3$) [1]. Кроме того, можно обнаружить трехмерные объекты с логарифмической фрактальной подразмерностью — логарифмические фракталы ($\Delta = 3$) [2]. Примерами фрактальных объектов окружающего нас мира служат обычная сажа (объемный фрактал) [1], дерево (логарифмический фрактал) [3], ядро биологической клетки, укладка хроматина в котором характеризуется переходом на шкале размеров от объемного к логарифмическому фракталу, зависящим от типа клетки [4,5].

Мы обнаружили, что логарифмическая корреляционная функция — не редкость для структурной организации форм жизни. В природе структуры часто строятся многократным повторением одного и того же морфогенетического механизма, например ветвления. Дерево — наиболее наглядный пример его реализации. Оно растет таким образом, что на каждом следующем уровне ветвления сумма квадратов радиусов ветвей равна квадрату радиуса ветвления, которое было разделено: свойство, которое давно заметил Леонардо да Винчи [3]. Мы предложили простой экспериментальный способ демонстрации структуры дерева как логарифмического фрактала. Удивительно, что укладка хроматина в ядре биологической клетки подчиняется тому же закону распределения вещества — логарифмическому фракталу.

В лекции используются материалы курса по малоугловому рассеянию нейтронов, читаемого автором в рамках магистерской программы «Физика конденсированного состояния на установках мега-класса», на физическом факультете Санкт-Петербургского государственного университета.

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 20-12-00188.

1. J. Teixeira, J. Appl. Cryst. **21**, 781 (1988).
2. E.G. Iashina, S.V. Grigoriev, Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques **11**, 897 (2017).
3. J.O. Indekeu, G. Fleerackers, Physica A **261**, 294 (1998).
4. E.G. Iashina, E.V. Velichko, M.V. Filatov, W.G. Bouwman, C.P. Duif, A. Brulet, S.V. Grigoriev, Phys. Rev. E **96**, 012411 (2017).
5. Е.Г. Яшина, С.В. Григорьев, ЖЭТФ **156** 540–544 (2019).

КИРАЛЬНЫЕ СПИНОВЫЕ СТРУКТУРЫ В НЕЦЕНТРОСИММЕТРИЧНЫХ КУБИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ

С.В. Григорьев

Петербургский Институт Ядерной Физики, НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия
e-mail: grigoryev_sv@npfi.nrcki.ru

В современной физике конденсированного состояния важное место занимают исследования сложных магнитных структур, таких как геликоидальные магнетики. Магнитные свойства таких соединений определяются несколькими взаимодействиями. Сильное изотропное обменное взаимодействие, наряду со слабыми релятивистскими взаимодействиями, нарушающими спиновую симметрию, приводят к появлению сложных магнитных структур. К сложным явлениям следует отнести возникновение длиннопериодических спиралей определенной киральности, появление «скирмионных решеток», фазовых переходов с несколькими параметрами порядка. Хрупкое равновесие, обусловленное этими взаимодействиями, может быть легко нарушено внешними силами: давлением, магнитным полем, химическим замещением, что приводит к квантовым фазовым переходам по давлению, магнитному полю или концентрации.

В докладе представлены исследования нецентросимметричных кристаллов, являющихся геликоидальными кубическими магнетиками (MnSi , $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, FeGe , MnGe и др.) Эти соединения кристаллизуются в кубическую нецентросимметричную структуру с пространственной группой $P2_13$. Магнитная конфигурация представляет собой спиновую спираль с периодом от 30 до 3000 Å, которая образуется в результате баланса двух взаимодействий — симметричного ферромагнитного обмена и антисимметричного взаимодействия Дзялошинского–Мория.

Идеальным зондом для исследования таких систем является малоугловая дифракция поляризованных нейтронов. В докладе будут приведены многочисленные примеры таких исследований. С помощью этого метода были построены фазовые диаграммы соединений (магнитное поле – температура) и оценены параметры описанных выше взаимодействий, исследованы критические явления при переходе из парамагнитного состояния в упорядоченную спираль, изучена магнитная структура гексагональной сверхрешетки спинов (скирмионной решетки). В заключение будет сделана попытка обобщения результатов экспериментов в рамках феноменологической модели Бака–Йенсена.

ДИЗАЙН НАНОМАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ И ТЕРАПИИ РАКА

А.М. Дёмин

Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: demin@ios.uran.ru

Онкологические заболевания занимают 2 место в причинах смерти после заболеваний кровеносной системы. Поэтому в настоящее время огромное внимание уделяется созданию новых высокоэффективных терапевтических и диагностических препаратов, способных специфично накапливаться в опухолевых тканях. В данных целях разрабатываются материалы на основе наночастиц золота, серебра, углеродных, полимерных, магнитных наночастиц (МНЧ), квантовых точек, липосом и др., обладающих уникальными свойствами, которые позволяют реализовать специфические методы диагностики или лечения рака.

Наночастицы (НЧ) с размерами меньше 200 нм способны накапливаться в опухолевой ткани в гораздо большей степени, чем в нормальных тканях, благодаря так называемому эффекту повышенной проницаемости и удерживания (EPR), связанного с дефектным строением стенок сосудов опухоли. Другой отличительной особенностью опухолевых клеток является наличие на их поверхности специфических рецепторов. Поэтому для повышения эффективности терапевтических и диагностических препаратов НЧ конъюгируют с так называемыми молекулярными векторами — биомолекулами, способными связываться с рецепторами, экспрессированными на поверхности опухолевых клеток, и за счёт этого в них накапливаться. В качестве молекулярных векторов используют антитела, аптамеры, пептиды, фолиевую кислоту.

Ещё одним отличительным функциональным отличием опухолевых тканей от нормальных является закисление межклеточного пространства. Так, зачастую скорость роста кровеносных сосудов в опухоли ниже скорости роста объёмов самой опухоли. Из-за этого опухолевые клетки в недостаточной степени снабжаются кислородом, в результате чего конечным этапом окисления глюкозы в них является молочная кислота, которая выводится в межклеточное пространство, создавая пониженный pH среды (< 7.4). pH-зависимые встраиваемые пептиды (pHLIPs) являются одним из новых типов пептидов с pH-зависимой трансмембранной активностью, способных встраиваться в мембрану клетки при снижении pH среды < 7.0 . pHLIPs могут быть использованы для специфичного и эффективного нацеливания лекарственных веществ, контрастных меток, генетического материала и др. в закисленные ткани. В докладе рассмотрены примеры синтеза полимерных наночастиц, конъюгированных с комплексом Gd (III), наночастиц золота, кремнезема и других материалов, модифицированных pHLIP и возможности их использования для диагностики и терапии рака. Особое внимание уделено получению наноконъюгатов pHLIP с магнитными наночастицами и их использованию в качестве МРТ-контрастных материалов. Ранее нами впервые были синтезированы МНЧ на основе Fe_3O_4 , модифицированные pHLIP, а также продемонстрирована их способность накапливаться в закисленных тканях в опытах *in vitro* и *in vivo* [1]. Позже было изучено накопление таких наноконъюгатов в солидных опухолях в зависимости от их размера [2] и pH [3], а также показана возможность их использования в качестве МРТ-контрастного агента.

Работа выполнена в рамках темы государственного задания на 2021 год (AAAA-A19-119011790130-3).

1. A.M. Demin, A.G. Pershina, K.V. Nevskaya *et al.*, RSC Adv. **6**, 60196 (2016).
2. A.G. Pershina, O.Ya. Brikunova, A.M. Demin *et al.*, Nanomedicine: NBM **23**, 102086 (2020).
3. A.G. Pershina, O.Ya. Brikunova, A.M. Demin *et al.*, Nanomedicine: NBM **32**, 102317 (2020).

ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ ЭФФЕКТИВНОЙ ПЕРЕРАБОТКИ ТЕХНОГЕННЫХ ОТХОДОВ ФЕРРОСПЛАВНОГО ПРОИЗВОДСТВА

О.В. Заякин*, В.И. Жучков, А.В. Сычев

Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: zferro@mail.ru

Российская Федерация — один из крупнейших мировых производителей ферросплавной продукции [1]. Ферросплавное производство является не только неотъемлемой частью экономики нашей страны, но и стратегически необходимой, особенно в сложившихся современных условиях при выполнении программы импортозамещения. Объемы образования отходов в виде шлаков, пылей, отсевов мелких фракций, шламов и состав этих продуктов зависят от применяемых шихтовых материалов и технологии производства [2,3]. Основными отходами являются шлаки, ежегодные объемы образования которых в РФ оцениваются более 800 тыс.т/год.

Для решения этой проблемы необходим междисциплинарный комплексный подход, связывающий не только ученых – металлургов и огнеупорщиков [4], но и экономистов, что позволяет сформировать основные направления и фундаментальные основы энергоресурсо-эффективной экологически безопасной для окружающей среды переработки и использования рассматриваемых отходов. Формируется база данных об основных физических, химических и функциональных свойствах отходов ферросплавного производства, их классификации и создании единого научного подхода к рациональному применению техногенного сырья в промышленности.

В результате комплексной научно-исследовательской работы сформирован массив данных об основных физико-химических характеристиках отходов главных видов ферросплавов (содержащих Mn, Cr и Si); предложены и научно обоснованы инновационные методы их эффективной переработки; дана эколого-экономическая оценка эффективности использования техногенных отходов ферросплавного производства. Междисциплинарный подход выполнен благодаря объединению усилий научных сотрудников трех организаций: в области металлургии — Института металлургии УрО РАН, экономики — Института экономики УрО РАН, химической технологии керамики и огнеупоров — УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина.

Разработанный комплексный метод оценки может лечь в основу новой инновационной наукоемкой отрасли реального сектора экономики, связанной с глубокой переработкой отходов ферросплавного производства, которая позволит минимизировать количество отходов, подлежащих захоронению, сократить объемы существующих шлакоотвалов [5], обеспечивая при этом ресурсоэнергосбережение и экологическую безопасность, преобразование отходов в ценные вторичные сырьевые ресурсы, новые материалы и изделия.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН и при поддержке гранта РФФИ № 18-29-24027.

1. Анализ рынка ферросплавов 2018, прогноз 2025. MetalResearch. [Электронный ресурс], (2018).
2. В.И. Жучков, А.В. Жданов, О.В. Заякин, Расплавы **3**, 29 (2006).
3. A.S. Kim, O.V. Zayakin, A.A. Akberdin, Yu.V. Kontsevoi, Russian Metallurgy **12**, 1148 (2010).
4. И.Д. Кащеев, К.Г. Земляной, М.С. Досекенов и др., Сб. тр. «Фундаментальные основы технологий переработки и утилизации техногенных отходов», 101 — Екатеринбург: ООО «ВИПЦ» (2012).
5. В.И. Жучков, О.В. Заякин, Расплавы **4**, 66 (2010).

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ПРОВОДИМОСТЬ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ В ТВЕРДОМ СОСТОЯНИИ

А.Д. Ивлиев

ФГАОУ ВО «Российский государственный профессионально-педагогический университет»,
Екатеринбург, Россия

e-mail: ad_i48@mail.ru

Кинетические свойства редкоземельных металлов (РЗМ) и их сплавов при высоких температурах (θ) имеют ряд отличий от свойств других переходных металлов. К таким особенностям следует отнести в первую очередь высокие значения удельного электрического сопротивления ρ и сравнительно низкие значения теплопроводностей λ . Политермы $\rho(\theta)$ рассматриваемых материалов имеют ярко выраженную отрицательную кривизну. Температурные зависимости теплопроводностей обнаруживают стремление к росту, а температурные зависимости температуропроводностей носят неубывающий характер. Отметим также, что политермы $\rho(\theta)$ и $\lambda(\theta)$ РЗМ и их сплавов при высоких температурах (выше комнатных) не образуют группы эквидистантных линий, как у прочих металлов, а представляют собой наборы пересекающихся кривых. В настоящей работе мы будем рассматривать свойства РЗМ иттриевой группы, то есть иттрий и тяжелые РЗМ от гадолиния по лютеций, исключая иттербий.

Опираясь на закон Видемана–Франца, можно сделать вывод, что в РЗМ и их сплавах перенос энергии обусловлен, в основном, электронным механизмом. Следовательно, объяснение наблюдаемых свойств связано с анализом температурных зависимостей $\rho(\theta)$.

Основными механизмами рассеяния электронов в РЗМ и их сплавах являются фононный, магнитный и примесный. В соответствии с правилом Маттиссена полное удельное электро-сопротивление ρ можно представить в виде:

$$\rho = \rho_L + \rho_M + \rho_r, \quad (1)$$

где ρ_L , ρ_M , ρ_r соответственно фононный, магнитный и примесный компоненты. РЗМ и их сплавы имеют сложную электронную структуру, содержащую несколько полос в зоне проводимости. Для качественного понимания сути рассматриваемых процессов достаточно рассмотреть две полосы (это модель Мотта): тяжелых (d -электронов) и легких (s -электронов). Анализ процессов рассеяния электронов на фонах позволяет получить следующее соотношение, описывающее $\rho_L(\theta)$ при высоких температурах

$$\rho_L = Z(\theta) \frac{\gamma^{1/3} \theta}{\theta_R^2 M^{4/3}}, \quad (2)$$

где γ — плотность, M — молярная масса проводника, $\theta(R)$ — кинетическая температура Дебая, $Z(\theta)$ — прочие параметры, включая зависящую от температуры плотность состояний d -электронов. Функция $Z(\theta)$ содержит такие параметры, которые оказываются практически одинаковыми для всех рассматриваемых РЗМ и их сплавов. Формула (2) описывает возрастающую зависимость $\rho_L(\theta)$, имеющую отрицательную кривизну. Магнитная составляющая сопротивления, как показывает анализ, уменьшается по мере нагрева в парамагнитной области температур. Примесная составляющая изменяется с температурой слабо и может рассматриваться как константа. В рамках рассматриваемого подхода находят объяснение наблюдаемые особенности температурных и концентрационных зависимостей рассматриваемых свойств РЗМ и их сплавов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 11-08-00275 и № 14-08-00228.

НОВЫЕ ТВЕРДОТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ С ФАЗОВЫМИ ПЕРЕХОДАМИ ДЛЯ АЛЬТЕРНАТИВНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

В.В. Коледов

Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия
e-mail: Victor_koledov@mail.ru

1) Мотивация работ по поиску новых твердотельных материалов и физических эффектов для создания альтернативных систем энергетики: холодильников, тепловых насосов, систем «захвата энергии» (energy harvesting), «тепловых вентиляей» или «выпрямителей», квантовых интерферометрических тепловых ключей и многих других, заключается в том, что эти, почти фантастические приборы и системы, могли бы стать реальностью, если бы реальностью оказалось создание практической тепловой машины с эффективностью близкой к идеальной «машине Карно». Несмотря на то, что идея обратимой тепловой машины сформулирована С. Карно 200 лет назад, она и в XXI веке остается инструментом для построений теоретиков, а не прибором для инженеров.

2) Для примера рассмотрим магнитокалорический эффект. Неожиданным в этом эффекте является то, что твердое тело, например, ферромагнетик вблизи точки Кюри, не просто изменяет свою температуру при включении поля (нагревается), а то, что он мгновенно охлаждается при его выключении. Это – как раз и есть «внутреннее охлаждение», необходимое для создания холодильника. Впрочем, этот эффект становится намного более привычным, если вспомнить, что также, мгновенно, охлаждается идеальный газ при адиабатическом расширении.

3) Термодинамика, это – удивительная наука, которая равнодушна к микроскопической природе вещества. Она позволяет количественно описать многие полезные явления, как в твердых телах, так и газообразных и жидких, как в однофазном состоянии, так и при фазовых превращениях. С ее помощью становятся более понятными и другие эффекты, такие как, эластокалорический, электрокалорический, эффект памяти формы, связанные с фазовыми превращениями в твердых телах во внешних полях. Хотя, конечно, их микроскопическая природа остается по-прежнему загадкой. Теоретики пока лишь пытаются найти подходы к решению задачи о вычислении свойств сплава или соединения по его составу.

4) Перечислим только несколько прорывных прикладных задач, которые могли бы изменить жизнь на нашей планете, если бы проблемы на пути создания устройств с предельной тепловой эффективностью были решены: нагрев помещений с коэффициентом эффективности процесса (не путать с КПД !) более 1000%, длительное и недорогое поддержание криогенных температур. Это, в свою очередь, откроет широкое применение сверхпроводимости, сильным магнитным полям на уровне десятков Тесла, и возможно, позволит создать магнитолевитационный вакуумный транспорт, соединяющий «космическую» скорость с рекордной низкой ценой доставки пассажиров и грузов и многое другое. В том числе, возможно будут созданы квантовые компьютеры, которые пока сами остаются всего лишь гипотезой, но обещают способность мгновенного решения задач, недоступных всем современным компьютерам за время жизни Вселенной..... Что если именно с их помощью удастся решить задачу о предсказании свойств твердотельных материалов по составу?

Работа поддержана грантом РФФИ 18-07-01321.

ИНЖЕНЕРИЯ НАНОСТРУКТУР ДЛЯ МЕДИЦИНСКОЙ СПИНТРОНИКИ

О.В. Коплак*, Р.Б. Моргунов

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия

*e-mail: o.koplak@gmail.com

Идея применения магниторезистивных сенсоров для биологии и медицины появилась недавно, но ее потенциал открывает широкие горизонты использования. В биомедицине одной из основных задач является разделение здоровых и больных клеток, которые можно сепарировать с помощью магнитных меток — ферромагнитных наночастиц инкорпорированных в клетки. Магниторезистивные структуры CoFeB/Ta/CoFeB были использованы в качестве сенсоров, которые благодаря локальному перемагничиванию одного из слоев полем рассеяния нано- или микрочастиц α -Fe₂O₃ и/или Fe₃O₄, Fe/Fe₃O₄ демонстрируют локальное изменение магнитосопротивления и сдвигают поля переключения спинного вентиля [1–3]. Методами атомно-силовой и магнитно-силовой микроскопии получены зависимости размера области перемагничивания платформы под наночастицами Fe/Fe₃O₄ от размера кластеров. Микромагнитным моделированием ООММФ определены ориентации локальных намагниченностей в слоях CoFeB под кластерами наночастиц и диаметр перемагниченной области в зависимости от магнитного момента и размера кластера [3]. Показаны принципы локальной инженерии поверхности многослойных структур CoFeB/Ta/CoFeB и GdFeCo/IrMn/Pt импульсами фемтосекундного лазера [4]. Была создана серия круглых ячеек микронного диаметра на поверхности платформ (рис. 1).

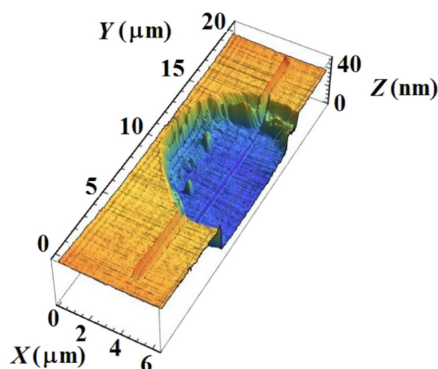


Рис. 1. Изображение ячейки на поверхности многослойной структуры GdFeCo/IrMn/Pt

Проведен контроль морфологии и механических свойств образованных ячеек. Адресное локальное утонение позволяет осуществлять локальный контроль ферромагнитного слоя. Локальные изменения намагниченности, обнаруженные эффектом Керра и магнитно-силовой микроскопией, указывают на наличие размагничивающего поля на границе ячейки. Величина которого позволяет удерживать микронные клетки внутри отдельной ячейки.

Работа поддержана грантом 2644.2020.2 Президента РФ для государственной поддержки ведущих научных школ.

1. O. Koplak, *et al.*, *Superlattices and Microstructures* **121**, 23 (2018).
2. R.B. Morgunov *et al.*, *Applied Surface Science*, **6**, 146836 (2020).
3. O. V. Коплак и др., *ЖЭТФ*, **158**, 4 (10), 693 (2020).
4. O. Koplak *et al.*, *Applied Surface Science* **493**, 470 (2019).

МЕТОДЫ СОЗДАНИЯ И ПРИМЕНЕНИЯ ВЫСОКИХ МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЙ ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАГНИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Ю.С. Кошкидько

Институт низких температур и структурных исследований ПАН, Вроцлав, Польша
e-mail: y.koshkidko@intibs.pl

Современное развитие науки и техники невозможно без использования сильных (высоких) магнитных полей. Сильными магнитными полями называют магнитные поля, напряженность которых превышает 50 кЭ (5 Тл), т.е. магнитные поля, которые превышают значения, создаваемые обычными электромагнитами со стальным сердечником [1]. Магнитные поля такой величины создаются сверхпроводящими магнитами, например, водоохлаждаемыми резистивными Биттеровскими магнитами (рис. 1), а также импульсными магнитами, которые не разрушаются после первого включения магнитного поля. Сильные магнитные поля используются в термоядерных установках, ускорителях элементарных частиц, в исследованиях на базе ядерного магнитного резонанса, в нейтронной физике и при охлаждении до температур ниже 1 кельвина. Немаловажным применением сильных магнитных полей являются фундаментальные исследования магнитных свойств перспективных магнитных материалов.

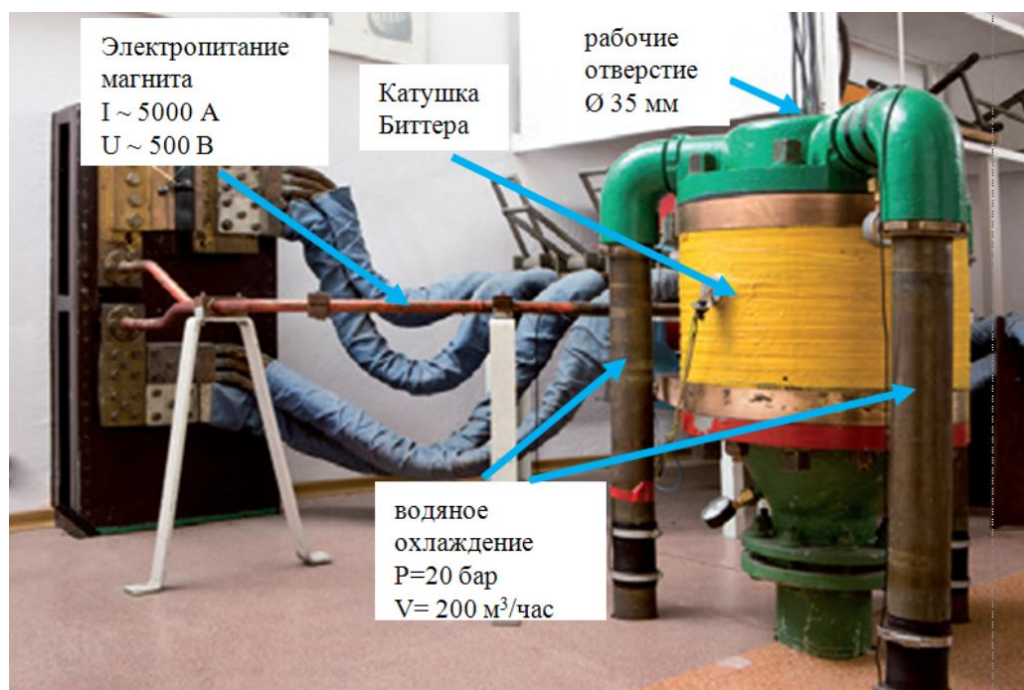


Рис. 1. Водоохлаждаемый резистивный Биттеровский магнит на 15 Тл [2].

В докладе будут рассмотрены как методы создания высоких магнитных полей, так и методы исследований перспективных материалов в высоких магнитных полях. Дана информация об основных мировых исследовательских центрах высоких магнитных полей. Обсуждены перспективы развития и применения высоких магнитных полей для научных и технологических целей.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и ВАНТ в рамках научного проекта № 20-58-54006.

1. D.H. Parkinson, B.E. Mulhall, *The Generation of High Magnetic Fields*, N.Y. (1967).
2. В.И. Нижанковский, В.И. Цебро, *УФН* **183**, 219 (2013).

РЕЗОНАНСНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В АКУСТО–МАГНИТО–ПЛАЗМОНИКЕ

Д.А. Кузьмин^{1*}, И.В. Бычков¹, В.В. Власов², В.Г. Шавров³, В.В. Темнов⁴¹Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия²Сыктывкарский государственный университет им. Питирима Сорокина, Сыктывкар, Россия³Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия⁴Institut des Molécules et Matériaux du Mans, Le Mans, France

*e-mail: kuzminda@csu.ru

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.

В основном, исследователи уделяют внимание характеристикам отраженного, прошедшего и распространяющегося света, а не характеристикам возбуждаемых в структуре плазмонов. Отдельный интерес представляет область современной магнитоакустики, где исследуется взаимодействие сверхкоротких (пикосекундных) упругих импульсов и лазерных (фemtосекундных) 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 настоящей работе изложено современное состояние в области указанных явлений и предложены пути решения некоторых из имеющихся проблем.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (гранты №№ 20-07-00466, 20-37-70038, 19-07-00246), Министерства высшего образования и науки РФ (ГЗ № 075-00250-20-03).

1. A. Pors *et al.*, *Nano Lett.* **15**, 791 (2015).
2. V.V. Temnov, *Nature Photonics* **6**, 728 (2012).
3. V.I. Belotelov *et al.*, *Nature Nanotechnol* **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).

ФАЗЫ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ В СПЛАВАХ

С.Г. Меньшикова^{1,2*}, В.В. Бражкин³¹ФГБУН «Удмуртский федеральный исследовательский центр», УрО РАН, Ижевск, Россия²ФГБОУ ВО «Удмуртский государственный университет», Ижевск, Россия³ФГБУН «Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина», РАН, Москва, Россия

*e-mail: svetlmensh@mail.ru

Развитие современных областей авиа-, ракетостроения и других наукоемких областей промышленности требует принципиально новых подходов при создании материалов нового поколения, обладающих одновременно комплексом необходимых служебных свойств. Сочетание различных экстремальных воздействий (сверхвысокие давления, кручение под давлением и равноканальное угловое прессование, сверхнизкие и сверхвысокие температуры, магнитные поля, сверхбыстрое охлаждение из расплава и др.) позволяет существенно расширить области метастабильных состояний и получать материалы с различной структурной иерархией: объемно-аморфной, квази- и нанокристаллической, и, соответственно, с разными свойствами.

Ключевым экстремальным параметром в настоящей работе является высокое давление в сочетании с высокой температурой и быстрой закалкой из расплава применительно к сплавам на основе алюминия типа Al-ПМ-РЗМ (ПМ-переходный, РЗМ-редкоземельный металлы). Сплавы данного типа как в литом, так и в аморфно-нанокристаллическом состояниях представляют большой интерес вследствие их высоких технологических свойств и широкого использования в различных областях промышленности.

Высокие давления достаточно давно и успешно используются для получения различных метастабильных фаз в сплавах, которые не удастся получить другими методами. Кроме формирования метастабильных фаз в сплавах, при быстром затвердевании расплава под высоким давлением можно ожидать увеличения взаимной растворимости компонентов, дробления и измельчения зерна, изменения механизмов кристаллизации и т.д. В разных системах высокое давление по-разному влияет на структуру и свойства сплавов. В результате получают сплавы с более высокими прочностью, пластичностью, сопротивлением коррозии и т.п. Основные типы камер высокого давления, используемых за рубежом и в России: камера «цилиндр–поршень», камера «тороид», наковальни Бриджмена и др. Для многих научных и практических целей фазу вещества высокого давления необходимо сохранять в нормальных условиях. Обычно для этих целей выбирают соответствующий режим обработки: снижают сначала температуру сжатого вещества, а затем давление. Вариации термобарических режимов получения материалов: затвердевание высокомолекулярных жидкостей в условиях постоянно действующего высокого давления (несколько ГПа) при скоростях охлаждения 10^3 град/с; плавление при невысоком давлении (0.5 – 1 ГПа), далее — резкое увеличение давления до 3 – 7 ГПа, что приводит к большому переохлаждению; импульсное давление в процессе затвердевания; сильная пластическая деформация и др. В зависимости от поставленных задач, предпочтительнее тот и иной метод.

Методом термобарической обработки расплава, при давлениях выше 7 ГПа и температурах выше 1770 К, в сплавах Al-ПМ-РЗМ получены новые кристаллические фазы. При выбранных условиях структура полученных образцов мелкокристаллическая, плотная, однородная с высокими прочностью и твердостью. Исследование позволяет сделать заключение о том, что метод высоких давлений является перспективным для получения новых соединений в сплавах, в том числе на основе алюминия.

С.Г. Меньшикова благодарит д.ф.-м.н. В.И. Ладьянова, магистранта УдГУ А.С. Данилову за помощь в выполнении исследования.

МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ КОЛЛЕКТИВНАЯ ДИНАМИКА МОДЕЛЬНОЙ ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ ПЛАЗМЫ

А.В. Мокшин*, И.И. Файрушин

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

*e-mail: anatolii.mokshin@mail.ru

Однокомпонентная плазма представляет собой наиболее подходящую многочастичную систему для развития микроскопической теории жидкости. Обусловлено это, главным образом, специфическим потенциалом межчастичного взаимодействия, а также достаточно большим массивом доступных экспериментальных данных и результатов молекулярно-динамического счета, которые могут быть использованы для проверки корректности теоретических выводов [1-4].

В настоящей работе будет представлена микроскопическая теория коллективной динамики частиц (ионов) однокомпонентной плазмы, где в качестве входных параметров используются лишь потенциал взаимодействия — потенциал Юкавы — и структурные характеристики — функция парного распределения частиц и структурный фактор. Будет показано, что микроскопическая теория реализуется на широком диапазоне волновых векторов, обобщает гидродинамическую теорию и воспроизводит известные гидродинамические выражения в длинноволновом пределе. Теория корректно воспроизводит все известные особенности спектров динамического структурного фактора для широкого диапазона волновых чисел, а также закон дисперсии акустических коллективных возбуждений в однокомпонентной плазме. Полученные теоретические результаты сопоставляются с результатами известных теоретических моделей и подходов.

Работа поддержана РФФИ (проект № 18-02-00407).

1. Z. Donko, G.J. Kalman and P. Hartmann, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 413101 (2008).
2. Yu.V. Arkhipov *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 045001 (2017).
3. J. Ortner, *Physica Scripta*, 69 (2000).
4. F. Graziani *et al.*, *Frontiers and Challenges in Warm Dense Matter* (Springer International Publishing, Switzerland (2014).
5. A.V. Mokshin and B.N. Galimzyanov, *J. Phys.: Condens. Matter* **30**, 085102 (2018).

ОСОБЕННОСТИ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ ВЫСОКОАНИЗОТРОПНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Д.С. Незнахин^{1*}, А.С. Болячкин¹, М.И. Барташевич¹, А.В. Андреев², Д.И. Горбунов³,

А.М. Барташевич¹, Д.И. Радзивончик⁴, А.В. Лукоянов^{1,4}, К.П. Скоков⁵

¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

²Институт физики Чешской академии наук, Прага, Чешская Республика

³Лаборатория сильных магнитных полей центра им. Гельмгольца, Розендорф, Германия

⁴Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

⁵Технический университет Дармштадта, Дармштадт, Германия

*e-mail: d.s.neznakhin@urfu.ru

Явление анизотропии намагниченности заключается в разнице величины намагниченности насыщения вдоль разных кристаллографических направлений, в частности, вдоль осей легкого и трудного намагничивания. Впервые теоретически предсказано в 1960 году [1], а экспериментально обнаружено только в 1971 [2]. Первые наблюдения делались на монокристаллах $3d$ металлов очень больших размеров, около 1 – 2 см, а величина эффекта не превышала 0,1% [3], что легко можно было списать на погрешность измерений. Современные методы магнитометрии демонстрируют возросшую точность измерений, поэтому в настоящее время нет необходимости синтезировать монокристаллы больших размеров. Так же были обнаружены высокоанизотропные соединения на основе $3d$ и редкоземельных металлов (РЗМ), в которых данное явление доходит до 15 – 20% [4,5], однако для его обнаружения необходимо проводить измерения в больших магнитных полях. Настоящая работа посвящена изучению роли $3d$ -подрешетки в формировании анизотропии намагниченности и магнитокристаллической анизотропии РЗМ- $3d$ интерметаллидов на примере системы RCo_3 и R_2Co_7 , где R — магнитонеактивный редкоземельный элемент. Данные соединения, с одной стороны, обладают высокой магнитной анизотропией и, как следствие, могут иметь большие значения анизотропии намагниченности насыщения, с другой стороны — для намагничивания их до насыщения нужны магнитные поля напряженностью до 140 кЭ. В настоящий момент разработана методика проведения измерений для установления анизотропии намагниченности насыщения с точностью не хуже 1% на небольших образцах. Данная методика учитывает такие важные факторы как форма образца, ориентация основных кристаллографических осей относительно внешнего магнитного поля и способ крепления.

На монокристаллах YCo_3 , $LuCo_3$ и Y_2Co_7 удалось обнаружить ярко выраженное явление анизотропии намагниченности. Разница величины намагниченности насыщения вдоль осей легкого и трудного намагничивания достигает 9%. В работе представлены температурные зависимости намагниченности насыщения, параметра анизотропии намагниченности и констант магнитокристаллической анизотропии K_1 и K_2 , определенных двумя различными методами: методом Саксмита–Томсона и модифицированным методом, учитывающим анизотропию намагниченности и парамагнитной восприимчивости.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФ № 19-72-00048.

1. E.R. Callen, J. Appl. Phys. **31**, S149 (1960).
2. G. Aubert and P. Escudier, J. Phys. **32**, C1-543 (1971).
3. R. Pauthenet, C. R. Acad. Sc. Paris, Serie II-13, t.297 (1983).
4. Е.В. Розенфельд и А.В. Королев, ЖЭТФ **108**, 862 (1995).
5. D.Yu. Karpenkov *et al.*, J. Alloys Compd. **741**, 1012 (2018).

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЕ АТОМИСТИЧЕСКОЕ МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ: ПОДХОДЫ, ОБЪЕКТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ, СОРЕВНОВАНИЕ ШКОЛ В НАСТОЯЩЕМ И ПЕРСПЕКТИВЫ В БУДУЩЕМ

Г.Е. Норман

НИУ Высшая школа экономики, Москва, Россия

e-mail: gnorman@hse.ru

Это прорывное направление теоретической физики на стыке с вычислительной физикой, вооружённое лучшими суперкомпьютерными технологиями. Рассмотрена принципиальная схема моделирования, состоящая из двух частей. В первой создаётся объект исследования: решается система уравнений движения для коллектива частиц, взаимодействующих друг с другом; потенциалы межчастичного взаимодействия могут быть: парными, многочастичными, включать разрывы и образование химических связей, находиться на каждом шаге численного интегрирования из теории функционала плотности. Во второй части схемы по найденным траекториям частиц и волновым функциям определяются свойства системы: классический подход для ионов, квантовый — для электронов.

Моделируются как равновесные системы, так и неравновесные, а также релаксация. Численные методы решения уравнений Ньютона и Шредингера для систем движущихся атомов и молекул, включая живые системы, — аппарат атомистического моделирования. Это универсальное «оружие», а цели любые. Решение невозможно без суперкомпьютеров. В качестве примера рассмотрены ионная проводимость диоксида циркония и переход кристаллического молекулярного водорода в полуметаллическое и далее в металлическое состояние при росте давления и сохранение металлического метастабильного состояния при снижении давления. Метод используется не только для расчёта количественных характеристик, но и для обнаружения новых эффектов.

Предсказательная сила подхода иллюстрируется на примере ежегодных промышленных конкурсов в США по расчету свойств практически важных жидкостей. Эти конкурсы организуются группой корпораций, лабораторий и обществ: Dow Chemical Company, NIST, ARL, American Chemical Society, American Institute of Chemical Engineers и др. На этих конкурсах заблаговременно, за год объявляется вещество и теоретикам предлагается рассчитать его некоторое свойство методами молекулярного моделирования вслепую, без знания результатов экспериментов, которые проводятся организаторами параллельно. При подведении итогов оргкомитет сопоставляет результаты присланных теоретических работ с полученными экспериментальными данными. Победители определяются по степени совпадения теории с экспериментом. В докладе обсуждается, за счёт понимания каких эффектов наша группа заняла первое место на конкурсе 2019 г.

Возможности современных суперкомпьютеров достаточно ограничены. Поэтому, а также в силу иерархии корреляционных длин и времён, атомистический подход следует дополнить многомасштабным подходом для выхода за пределы пространственных и временных масштабов, доступных атомистическому моделированию. Общая идея поясняется на моделировании добычи углеводородов: от поведения жидкости или газа на масштабе наноразмерных пор в горной породе и до течения через пористую среду и далее через трещины в пластах к скважине. Атомистический подход, дополненный дальнейшей надстройкой многомасштабной иерархической лестницы, становится магистральным направлением в современной науке.

Помимо самостоятельного значения, суперкомпьютерное атомистическое многомасштабное моделирование выводит наш коллектив на решение трёх «великих» проблем, которые, по мнению В.Л. Гинзбурга, нельзя обойти вниманием при обсуждении состояния и путей развития физики. В первой речь идёт о возрастании энтропии и необратимости. В нашем случае эта проблема неизбежно встает при анализе того, как в классической молекулярной динамике возникает необратимость и диссипация. Ответ следует искать в квантовой механике. Отсюда переходим ко второй проблеме — интерпретации и понимания квантовой механики. Эту проблему считаем центральной. Она даёт ключ к ответу и на третий вопрос — о связи физики с биологией и, конкретно, проблеме редукционизма. Для этого надо рассматривать живые системы в рамках атомистического многомасштабного подхода.

Доклад подготовлен в ходе работы в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ с использованием средств субсидии в рамках государственной поддержки ведущих университетов Российской Федерации «5 – 100».

МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ

П.В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

e-mail: prudnikovpv@omsu.ru

Возникновение стационарных неравновесных состояний в природе постоянно напоминает о проблемах динамического критического описания сложных систем, находящихся вдали от равновесного состояния [1]. Наномасштабная периодичность создает в магнитных мультислойных структурах мезоскопические эффекты пространственной спиновой корреляции с медленной релаксационной динамикой намагниченности при замораживании системы в неравновесном состоянии. По сравнению с объемными магнитными системами, в которых медленная динамика и эффекты старения проявляются вблизи критической точки, магнитные сверхструктуры с наномасштабной периодичностью дают возможность увеличить время релаксации за счет эффектов, связанных с увеличенной в этих структурах характеристической корреляционной длиной спин-спиновых корреляций.

В докладе будет представлено описание «необычных» динамических эффектов, которые могут проявляться в поведении мультислойных магнитных структур и фрустрированных неупорядоченных магнетиков [2].

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

Для проведения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН», Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН, Суперкомпьютерного центра МГУ им. М.В. Ломоносова.

1. T. Chou, K. Mallick, R.K.P. Zia, Rep. Prog. Phys. **74**, 116601 (2011).
2. I.S. Popov, A.P. Popova, P.V. Prudnikov, EPL **128**, 26002 (2019).

МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В ФИЗИКЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

Р.Е. Рыльцев^{1,2*}, Н.М. Щелкачев², И.А. Балякин¹¹Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия²Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Москва, Россия

*e-mail: rrylcev@mail.ru

В последние десять лет наблюдается революция в развитии и применении методов машинного обучения. Системы искусственного интеллекта стремительно совершенствуются и при решении многих задач уже достигают уровня, сравнимого или превышающего способности человека (распознавание образов и речи, настольные и компьютерные игры и т.д.). На волне такого бурного развития, методы машинного обучения все глубже проникают в различные сферы человеческой деятельности, в том числе и в науку. В докладе приводится обзор методов машинного обучения, наиболее активно использующихся в физике конденсированного состояния. Будут кратко рассмотрены основные принципы и модели машинного обучения, такие как нейронные сети, и изложены некоторые методологические особенности конструирования и обучения таких моделей. Затем будет рассмотрено применение данных подходов к решению некоторых наиболее актуальных задач физики конденсированного состояния, таких как автоматизация анализа экспериментальных и расчетных данных, предсказание свойств материалов по химическому составу, решение дифференциальных уравнений, решение решеточных статистических моделей и генерирование потенциалов для компьютерного моделирования. Основной акцент будет сделан на последней задаче, поскольку применение методов машинного обучения в компьютерном моделировании является наиболее революционной и перспективной областью современного вычислительного материаловедения. Будет изложен обзор основных подходов и методологических особенностей к генерированию потенциалов машинного обучения, таких как нейронные сети, ядерные методы и методы линейной регрессии, а также приведены примеры их применения к исследованию конкретных материалов [1-8].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант 18-12-00438).

1. J. Behler, J. Chem. Phys. **145**, 170901 (2016).
2. A. Singraber, J. Behler, C. Dellago, J. Chem. Theory Comput. **15**, 1827 (2019).
3. L. Zhang, J. Han, H. Wang, R. Car, W. E, Phys. Rev. Lett. **120**, 143001 (2018).
4. L. Zhang, D.-Y. Lin, H. Wang, R. Car, W. E, Phys. Rev. Materials **3**, 023804 (2019).
5. A.P. Thompson, L.P. Swiler, C.R. Trott, S.M. Foiles, G.J. Tucker, J. Comput. Phys. **285**, 316 (2015).
6. A.V. Shapeev, Multiscale Model. Simul. **14**, 1153 (2016).
7. R. Jinnouchi, F. Karsai, G. Kresse, Phys. Rev. B **100**, 014105 (2019).
8. F. Karsai, G. Kresse, M. Bokdam, Phys. Rev. Lett. **122**, 225701 (2019).

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РАСТВОРОВ ХЛАДАГЕНТОВ В КОМПРЕССОРНЫХ МАСЛАХ: К 75-ЛЕТИЮ ПРОФЕССОРА ВИТАЛИЯ ПЕТРОВИЧА ЖЕЛЕЗНОГО

П.В. Скрипов

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: pavel-skripov@bk.ru

Холодильник «Уралец», купленный родителями при переезде нашей семьи из общежития в квартиру, проработал 30 лет, вплоть до сдачи «коммерсантами» в металлолом линии электропередачи от нижнего склада под Ревдой до деревни Гусевка. По сути, это обстоятельство отражало высокий уровень научных и инженерных решений в разработке советских парокompрессионных систем. Но в 1987 году произошло событие, по существу предопределившее технологическую революцию в холодильном машиностроении: был принят Монреальский протокол. Этот документ запретил использование широко применяемых в промышленности галоидопроизводных хладагентов (хлорфторуглеродов) в новом холодильном оборудовании. Стало очевидным, что в развитии холодильной техники наступил новый этап, когда в ряд приоритетных показателей, наряду с коэффициентом полезного действия и холодопроизводительностью, вошли также экологические показатели, в частности, потенциал озонового разрушения.

Доклад посвящен 75-летию профессора Виталия Петровича Железного, яркого представителя Одесской теплофизической школы [1], хранителя традиций уникальной теплофизической лаборатории [2, 3] кафедры теплофизики и прикладной экологии Одесского технологического института холодильной промышленности (позднее переименованного в Одесскую государственную академию холода) с 50-летним стажем. Под его руководством защитились 20 аспирантов и соискателей, трое из них стали докторами наук.

В.П. Железный разработал системный подход к выбору альтернативных хладагентов. Он акцентировался на учете таких факторов, как влияние примесей компрессорного масла на теплофизические свойства рабочего тела, показатели эффективности компрессорной системы, особенности теплообмена в испарителе и конденсаторе. Основопологающей идеей для развития экспериментальных исследований и моделирования теплофизических свойств веществ, применяемых в холодильной технике, стал перевод лаборатории с изучения свойств хладагентов на изучение свойств более сложных, с теплофизической точки зрения, растворов хладагент/компрессорное масло. Было показано, что влияние примесей компрессорного масла в подавляющем числе случаев оказывает большее влияние на эффективность холодильного оборудования, чем выбор собственно альтернативного хладагента. Поэтому обоснованный выбор компрессорного масла является самостоятельной задачей. В этой связи, в лаборатории был создан комплекс экспериментальных установок для исследования фазовых равновесий, плотности, поверхностного натяжения, растворимости хладагентов в маслах, теплоемкости, исследования теплообмена и параметров эффективности компрессорных систем, а также блок установок для развития нанотехнологий, ориентированных на создание новых альтернативных рабочих тел и хладоносителей на базе уже применяемых в холодильной технике веществ.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 19-19-00115.

1. А.А. Вассерман, Г.К. Лавренченко, В.И. Недоступ, Технические газы **5**, 3, 2014.
2. В.П. Железный, Ю.В. Семенюк, Рабочие тела парокompрессионных холодильных машин: свойства, анализ, применение. — Одесса: Фенікс, 2012.
3. В.П. Железный, Ю.В. Семенюк, Теплофизические свойства растворов хладагентов в компрессорных маслах. — Одесса: Фенікс, 2013.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ К ОПИСАНИЮ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В ФЕРРОМАГНИТНЫХ СПЛАВАХ

В.В. Соколовский*, В.Д. Бучельников

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*e-mail: vsokolovsky84@mail.ru

В последние годы активно ведутся поиски новых магнитоупорядоченных веществ на наличие максимального магнитокалорического эффекта (МКЭ), заключающегося в изменениях температуры (в адиабатических условиях) и энтропии (в изотермических условиях) при изменении магнитного поля. Интенсивные исследования позволили выявить широкий ряд различных сплавов, зарекомендовавших себя как перспективные магнитокалорические материалы. К таким сплавам, можно отнести Fe-Rh , Mn_3GaC , RM_2 (где R - редкоземельный элемент, $M = \text{Al, Co, Ni}$), $\text{Gd}_5(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)_4$, $\text{Mn}(\text{As}_{1-x}\text{Sb}_x)$, $\text{MnFe}(\text{P}_{1-x}\text{As}_x)$, $\text{La}(\text{Fe}_{13-x}\text{Si}_x)$ и их гидраты, $\text{R}_{1-x}\text{M}_x\text{MnO}_3$ (где R — лантаноид и $M = \text{Ca, Sr, Ba}$), а также сплавы Гейслера Ni-(Y)-Mn-Z ($Y = \text{Fe, Cu, Co}$ и $Z = \text{Ga, In, Sn}$) [1].

В докладе будут рассмотрены теоретические подходы на макро- и микроскопическом уровне для описания магнитокалорических свойств ферромагнитных материалов. Макроскопический подход будет включать модели в рамках теорий фазовых переходов Ландау, размытых фазовых переходов Малыгина, Бина-Родбелла и молекулярного поля. Микроскопический подход будет включать спин-решеточные гамильтонианы Гейзенберга, Потсса, Блумэ-Эмери-Гриффитса (БЭГ) совместно с методом Монте-Карло и теорией функционала плотности. На рис. 1 приведены результаты моделирования прямого и обратного МКЭ в области магнитных и структурных фазовых переходов для сплавов Гейслера. Моделирование выполнено с помощью модели Поттса-БЭГ и метода Монте-Карло. В целом, можно видеть хорошее согласие между теорией и экспериментом.

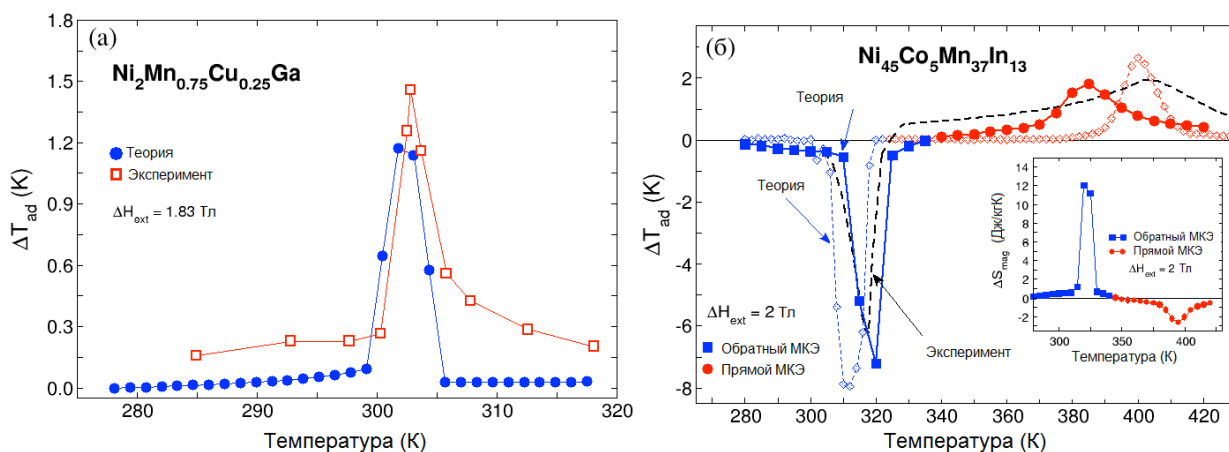


Рис. 1. Теоретические и экспериментальные зависимости адиабатического изменения температуры для сплавов Гейслера (а) $\text{Ni}_2\text{Mn}_{0.75}\text{Cu}_{0.25}\text{Ga}$ [2] и (б) $\text{Ni}_{45}\text{Co}_5\text{Mn}_{37}\text{In}_{13}$ [3]. Открытыми и закрашенными символами на рис. (б) обозначены результаты для монокристаллической и поликристаллической модели.

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

1. K. A. Gschneidner Jr *et al.*, Reports on Progress in Physics **68**, 1479 (2005).
2. V. V. Sokolovskiy *et al.*, J. Appl. Phys. **114**, 183913 (2013).
3. D. Comtesse *et al.*, Phys. Rev. B **89**, 184403 (2014).

РЕЛАКСАЦИЯ ВБЛИЗИ БИНОДАЛИ

Л.Д. Сон

Уральский государственный педагогический университет, Екатеринбург, Россия
 Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
 Уральский технический институт связи и информатики, Екатеринбург, Россия
 e-mail: ldson@yandex.ru

Двухкомпонентное конденсированное вещество рассматривается вблизи линии расслоения на две фазы (т.н. бинодали). Распад однородного состояния на две фазы описан в литературе достаточно подробно — через режимы зародышеобразования и спиноподального распада. Выше бинодали растворение остаточной фазы описывать труднее, что связано с большим разнообразием начальных состояний, которые могут вести себя по-разному. В докладе рассматривается наиболее расхожий случай, когда растворяющаяся фаза мелкодисперсна, а состояние системы описывается двумя полями: ψ — отклонением концентрации от среднего значения, и φ — объемной долей растворяющейся фазы. Концентрационная динамика описывается системой уравнений:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \gamma_1 \Delta \frac{\delta \Phi}{\delta \psi} + g \frac{\delta \Phi}{\delta \varphi} + \theta_1, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \gamma_2 \Delta \frac{\delta \Phi}{\delta \varphi} - g \frac{\delta \Phi}{\delta \psi} + \theta_2. \quad (2)$$

Здесь Φ — вклад полей ψ, φ в термодинамический потенциал, а случайные «силы» θ_1, θ_2 , согласно ФДТ, обладают следующими корреляционными свойствами:

$$\langle \theta_1(\mathbf{r}, t) \theta_1(\mathbf{r}', t') \rangle = -\gamma_1 T \Delta \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (3)$$

$$\langle \theta_2(\mathbf{r}, t) \theta_2(\mathbf{r}', t') \rangle = -\gamma_2 T \Delta \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'). \quad (4)$$

В докладе показано, как строится бинодаль и как на основе этого построения моделируется Φ в рамках теории фазовых переходов Ландау, после чего исследуются возможные решения системы (1,2) при различных начальных условиях, приближениях и значениях параметров модели. При этом возникают естественные аналогии с химической термодинамикой. Развиваемая теория описывает перегрев над бинодалью, что дополняет теорию переохлаждения. При переохлаждении начальное однородное состояние универсально, так что положение его неустойчивости (спиноподаль) и сценарии распада (зародыши, спиноподальный распад) также имеют универсальный характер. В случае перегрева каждое начальное распределение второй фазы имеет свои границы устойчивости (единой «спиноподали перегрева» просто не существует) и описывается индивидуальным сценарием релаксации. Тем не менее, перегрев двухфазной системы над бинодалью оказывается возможным. В докладе приводятся долгоживущие осциллирующие и квазихаотические решения, что можно расценивать как новый результат. Методически работа представляет собой комбинацию методов термодинамики (моделирование Φ , построение фазовых диаграмм) и динамики нелинейных систем (исследование системы уравнений (1,2)).

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 18-03-00433, 18-02-00643.

ПОЛУЧЕНИЕ И СВОЙСТВА ПРОВОДНИКОВ С ГРАДИЕНТНОЙ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬЮ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ИНДУКТОРОВ СИЛЬНОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ

А.В. Спиринов*, С.Н. Паранин, В.И. Крутиков, С.В. Заяц, В.Р. Хрустов, Д.С. Колеух, Е.Ю. Зайцев

Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: spirin@iep.uran.ru

До настоящего времени актуальной остается проблема стойкости применяемых материалов для систем многократной генерации сильных, более 20 – 30 Тл, импульсных магнитных полей (СМП) микросекундного диапазона длительностей, используемых преимущественно в технологиях магнитно-импульсной обработки (МИО). Основным инструментом МИО являются индукторы сильного поля в виде одно- или многовитковых катушек. Быстрое разрушение многоразовых индукторов существенно снижает экономическую привлекательность МИО. Как известно, разрушение индуктора происходит с рабочей поверхности, где проводник подвергается интенсивным термомеханическим напряжениям под действием давления магнитного поля и омического нагрева. Снижение нагрева токонесущего слоя индуктора имеет ключевое значение для увеличения его ресурса, поскольку позволяет снизить термические напряжения и деформации. В рассмотренном ключе перспективным и теоретически обоснованным подходом является реализация материала индуктора, электросопротивление которого в токонесущем слое ступенчато или непрерывно убывает с глубиной. Настоящая работа направлена на разработку таких материалов и подходов к созданию индукторов СМП с повышенным ресурсом.

На протяжении нескольких лет коллектив авторов развивает подходы к созданию проводников с градиентной электропроводностью. В качестве базовых материалов выбраны конструкционные стали как наиболее доступные и используемые на практике материалы индукторов. Кроме того, к сталям применимы различные физико-химические способы обработки. Так, для получения непрерывно меняющегося с глубиной электросопротивления авторами предложено использование диффузионных способов модификации поверхностного слоя сталей: азотирования в плазме электронного пучка и термодиффузионного хромирования в порошковой засыпке, исследованы характеристики модифицированного такими способами приповерхностного слоя стали и поведение модельных индукторов при генерации импульсов СМП [1,2].

В последнее время ведутся работы по созданию порошковым способом многослойных материалов со слоями, отличающимися электросопротивлением (ступенчатое изменение). Для создания основы используются порошки среднеуглеродистых легированных сталей типа 30ХГСА с невысоким среди сталей значением удельного сопротивления, а для формирования резистивного слоя — порошки на основе базовой стали с добавкой хрома или из более резистивных сплавов (36НХТЮ и др.). Магнитно-импульсным прессованием порошков и последующим спеканием в вакууме при 1200°C получены компактные образцы стали с относительной плотностью выше 95%. Исследованы микроструктурные и прочностные свойства, а также удельное сопротивление полученных образцов в зависимости от состава и пористости стали. Параллельно ведутся исследования по созданию порошковым способом более электропроводных материалов и структур на основе мелкодисперсных медных сплавов, например, Cu-Nb, в том числе композиционных. В докладе будут представлены первые результаты по данному направлению.

Работа выполнена при частичном финансировании грантов РФФИ (16-08-00919-а, 19-08-00931-а, 20-58-00029-Бел_а, 20-21-00050-Росатом) и проекта УрО РАН (18-2-2-8).

1. A.V. Spirin, P.A. Russkikh, V.I. Krutikov *et al.*, ISHCE-2018 Proceedings, 148 (2018).
2. A.V. Spirin, G.Sh. Boltachev, V.I. Krutikov *et al.*, AIP Conference Proceedings **2174**, 020163 (2019).

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАДИАЦИОННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ МАТЕРИАЛОВ ЯДЕРНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ: ДИФФУЗИЯ НАНОПОЛОСТЕЙ

В.В. Стегайлов

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия
Московский физико-технический институт (НИУ), Долгопрудный, Россия
e-mail: stegailov@gmail.com

Новые технологии атомной энергетики неразрывно связаны с задачами создания материалов, обладающих уникальными свойствами. Радиационные повреждения конструкционных материалов реакторов и ядерных топлив являются важнейшей темой научных исследований для совершенствования технологии создания атомных энергетических установок. Сложность теоретического, математического и вычислительного описания данных явлений связана с принципиальной многомасштабностью процессов радиационных повреждений. Элементарным начальным актом этих процессов является выбивание одиночного атома из узла кристаллической решетки за времена порядка 10^{-12} секунды. А конечными результатами — потеря прочности конструкции реактора, распухание таблеток ядерного топлива и другие нежелательные последствия, проявляющиеся за годы функционирования реакторов.

В работе рассматривается диффузия нанопузырей (нанополостей) в объеме зерна металла, которые образуются в результате объединения одиночных вакансий. Существует множество теоретических моделей диффузии нанополостей. Континуальная теория основана на трех механизмах переноса атомов: за счет испарения/конденсации, за счет поверхностной диффузии, за счет объемной диффузии. При этом ключевой параметр второго механизма, коэффициент поверхностной самодиффузии, может зависеть от радиуса пузыря. В фасеточных пузырях важную роль играет частота образования критических террас на гранях. Газ, находящийся в пузыре, также влияет на диффузию.

Наблюдение броуновского движения пузырей с помощью электронного микроскопа является наиболее прямым экспериментальным способом верификации описанных теорий. По зависимости коэффициента диффузии от радиуса пузыря предполагают ключевой механизм, однако это затруднено учетом влияния газа.

Проверенной количественной теории, способной предсказывать механизм и коэффициент диффузии пузырей в широком диапазоне радиусов и температур, пока нет. И имеющиеся экспериментальные данные не удавалось убедительно описать в рамках существующих моделей. В докладе на основе последних результатов будет рассказано, как атомистическое моделирование помогает решить эту задачу [1–3].

Работа выполнена при частичной поддержке проекта РФФИ № 18-08-01495.

1. А.С. Антропов, В.Д. Озрин, В.В. Стегайлов, В.И. Тарасов, ЖЭТФ **156**, 125 (2019).
2. A. Antropov, V. Stegailov, Journal of Nuclear Materials **533**, 152110 (2020).
3. А.С. Антропов, Письма в ЖЭТФ **112**, 334 (2020).

СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В $4d - 5d$ ОКСИДАХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

С.В. Стрельцов

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: streltsov@imp.uran.ru

Изучение влияния спин-орбитального взаимодействия на физические свойства различных материалов без сомнения стало одной из ключевых областей физики конденсированного состояния в последние годы. Открытие топологических изоляторов (а также дираковских и вейлевских полуметаллов), важность учета спин-орбитального взаимодействия для описания электронных и магнитных свойств многих сильнокоррелированных соединений переходных металлов (спин-орбитальные моттовские изоляторы), спин-орбитальное запутывание, явления, связанные с анизотропией обменного взаимодействия и моделью Китаева, — все эти эффекты оказали важное влияние и существенно обогатили физическую науку.

В настоящем докладе будет представлен обзор последних результатов исследований, связанных с изучением влияния спин-орбитального взаимодействия на физические свойства соединений переходных металлов. В частности будет показано каким образом оно влияет на кристаллическую решетку, орбитальные или спиновые степени свободы.

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 20-62-46047.

1. С.В. Стрельцов, Д.И. Хомский, УФН **187**, 1205 (2017).
2. D.I. Khomskii, S.V. Streltsov, arXiv:2006.05920.

ВАКУУМНАЯ И ТВЕРДОТЕЛЬНАЯ СПИНТРОНИКА

О.Е. Терещенко

Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия
Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
e-mail: teresh@isp.nsc.ru

Практически все новые открытия в современной физике твердого тела (гигантское магнетосопротивление, топологические изоляторы, квантовый аномальный эффект Холла, и др.) связаны с особым зонным строением, которое во многом определяется спиновой поляризацией электронов в объемных и поверхностных состояниях. В связи с этим, важной задачей является детектирование спиновой поляризации электронных состояний в зонном спектре твердых тел. В нашей работе мы используем два подхода: (i) детектирование поляризации свободных электронов в полупроводниковых гетероструктурах и (ii) изучение спин-зависимого транспорта в материалах с сильным спин-орбитальным взаимодействием.

В данной работе мы предлагаем альтернативный способ измерения поляризации электронного пучка, основанный на инжекции спин-поляризованных свободных электронов в гетероструктуру с квантовыми ямами (КЯ) и регистрации поляризованной катодолюминесценции (КЛ). Для решения поставленной задачи нами впервые создан плоский вакуумный фотодиод, состоящий из двух полупроводниковых электродов с эффективным отрицательным электронным средством [1,2]. По регистрации интенсивности и степени поляризации КЛ от инжектированных спин-поляризованных электронов измерена зависимость асимметрии КЛ, которая пропорциональна поляризации электронов. Впервые измерено пространственное (латеральное) распределение поляризации электронов путем измерения распределения латеральной интенсивности поляризованной катодолюминесценции. Практическим результатом данной работы является компактный спин-детектор с пространственным разрешением, который в комбинации с современными энергоанализаторами, используемыми в методе фотоэмиссии с угловым разрешением (ARPES), позволит измерять распределение электронов по импульсу, энергии и трем компонентам спина, т.е. *получать полную информацию о законе дисперсии*.

Вторая часть доклада посвящена изучению спин-зависимого транспорта и обсуждению общих вопросов создания спин-управляемой электроники. Получены результаты по инжекции и детектированию спин-поляризованных электронов в эпитаксиальных пленках PbSnTe:In с использованием ферромагнитных контактов Co и $\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$. Обнаружен спин-вентильный эффект при измерении магнетосопротивления в локальной геометрии на удалении ферромагнитных контактов более 50 мкм. Методом фотоэмиссии с угловым и спиновым разрешением показано наличие поверхностного спин-поляризованного состояния с линейным законом дисперсии.

В докладе будут рассмотрены вопросы комбинирования вакуумной и твердотельной спинтроники.

Работа поддержана проектом РФФИ 21-52-12024.

1. A.A. Rodionov *et al.*, Physical Review Applied **8**, 034026 (2017).
2. O.E. Tereshchenko *et al.*, Scientific Reports **7**, 16154 (2017).

СПЛАВЫ И СОЕДИНЕНИЯ ДЛЯ МАГНИТНОГО ОХЛАЖДЕНИЯ ПРИ КОМНАТНЫХ И КРИОГЕННЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ: РЕТРОСПЕКТИВА И ПЕРСПЕКТИВЫ

В.В. Ховайло^{1,2*}, С.В. Таскаев^{2,3}¹Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия²Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия³Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*e-mail: khovaylo@misis.ru

Гигантский магнитокалорический эффект (МКЭ) привлекает большое внимание исследователей с момента его открытия в 1997 году [1]. Первые сообщения о гигантском изотермическом изменении магнитной энтропии ΔS_m при магнитных фазовых переходах первого рода в сплавах и соединениях на основе марганца указали на их хорошие перспективы для практических применений в технологии магнитного охлаждения при комнатных температурах. На раннем этапе исследования МКЭ в этих материалах использование соотношения Максвелла было наиболее распространенным подходом для вычисления ΔS_m по результатам измерений намагниченности. Однако первые «прямые» измерения ΔS_m [2], а также прямые измерения адиабатического изменения температуры ΔT_{ad} показали, что сплавы и соединения на основе марганца, в частности сплавы Гейслера, имеют довольно слабые перспективы практических применений из-за небольшой величины ΔT_{ad} . Более поздние исследования МКЭ при циклическом воздействии внешнего магнитного поля выявили еще одну проблему, которую необходимо преодолеть — необратимость ΔT_{ad} [3]. Тем не менее, собранные данные об особенностях МКЭ в окрестности магнитных фазовых переходов первого рода позволили установить критерии применимости таких материалов для магнитного охлаждения при комнатной температуре.

Значительный прогресс в разработке материалов для магнитного охлаждения при комнатных температурах возобновил интерес к материалам, перспективным для ожижения криогенных газов. Многочисленные исследования выявили большое количество сплавов и соединений, которые демонстрируют значительный МКЭ в интересующей области температур от 15 до 150 К [4]. Почти все эти материалы представляют собой интерметаллические соединения на основе редкоземельных элементов, такие как RTX , R_3T и RT_2 (R — редкоземельный металл, T — $3d$ или $4d$ переходный металл, X — химический элемент основной группы). Как правило, для большинства этих материалов температуру Кюри T_C , при которой МКЭ максимальный, сравнительно легко «настроить» на желаемое значение. Это позволяет спроектировать магнитную охлаждающую машину для эффективного ожижения технологически важных газов, таких как водород (температура кипения $T_b = 20$ К), кислород ($T_b = 54$ К) и азот ($T_b = 77$ К). Принимая во внимание быстрое развитие сверхпроводящих магнитов, которые могут генерировать магнитные поля 15 – 22 Тл, исследование МКЭ в сильных магнитных полях представляет значительный интерес для разработки перспективных технологий криогенного магнитного охлаждения.

Работа поддержана грантом РФФИ № 18-42-06201.

1. V.K. Pecharsky, K.A. Gschneidner, Jr., Phys. Rev. Lett. **78**, 4494 (1997).
2. V.D. Buchelnikov *et al.*, Int. J. Appl. Electromagn. Mech. **23**, 65 (2006).
3. V.V. Khovaylo *et al.*, Appl. Phys. Lett. **97**, 052503 (2010).
4. H. Zhang *et al.*, Physica B **558**, 65 (2019).

МАГНИТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ

МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В СПЛАВАХ La – Fe – Co – Si в ПЕРЕМЕННЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Н.З. Абдулкадирова^{1*}, А.М. Алиев¹, А.Г. Гамзатов¹, P. Gebara²¹Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия²Institute of Physics, Czestochowa University of Technology, Czestochowa, 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 (МКЭ) 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 [1-6]. 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 циклических магнитных полях (а именно последние будут использоваться в холодильных машинах) могут существенно отличаться друг от друга.

В данной работе исследовано влияние циклического (переменного поля) на магнитокалорические 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.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Государственного фонда естественных наук Китая в рамках научного проекта № 21-58-53046, а также при финансовой поддержке гранта РНФ № 18-12-00415.

1. J. Shen, Y.X. Li, B. Gao, B.G. Shen, J. Magn. Magn. Mat. **310**, 2823 (2007).
2. P. Gebara, J. Marcin, Acta Phys. **133**, 648 (2018).
3. S. Fujieda, A. Fujita, and K. Fukamichi, Appl. Phys. Lett. **81**, 1276 (2020).
4. H. Feng-xia, Sh. Bao-gen, S. Ji-rong *et al.*, Appl. Phys. Lett. **80**, 865 (2020).
5. A. Yan, K.H. Müller, O.J. Gutfleisch, Alloys Compd. **450**, 18 (2008).
6. X.B. Liu, D.H. Ryan, Z.J. Altounian, Magn. Magn. Mater. **270**, 305 (2004).

КОРРЕЛЯЦИЯ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИХ И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВБЛИЗИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В СИСТЕМЕ La – Fe – Co – Si

Н.З. Абдулкадирова^{1*}, А.Г. Гамзатов¹, А.М. Алиев¹, P. Gebara²¹Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия²Institute of Physics, Czestochowa University of Technology, Czestochowa, Poland*e-mail: nnurizhat@mail.ru

Магнитные сплавы и соединения, демонстрирующие высокие значения магнитокалорического эффекта (МКЭ) в интервале температур 250 – 320 К (при изменении магнитного поля $\mu_0\Delta H = (1 - 2)$ Тл, привлекают большое внимание в связи с возможностью их применения в технологии магнитного охлаждения. Есть много требований к материалам, которые будут использоваться в технологии магнитного охлаждения; основное из них то, что материал должен обладать гигантской величиной магнитокалорического эффекта при комнатной температуре. Группа сплавов $\text{La}(\text{Fe},\text{Si})_{13}$ обладает этими свойствами благодаря высокому содержанию железа и превосходным магнитным свойствам структуры типа — NaZn_{13} . Управлять магнитокалорическими свойствами сплавов можно как изменением соотношения компонентов исходного состава $\text{La}(\text{FeSi})_{13}$, так и заменой элементов основного состава другими металлами. Магнитокалорические свойства сплавов $\text{La}(\text{FeSi})_{13}$ довольно хорошо изучены. Анализ литературных данных указывает на скудность информации о теплофизических свойствах данных сплавов, а также на отсутствие прямых измерений магнитокалорического эффекта [1-3].

В данной работе проведены исследования магнитокалорических и тепловых свойств для сплава $\text{LaFe}_{11.1}\text{Mn}_{0.1}\text{Co}_{0.7}\text{Si}_{1.1}$. На температурной зависимости теплоемкости $C_p(T)$ наблюдаются выраженные аномалии, связанные с фазовым переходом ферромагнетик–парамагнетик. В магнитном поле максимум зависимости подавляется и смещается в сторону более высоких температур. На зависимости температуропроводности $\eta(T)$ вблизи T_C наблюдаются глубокие минимумы, связанные с появлением дополнительного рассеяния фононов на флуктуациях магнитного параметра порядка. Зависимость электросопротивления в поле $H = 0$ и 1.8 Тл с максимумом при $T = 247$ К. Вблизи T_C наблюдается аномалия на зависимости электросопротивления $\rho(T)$ при $H = 0$. Ниже T_C сопротивление увеличивается с ростом температуры, показывая металлический характер, но выше T_C сопротивление резко уменьшается в узком температурном диапазоне вблизи T_C , а затем восстанавливает металлический температурный ход. Приложение магнитного поля 1.8 Тл приводит к увеличению температуры ферромагнитного упорядочения, при этом аномалия на зависимости $\rho(T)$ сохраняется. Таким образом, вблизи T_C приложение магнитного поля приводит к росту электросопротивления и тем самым показывает положительный эффект магнетосопротивления. Зависимость $\Delta\rho$ от температуры и магнитного поля хорошо коррелирует с данными $\Delta T(T)$ и связаны простым соотношением $\Delta T(T) = K\Delta\rho(T)$. Проведены прямые измерения МКЭ в циклическом поле 1.8 Тл. Значения $\Delta T\rho$, оцененные из данных $\Delta\rho$ как по величине, так и по температурному ходу, хорошо согласуются с данными прямых измерений.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и ВАНТ в рамках научного проекта № 20-58-54006.

1. R. Rawat, I. Das, J. Phys.: Cond.Matter **13**, L379 (2001).
2. N. Sakamoto, T. Kyômen, S. Tsubouchi, M. Itoh, Phys. Rev. B **69**, 092401 (2004).
3. J.C.P. Campoy, E.J.R. Plaza., A.A. Coelho, S. Gama, Physical Review B **74**, 134 (2006).

МАГНИТНОЕ СОСТОЯНИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО СИНТЕТИЧЕСКОГО ПИРРОТИНА

Д.Ф. Акрамов^{1*}, Н.В. Селезнева¹, В.В. Майков², Н.В. Баранов^{1,2}¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия²Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: Akramov.danil@urfu.ru

Как чистое железо, так соединения и сплавы, магнетизм которых обусловлен только присутствием в них атомов Fe, за редким исключением [1,2] проявляют магнитомягкие свойства и отличаются небольшими значениями коэрцитивной силы. В работе [3] показано, что для наночастиц с размерами порядка 30 нм в соединении Fe₃Se₄ коэрцитивная сила достигает 36 кЭ при $T = 10$ К и до 3.4 кЭ при комнатной температуре. Халькогенид железа Fe₇S₈ (пирротин), как и Fe₃Se₄, обладает слоистой структурой и принадлежит к структурному типу NiAs. Близость структур и значений энергий магнитокристаллической анизотропии [3,4] позволяет предположить, что уменьшение размеров частиц в соединении Fe₇S₈ также приведет к росту коэрцитивной силы.

Целью данной работы является определение влияния размера частиц на магнитные свойства синтетического пирротина Fe₇S₈.

Для достижения поставленной цели был синтезирован ряд поликристаллических образцов Fe₇S₈ методом твердофазного импульсного синтеза в вакуумированных кварцевых ампулах по одностадийной методике. Измельчение полученных образцов производилось в течение $\tau = 1, 3$ и 7 часов в шаровой вибрационной мельнице в атмосфере аргона. Рентгенографическая аттестация образцов после синтеза и после размола осуществлялась на дифрактометре Bruker D8 ADVANCE. Исследование морфологии образцов осуществлялось сканирующей электронной микроскопией с помощью системы с электронным и сфокусированным ионным пучком Auriga (Carl Zeiss, Германия). Измерения магнитной восприимчивости и намагниченности производились на СКВИД-магнитометре MPMS-XL-5 (Quantum Design, США) в температурном интервале 2 – 300 К.

Анализ рентгенографических данных с помощью формулы Шеррера позволил оценить размеры областей когерентного рассеяния (ОКР) синтезированных и измельченных образцов и установить, что уже после одного часа обработки в мельнице происходит резкое уменьшение ОКР от 50 нм в исходном образце ($\tau = 0$ часов) до 18 нм при $\tau = 1$ час. Дальнейшее измельчение не приводит к резкому падению размеров ОКР и составляет около 10 нм при $\tau = 7$ часов. Согласно данным, полученным с помощью сканирующей электронной микроскопии, после $\tau > 1$ час происходит агломерация частиц. Согласно данным магнитных измерений, уменьшение размеров кристаллитов сопровождается уменьшением намагниченности и немонотонным изменением коэрцитивной силы. Размол в течение одного часа приводит к увеличению коэрцитивной силы от 2.2 кЭ до 3.1 кЭ при $T = 2$ К и от 0.4 кЭ до 1 кЭ при $T = 300$ К, однако дальнейшая обработка сопровождается падением коэрцитивной силы до 0.3 кЭ при $T = 2$ К и 0.13 кЭ при комнатной температуре после размола в течение 7 часов. Уменьшение коэрцитивной силы с увеличением времени размола более 1-го часа, по-видимому, связано с агломерацией частиц.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (проект № FEUZ-2020-0054).

1. N.V. Baranov *et al.*, Physical Review B **100**, 024430 (2019).
2. M.S. Bishwas *et al.*, The Journal of Physical Chemistry C **118**, 4016. (2014).
3. H. Zhang *et al.*, Chemistry of Materials **23**, 3769 (2011).
4. K. Adachi *et al.*, Journal of Applied Physics **39**, 1343 (1968).

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ АМОРФНЫХ МАГНИТНЫХ МИКРОПРОВОДОВ

Ю.А. Алехина*, Н.С. Перов

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

*e-mail: ya.alekhina@physics.msu.ru

В настоящее время множество работ посвящено аморфным магнитным материалам. Широкое разнообразие их приложений определяет исследовательский интерес для практических проектов, при этом они по-прежнему актуальны с фундаментальной точки зрения.

Особенности процесса изготовления аморфных магнитных микропроводов оказывают сильное влияние на их магнитные свойства. Механические напряжения, возникающие в процессе охлаждения расплава, приводят к возникновению магнитоупругой анизотропии и связанной с ней сложной доменной структуры микропровода, определяющей магнитные свойства микропроводов [1]. Так, гигантский скачок Баркгаузена связан с перемагничиванием аксиального домена [2]. Такая двойственность состояний имеет перспективы использования в логических устройствах. Возможность перемагничивания аморфных микропроводов путем пропускания тока через образец представляет большой практический интерес. Доменная структура в этом случае смещается по проводу с сохранением конфигурации, что является важным преимуществом использования данного метода перемагничивания в системах записи информации [3]. В [4] также показано, что магнитостатическое взаимодействие поверхностных доменов и аксиального домена приводит к переключению аксиального домена, если состояние поверхностных доменов изменяется (электрическим током или магнитным полем). Таким образом, пропускание переменного тока через образец может приводить к перемагничиванию аксиально намагниченного керна, что позволяет снизить потери на нагрев и необходимую амплитуду тока.

Несмотря на большие перспективы практического использования и принципиальную важность таких внутренних процессов, протекающих в аморфных материалах, возможности экспериментального изучения объектов с размерами порядка 10 микрон ограничиваются исследованием поверхностных или объемных свойств. Таким образом, моделирование перемагничивания на микроуровне необходимо для понимания основных особенностей таких процессов и дальнейшего прогнозирования свойств аморфных материалов.

В данной работе моделирование перемагничивания током проводится с помощью микромагнитного пакета OOMMF [5]. Проволока представляла собой цилиндрическую область с основными магнитными параметрами (намагниченность насыщения, обменная жесткость), соответствующими экспериментальным данным, описанным в литературе. Константа анизотропии и направление оси были заданы как объект векторного поля для описания магнитоупругой анизотропии, приводящей к сложной микромагнитной структуре. Магнитное поле, создаваемое током, было задано как круговое векторное поле, изменяющее величину и направление с временными итерациями.

В результате моделирования было получено распределение намагниченности в объеме микропроводов с положительной и отрицательной магнитострикцией, соответствующее существующим представлениям, описанным в литературе. Подтверждена возможность перемагничивания аксиального керна циркулярным магнитным полем.

Проект выполняется при финансовой поддержке РФФИ грант № 19-32-90089. Ю.А. Алехина является стипендиатом фонда «БАЗИС».

1. J. Velazquez *et al.*, J App Phys. **70**, 6525 (1991).
2. K.J. Sixtus, L. Tonks, Phys. Rev. **42**, 419 (1932).
3. M. Hayashi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **97**, 207205 (2006).
4. V. Zhukova *et al.*, Frontiers of Physics **13**, 137501 (2018).
5. M.J. Donahue, D.G. Porter, OOMMF User's Guide, Version 1.0 (1999).

ЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНСПОРТ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ В НОВЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРАХ $\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$ И $\text{MnBi}_{10}\text{Te}_{16}$

Н.А. Абдуллаев^{1,2}, Х.В. Алигулиева^{1,3*}, З.С. Алиев^{1,4}, И.Р. Амирасланов^{1,2}, В.Н. Зверев⁵,

А.М. Шикин⁶, Н.Т. Мамедов¹, Е.В. Чулков^{6,7}

¹Институт физики НАН, Баку, Азербайджан

²Бакинский государственный университет, Баку, Азербайджан

³Сумгаитский государственный университет, Сумгаит, Азербайджан

⁴Азербайджанский государственный университет нефти и промышленности, Баку, Азербайджан

⁵Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка, Россия

⁶Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

⁷Donostia International Physics Center (DIPC), Donostia-San Sebastian, Spain

*e-mail: xayala-firuza@mail.ru

Недавно были впервые получены монокристаллы новых полупроводниковых ферромагнитных топологических изоляторов $\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$ и $\text{MnBi}_{10}\text{Te}_{16}$ семейства $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ [1]. Данные фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) подтверждают линейный характер дисперсии энергии $E(k)$ для поверхностных состояний (т.н. конусы Дирака) [2]. В настоящей работе представлен транспорт электронов в $\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$ и $\text{MnBi}_{10}\text{Te}_{16}$. На рисунке 1 (а) наблюдается особенность в зависимости $\rho(T)$, обусловленная магнитным фазовым переходом парамагнетик–ферромагнетик с температурой Кюри $T_C = 12$ К. На рисунках 1 (b) и (c) на магнитополевых зависимостях магнитосопротивления ρ_{xx} и холловского сопротивления ρ_{xy} отчётливо проявляются характерные гистерезисные явления при температуре $T = 1.4$ К. Необходимо отметить, что для соединения $\text{MnBi}_{10}\text{Te}_{16}$ наблюдаются аналогичные зависимости.

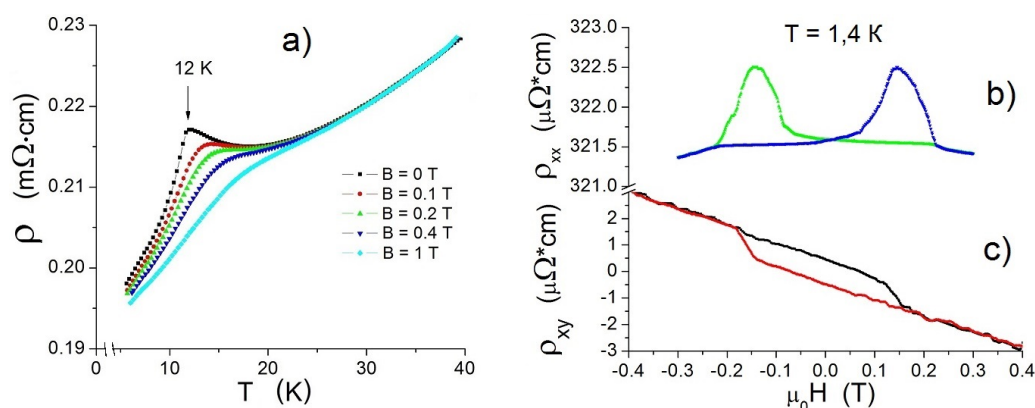


Рис. 1. (a) — температурные зависимости удельного сопротивления $\rho(T)$ соединения $\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$ при различных внешних магнитных полях B ; (b) — полевая зависимость магнитосопротивления; (c) — аномальный эффект Холла при температуре $T = 1.4$ К.

Данная работа была выполнена при финансовой поддержке Фонда развития науки при Президенте Азербайджанской Республики (гранты № EIF-BGM-4-RFTF-1/2017-21/04/1-M-02 и EIF/MQM/Elm-Tehsil-1-2016-1(26)-71/16/1) и Российского Фонда фундаментальных исследований (грант № 18-52-06009).

1. Z.S. Aliev, I.R. Amiraslanov, N.A. Abdullayev, N.T.Mamedov, M.B. Babanly, E.V. Chulkov *et al.*, Journal of Alloys and Compounds **789**, 443 (2019).

2. I.I. Klimovskikh, M.M. Otrokov, Z.S. Aliev, I.R. Amiraslanov, N.A. Abdullayev, V.N. Zverev, N.T.Mamedov, A.M. Shikin, E.V. Chulkov *et al.*, npj Quantum Materials **789**, 443 (2020).

ДОПИРОВАННЫЙ МАРГАНЦЕМ ПОЛУПРОВОДНИК CdGeP₂: РАЗБАВЛЕННЫЙ МАГНИТНЫЙ ПОЛУПРОВОДНИК ИЛИ НЕОДНОРОДНЫЙ МИКРОКОМПОЗИТ?

L. Kilanski¹, Т.Р. Арсланов^{2*}, S. Lewicka¹, A. Khaliq¹, R. Minikaev¹, A. Reszka¹,
A. Ślawska-Waniewska¹, B.J. Kowalski¹, W. Dobrowolski¹, И.В. Федорченко^{3,4}, С.Ф. Маренкин³

¹Institute of Physics, Polish Academy of Sciences, Warsaw, Poland

²Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

³Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия

⁴Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия

*e-mail: arslanovt@gmail.com

Комплексные ферромагнитные полупроводники на основе соединений II-IV-V₂ представляют потенциальный интерес для спинтроники, которые в сравнении с их изовалентными аналогами (например, (Ga,Mn)As с температурой Кюри $T_C \sim 200$ К [1]) демонстрируют ферромагнетизм при комнатной температуре. Соединение CdGeP₂ со структурой халькопирита ($I - \bar{4}2d$) известно как одно из основополагающих данного семейства. В результате легирования Mn исходного соединения сообщалось о получении разбавленного магнитного полупроводника [2]. Однако, до сих пор природа ферромагнетизма и низкотемпературных магнитных упорядочений в Cd_{1-x}Mn_xGeP₂ остается неоднозначной. В этой связи мы рассмотрели вопрос, касающийся влияния концентрации примеси Mn на магнитные превращения и структурные свойства в системе Cd_{1-x}Mn_xGeP₂.

В последние годы обсуждаемая причина возникновения высокотемпературного ферромагнетизма относится к образованию неконтролируемых магнитных включений (кластеров) с доминирующими ближними магнитными взаимодействиями [3]. На основе дифракционных и SEM/EDS методов исследований было установлено наличие MnP кластеров (10 – 30 μm) в Cd_{1-x}Mn_xGeP₂ с $x = 0.008 - 0.037$, чье характерное поведение отмечалось на зависимости магнитной восприимчивости $\text{Re}(\chi_{AC})(T)$. Из рентгенофазового анализа было показано, что для всех легированных Mn образцов помимо основной тетрагональной структуры халькопирита ($I - \bar{4}2d$) преобладала дополнительная кубическая фаза Ge (Fd3m), которая, скорее всего, является компенсацией избытка Mn.

Присутствие MnP кластеров индуцировало ферромагнетизм с T_C около 295 К и переход от ферромагнитного упорядочения к спиральной структуре с температурой перехода T_S , изменяющейся от 78 К до 54 К для составов с $x = 0.008$ и $x = 0.037$ соответственно. Распределение ионов Mn в структуре халькопирита, чье зарядовое состояние отлично от Mn²⁺, отмечает сильный парамагнитный отклик ниже области спиральной фазы. Этот вклад не является существенным, и природа наблюдаемых магнитных переходов T_C и T_S характеризуется схожестью с объемным соединением MnP. Столь существенное смещение T_S в зависимости от x ассоциируется с эффектом локального давления из-за уменьшения решеточных параметров CdGeP₂ при повышении концентрации Mn. При этом максимальное значение $P \sim 0.25$ ГПа соответствует предельному содержанию $x = 0.035$. Полученные результаты объединены на $T-P$ фазовой диаграмме и обсуждаются в сравнении с магнитным поведением объемного MnP до давлений 1 ГПа.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ № 19-02-00031.

1. P. Němec, V. Novák, N. Tesáňová, E. Rozkotoň *et al*, Nat. Commun. **4**, 1422 (2012).
2. G.A. Medvedkin, T. Ishibashi, T. Nishi, K. Hayata *et al*, Jpn. J. Appl. Phys. **39**, L949 (2000).
3. L. Kilanski *et al*, Solid State Commun. **151**, 870 (2011).

ПОЛЕВАЯ ЗАВИСИМОСТЬ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА ПОРОШКА Gd, ПОЛУЧЕННОГО В ШАРОВОЙ МЕЛЬНИЦЕ

А.В. Архипов*, С.В. Андреев, Д.С. Незнахин, Г.В. Курляндская, А.В. Свалов
Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e-mail: hema2468@gmail.com

Магнитокалорический эффект остаётся предметом интенсивных исследований в связи с интересом к экологически чистому магнитному охлаждению. Задача повышения эффективности теплопередачи между рабочим охлаждающим телом и окружающей средой требует увеличения отношения поверхности к объёму [1]. Кроме того, наноструктурирование рабочего материала может улучшать его магнитокалорические свойства, в частности, оптимизировать полевою зависимость изменения магнитной энтропии [2].

В данной работе исследован порошок, полученный размолотом в шаровой мельнице быстрозакалённых лент Gd. Размол проводился в ацетоне в течение 12 часов.

Результаты рентгеноструктурного анализа показали, что основной объём образцов составляет фаза, обладающая ГПУ решёткой. В процессе размолта изменяется текстура ГПУ-фазы и появляется ГЦК-фаза. Средние размеры кристаллитов составляли примерно 25 нм и 40 нм для ГПУ и ГЦК фаз соответственно.

Величина изменения магнитной энтропии определена из магнитных изотерм с использованием соотношения Максвелла [3]:

$$\Delta S_M = \int_{H_2}^{H_1} \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_H dH, \quad (1)$$

где ΔS_M — изменение магнитной энтропии, H_1 и H_2 — начальное и конечное значения поля соответственно, M — намагниченность, T — температура. Измерения произведены в диапазоне температур от 200 до 330 К с шагом 5 К при изменении поля $\Delta H = 0 - 7$ Т. Максимальное изменение

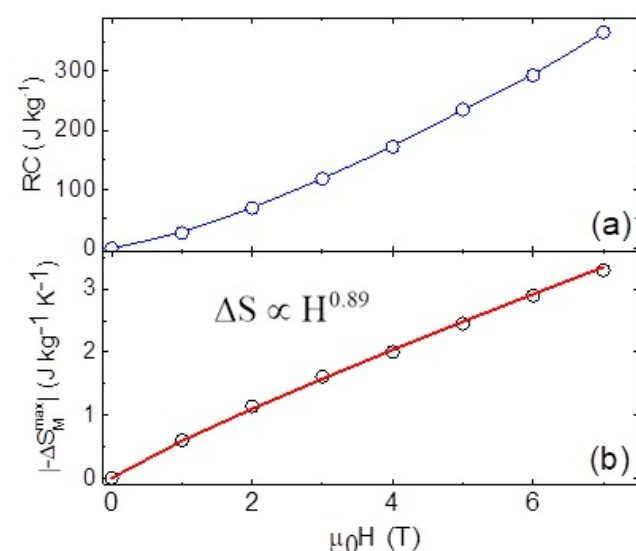


Рис. 1. Хладоёмкость RC (a) и максимальное изменение магнитной энтропии ΔS_M (b) в зависимости от магнитного поля ΔH .

магнитной энтропии в полях $\Delta H = 7$ Т составило $\Delta S_M = 3.3$ Дж/кг·К.

Величина хладоёмкости порошка Gd ($RC = 370$ Дж/кг при изменении поля $\Delta H = 7$ Т (Рис.1(a)) немного уступает величине RC объемного Gd [3].

Значение показателя степени n в степенной зависимости $\Delta S_M \propto H^n$ для порошка Gd близко к 0.89 (Рис. 1(b)), что превосходит аналогичный показатель для объемного Gd (0.78).

Результаты были получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России FEUZ-2020-0051.

1. A.V. Svalov, S.V. Andreev, A. Larrañaga *et al.*, J. Magn. Magn. Mater. **490**, 165529-4 (2019).
2. Q. Gao, B.F. Yu, C.F. Wang *et al.*, Int. J. Refrig. **29**, 1274-1285 (2006).
3. K.A. Gschneidner, V.K. Pecharsky, Annu. Rev. Mater. Sci. **30**, 387 (2000).

СИНТЕЗ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ НАНОПРОВОДОВ РАЗНОГО ДИАМЕТРА И ДЛИНЫ

Ш.К. Боймурадова*, Н.А. Кулеш, В.О. Васьяковский

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: arianaboimuradova@yandex.ru

Цилиндрические магнитные нанопровода представляют относительно новый класс магнитных наноструктур, свойства которых в значительной степени определяются формой [1]. Широкие возможности настройки функциональных свойств путем прецизионного контроля размеров и создания структур с модуляцией состава или диаметра обуславливают повышенный интерес в многочисленных областях прикладных [2] и фундаментальных исследований. Целью данной работы было создание методики синтеза нанопроводов с хорошо контролируруемыми геометрическими параметрами, а также оценка и сравнение экспериментальных значений гистерезисных свойств и вкладов в энергию магнитной анизотропии с расчетными.

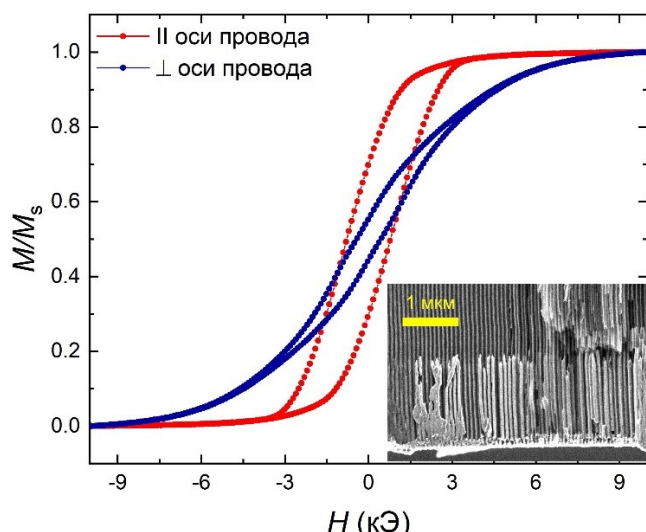


Рис. 1. Петли гистерезиса, измеренные на массиве нанопроводов Co длиной 1.5 мкм, диаметром 35 нм. На вставке показано СЭМ изображение нанопроводов в матрице анодированного алюминия.

Для синтеза образцов была использована методика электролитического осаждения магнитного материала в шаблоны пористого анодированного алюминия. Для анодирования была использована высокочистая фольга алюминия толщиной 0.5 мм. В качестве электролита был использован раствор 0.3 моля щавелевой кислоты ($C_2H_2O_4$). Для электролитического осаждения использовался электролит, содержащий $CoSO_4$ или $NiSO_4$ и борную кислоту. Осаждение проводилось при переменном напряжении амплитудой 20 В и частотой 500 Гц.

В результате работы была реализована методика синтеза и получены цилиндрические нанопровода Co и Ni длиной от 1 до 5 мкм диаметром от 35 до 100 нм (см. пример на рис. 1). Увеличение отношения длины и диаметра привело к ожидаемому росту анизотропии формы нанопроводов, однако одновременно происходил рост собственного размагничивающего поля массива, что отрицательно сказывалось на коэрцитивной силе и остаточной намагниченности. Анализ образцов будет продолжен на следующем этапе работы, подразумевающим растворение шаблона и перевода нанопроводов в раствор для дальнейшего использования.

Работа выполнена при поддержке РФФ, проект № 18-72-10044.

1. M. Staňo *et al.*, Handbook of magnetic materials — N.H.: Elsevier, **27**, (2018).
2. A.K. Wanekaya *et al.*, Electroanalysis **18**, 533 (2006).

НЕРАВНОВЕСНОЕ КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ МУЛЬТИСЛОЙНЫХ МАГНИТНЫХ НАНОСТРУКТУР

М.М. Болдырева*, П.В. Прудников, В.В. Прудников, М.В. Мамонова

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

*e-mail: ffi-95@mail.ru

Особенности неравновесной критической динамики могут служить основой для понимания и адекватной интерпретации экспериментальных данных, полученных для мультислойных магнитных структур. Существует большое количество статей, посвященное исследованиям возникновения эффектов старения в мультислойных структурах различных материалов [1]. Эффекты старения характеризуются замедлением корреляционных и релаксационных процессов с увеличением «возраста» системы, как времени между подготовкой и началом измерения характеристик образца [2]. В данной работе проведено исследование методом Монте-Карло неравновесного поведения магнитной мультислойной структуры Co/Cu(100)/Co, состоящей из чередующихся магнитных и немагнитных нанослоев при медленной эволюции системы из неравновесного начального состояния для толщин пленки $N = 3$ и $N = 5$ монослоев и линейным размером системы $L = 64$.

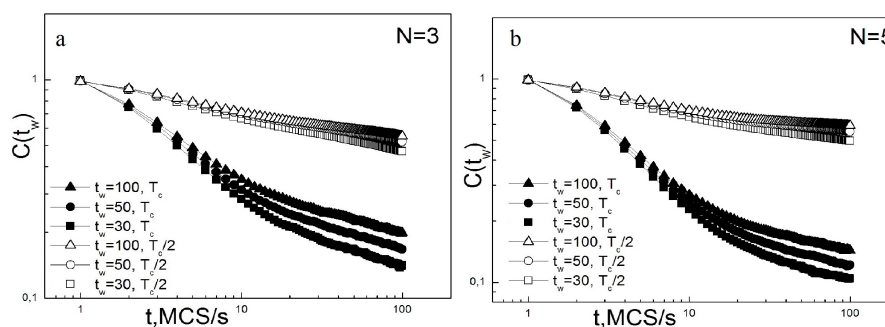


Рис. 1. Графики зависимости автокорреляционной функции от времени наблюдения при временах ожидания $t_w = 30; 50; 100$ при $N = 3$ (а) и $N = 5$ (б). Измерения проводились при критической температуре T_c и при $1/2$ от критической температуры, при $L = 64$ из высокотемпературного начального состояния.

В ходе исследования получены результаты из высокотемпературного начального состояния системы для значения автокорреляционной функции $C(t, t_w)$, где t_w — это время ожидания, t — время наблюдения. Наблюдается возникновение эффектов старения автокорреляционной функции, т.е. зависимость временного спада корреляционных эффектов от времени ожидания t_w . Выявленные эффекты старения для нашей модели многослойной структуры получены в хорошем согласии с экспериментальными результатами, представленными в работе [3].

Работа поддержана грантами РФФИ № 20-32-90226, 20-32-70189, Министерством образования и науки РФ в рамках государственного поручения № 0741-2020-0002 и Совета по грантам Президента РФ №MD-2229.2020.2. Расчеты проводились с использованием ресурсов, предоставленных Shared Facility Center Data Center ДВО РАН (Хабаровск), Суперкомпьютерным центром МГУ им. М.В. Ломоносова и Объединенным суперкомпьютером Центра РАН.

1. C. Chappert, A. Fert, F. Van Dau, *Nature Materials* **6**, 813 (2007).
2. V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, M.V. Mamonova, M.M. Firstova, A.A. Samoshilova. *J. Phys. Communication* **3**, 015002 (2019).
3. T. Mukherjee, M. Pleimling, C. Binek, *Phys. Rev. B* **82**, 134425 (2010).

ИССЛЕДОВАНИЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО МАГНИТНОГО СОСТОЯНИЯ БИНАРНОГО ИНТЕРМЕТАЛЛИДА Ho_7Rh_3 МЕТОДАМИ НЕЙТРОННОЙ ДИФРАКЦИИ И АС МАГНИТНОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ

А.А. Ваулин^{1*}, Н.В. Баранов^{1,2}, А.Ф. Прекул¹, Т. Тсутаока³, А.Ф. Губкин^{1,2}

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

³Graduate School of Education, Hiroshima University, Higashi-Hiroshima, Japan

*e-mail: vaulin@imp.uran.ru

Бинарные редкоземельные интерметаллиды R_7Rh_3 привлекают внимание исследователей наличием сложных магнитных фазовых диаграмм, магнитотепловых и магниторезистивных свойств. В частности, для соединения Ho_7Rh_3 было показано существование трех магнитных фазовых переходов при охлаждении ниже $T_N = 32$ К, $T_{t1} = 21$ К и $T_{t2} = 9$ К, а также гигантского магниторезистивного эффекта в области низких температур [1,2]. В данной работе было проведено комплексное исследование низкотемпературного магнитного состояния Ho_7Rh_3 при помощи нейтронной дифракции и нелинейной АС магнитной восприимчивости.

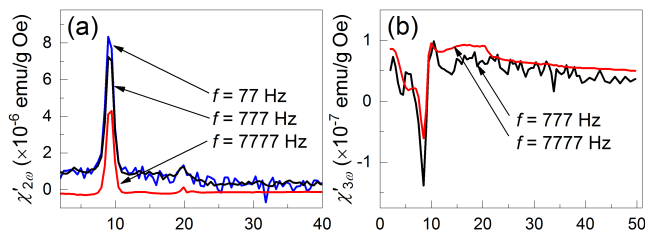


Рис. 1. Температурная зависимость реальных $\chi'_{n\omega}(T)$ ($n = 2, 3$) (а, б) гармоник АС магнитной восприимчивости при различных частотах осциллирующего магнитного поля.

волны по направлению к прямоугольной структуре типа «антифазных доменов». При $T < T_{t2} \sim 9$ К магнитная структура может быть описана группой магнитной суперсимметрии $Cmc'2'_1(00g)ss0$, которая является подгруппой с индексом $i = 2$ для родительской группы $Cmc2_11'(00g)s0ss$ и разрешает появление спонтанной намагниченности в базисной плоскости гексагональной структуры Ho_7Rh_3 при сохранении несоизмеримого характера. Измерения нелинейной АС восприимчивости показали, что изменения магнитной структуры при охлаждении ниже T_{t1} и появление спонтанной намагниченности в образце сопровождаются ярко выраженными аномалиями на температурных зависимостях 2-й и 3-й гармоник АС восприимчивости (рис. 1), по-видимому, вследствие понижения симметрии магнитной подсистемы в связи с потерей операции инверсии времени $\{1'|0001/2\}$.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 20-32-90047 и госзадания Минобрнауки (темы «Поток», № ААААА18-118020190112-8 и «Сплавы», № АААА-А19-119070890020-3).

1. T. Tsutaoka *et al.*, *Physica B* **327**, 352 (2003);

2. T. Tsutaoka *et al.*, *Journal of Alloys and Compounds* **654**, 126 (2016).

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ FeRh ПО ДАННЫМ НЕЙТРОННОЙ ДИФРАКЦИИ И ХОЛЛОВСКОЙ МАГНИТОМЕТРИИ

А.А. Ваулин^{1*}, А.М. Сантос², Р.Р. Гимаев³, А.Ф. Губкин¹, В.И. Зверев³¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия²Neutron Scattering Division, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, USA³Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*e-mail: vaulin@imp.uran.ru

Сплавы на основе Fe–Rh являются интересным объектом для исследований в связи с магнитным фазовым переходом из антиферромагнитного (АФМ) в ферромагнитное (ФМ) состояние в области комнатных температур и сопровождающим его гигантским магнитокалорическим эффектом (МКЭ). Легирование сплавов Fe–Rh переходными металлами Pd, Pt, Ni позволяет варьировать температуру фазового перехода, что значительно расширяет область практического применения данного семейства сплавов. В настоящей работе проведено исследование динамики фазовых превращений в образцах $\text{Fe}_{50.4}\text{Rh}_{49.6}$, $\text{Fe}_{49.7}\text{Rh}_{47.4}\text{Pd}_{2.9}$ и $\text{Fe}_{48.3}\text{Rh}_{46.8}\text{Pd}_{4.9}$ методами нейтронной дифракции и Холловской магнитометрии.

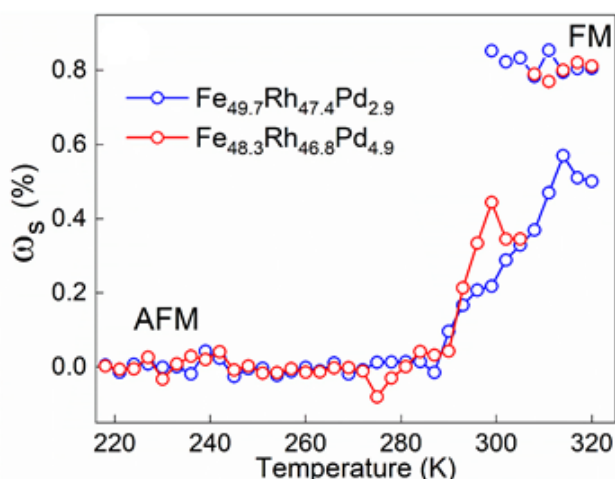


Рис. 1. Температурная зависимость спонтанной объемной магнестрикции для образцов $\text{Fe}_{49.7}\text{Rh}_{47.4}\text{Pd}_{2.9}$ и $\text{Fe}_{48.3}\text{Rh}_{46.8}\text{Pd}_{4.9}$.

Анализ данных времяпролетной нейтронной дифракции в широком интервале температур для соединений $\text{Fe}_{50.4}\text{Rh}_{49.6}$, $\text{Fe}_{49.7}\text{Rh}_{47.4}\text{Pd}_{2.9}$ и $\text{Fe}_{48.3}\text{Rh}_{46.8}\text{Pd}_{4.9}$ показал присутствие в образцах неупорядоченной ГЦК γ -фазы ($\omega = 7 - 9\%$). Было показано, что при температурах ниже АФМ–ФМ фазового перехода магнитное состояние каждого образца может быть описано моделью антиферромагнитной структуры G-типа, реализующейся на подрешетке Fe, а при температурах выше перехода все образцы демонстрируют ферромагнитное упорядочение обеих подрешеток Fe и Rh. Этот результат хорошо согласуется с опубликованными ранее результатами нейтронографического исследования систем типа FeRh [1]. Детальное нейтронографическое исследование в области фазового перехода АФМ–ФМ показало, что в образцах реализуется 3x-компонентное пространственно-неоднородное состояние с широким термомагнитным гистерезисом: (i) ОЦК структура с параметром элементарной ячейки a_1 и АФМ упорядочением; (ii) ОЦК структура с параметром элементарной ячейки a_2 и ФМ упорядочением; (iii) ГЦК γ -фаза с не зависящей от температуры массовой долей $\omega \sim 8\%$. Проведена оценка спонтанной объемной магнестрикции при переходе АФМ–ФМ (рис. 1). Данные нейтронной дифракции были подтверждены при помощи Холловской магнитометрии.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки (тема «Поток» № АААА-А18-118029192112-8 и «Сплавы» № АААА-Ф19119070890020-3).

1. G. Shirane, R. Nathans, C.W. Chen, Phys. Rev. **134**, A1547 (1964).

ТЕПЛОЕМКОСТЬ И МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В МАНГАНИТАХ $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$

А.Б. Гаджиев^{1*}, А.Г. Гамзатов¹, S. Dwi Nanto², B. Kurniawan³, S.C. Yu⁴, А.М. Алиев¹

¹Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

²Syarif Hidayatullah States Islamic University, Jakarta, Indonesia

³Physics department, Universities Indonesia, Indonesia

⁴Ulsan National Institute of Science and Technology, Ulsan, South Korea

*e-mail: mr.gadzhiev.93@mail.ru

Исследования последних лет направлены на поиски новых составов и методов улучшения магнитокалорических свойств манганитов AMnO_3 . В этом направлении достигнуты определенные успехи, и предлагаются различные способы для улучшения магнитокалорических свойств манганитов (изготовление композитов, напыление на поверхность магнитомягкой пленки и т.д.). Один из методов, позволяющих улучшить магнитокалорические свойства, это синтез (получение) образцов со смешанным замещением как в А подрешетке, так и в подрешетке Mn [1–3]. Поскольку в этих сериях манганитов замещаются ионы в разных узлах решетки, соответственно разным будет характер поведения исследуемых параметров. Все это позволяет управлять физическими свойствами манганитов.

В данной работе представлены результаты экспериментального исследования теплоемкости (C_p), а также прямые и косвенные измерения магнитокалорического эффекта (МКЭ) (ΔT , ΔS) для образцов $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0, 0.02, 0.05, 0.10$) в интервале температур 80 – 400 К и в магнитных полях до 1.8 Тл.

На температурной зависимости теплоемкости для всех образцов наблюдаются ярко выраженные аномалии, связанные с фазовым переходом ферромагнетик–парамагнетик (ФМ–ПМ). Частичное замещение Sr барием приводит к смещению температуры перехода, T_C , в сторону низких температур. Так, для $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ ($x = 0$) $T_C = 362$ К, а для $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.2}\text{Ba}_{0.1}\text{MnO}_3$ ($x = 0.1$) $T_C = 280$ К. Из данных $C_p(T)$ были получены температурные зависимости изменения энтропии, связанные с разупорядочением магнитной системы при фазовом переходе ФМ–ПМ, которые определялись с помощью формулы: $\Delta S^*(T) = \int (\Delta C_p/T) dT$. Значения ΔS^* для системы $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$ варьируются в пределах от 1.2 до 2.4, что намного меньше идеальных значений для Изинговских ($\Delta S^* = R \ln 2 = 5.7$ Дж/моль·К) и Гейзенберговских ($\Delta S^* = R \ln 4 = 11.52$ Дж/моль·К) систем [5]. Такая разница экспериментальных данных и теоретических оценок величины ΔS^* является характерной для манганитов и может быть следствием нескольких причин [6]. Результаты прямых исследований МКЭ хорошо коррелируют с данными теплоемкости. Максимальная величина МКЭ в поле 1.8 Тл равна $\Delta T = 0.86$ К и наблюдается для образца $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.28}\text{Ba}_{0.02}\text{MnO}_3$ при $T = 343$ К. Для образцов с $x = 0, 0.02$ и 0.05 величина МКЭ слабо меняется с допированием и колеблется в пределах $\Delta T \sim 0.8$ К, при этом T_C смещается более чем на 40 К. Это означает, что путем регулирования уровня замещения можно управлять T_C в широкой области температур, что является важным преимуществом для создания композитных магнитокалорических материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 18-12-00415.

1. Y. Zhang, P. J. Lampen *et al.*, Journal of Applied Physics **111**(6), 063918 (2012).
2. T. L. Phan, N. T. Dang *et al.*, Journal of Alloys and Compounds, **657**, 818-834 (2016).
3. M. H. Phan, S. C. Yu, N. H. Hur, Appl. Phys. Lett. **86**(7), 072504 (2005).
4. Y. Moritomo, A. Machida *et al.*, Phys.Rev. B **64**, 214409 (2001).
5. A.G. Gamzatov, A.M. Aliev *et al.*, JMMM **474**, 477 (2019).
6. A.B. Batdalov, A.G. Gamzatov, Journal of Alloys and Compounds **782**, 729 (2019).

МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ СИСТЕМЫ $Mn_{1-x}Fe_xAs$ В ЦИКЛИЧЕСКИХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХА.Б. Гаджиев^{1*}, А.Г. Гамзатов¹, А.М. Алиев¹, В.И. Митюк², Г.А. Говор²¹Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия²НПЦ 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 различными характеристиками, с различными рабочими телами, различной конструкции и т.д. [1–3]), 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 длительного 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 магнитоструктурным 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 Тл. Показано, что максимальная величина МКЭ наблюдается для образца с $x = 0.006$, и в поле 8 Тл равна $\Delta T = 9.2$ К. Надо отметить, что в поле 1.8 Тл максимальный эффект демонстрирует образец с $x = 0.003$. Такая разница в максимальных значениях МКЭ для разных концентраций Fe в образцах при разных полях связана с различной полевой зависимостью МКЭ. Длительное воздействие циклического поля 8 Тл (более 1000 циклов вкл/выкл) приводит к незначительным эффектам деградации МКЭ.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и БРФФИ в рамках научного проекта № 20-52-00047.

1. B. Yu, M. Liu, *et.al.*, 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).

МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА ПО ДАННЫМ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ИЗМЕРЕНИЙ ВБЛИЗИ МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

А.Г. Гамзатов

Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
e-mail: gamzatov_adler@mail.ru

Манганиты являются яркими представителями сильно коррелированных электронных систем, в которых наблюдается тесная связь между электронной, магнитной и решеточной подсистемами [1]. Это означает, что параметры, характеризующие состояние одной из подсистем, будут коррелировать с параметрами двух других. Любое внешнее воздействие (магнитное поле, давление и т.д.), приводящее к изменению магнитного состояния системы вблизи температуры магнитного фазового перехода T_C , влечет за собой изменение параметров этих подсистем (электросопротивление, ρ , намагниченность, теплоемкость, магнитострикция, $\Delta\epsilon$, и т.д.). Яркими проявлениями изменений таких параметров в манганитах в магнитном поле являются эффект колоссального магнитосопротивления (КМС), гигантский магнитокалорический эффект МКЭ), гигантская магнитострикция и т.д.

Вопрос взаимосвязи электросопротивления с изменением энтропии вблизи магнитных фазовых переходов для ряда магнитных материалов хорошо изучен [2-6]. Простую линейную связь между изменением магнитной энтропии и ρ с коэффициентом пропорциональности, не зависящим от температуры, предсказывают и теоретические исследования, основанные на моделях $s - d$ обмена [7], модели двойного обмена [8]. В манганитах оценки величины МКЭ из магнитотранспортных данных обсуждались в ряде работ [5-6], где показано, что по данным электросопротивления можно с хорошей точностью оценить не только максимальное значение, но и температурную зависимость МКЭ. Для системы $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.2}\text{Ca}_{0.1}\text{MnO}_3$ показано [9], что существует прямая связь между изменением энтропии и магнитострикцией ($\Delta S \sim \Delta\epsilon$).

Идея данной работы заключается в том, что изменение спинового состояния в магнитном поле вблизи T_C приводит не только к появлению эффектов КМС, МКЭ и гигантской магнитострикции, но и к изменению механизмов электро- и теплопереноса вследствие изменения механизмов рассеяния. А потому, по изменениям электросопротивления, теплопроводности, термодиффузии в магнитном поле можно качественно установить связь параметров, описывающих магнитную подсистему с кинетическими коэффициентами. Предложенная идея реализована на примере манганитов [10]. Полученные результаты свидетельствуют о том, что механизмы, приводящие к изменению теплофизических параметров в магнитном поле вблизи T_C , непосредственно связаны с изменением намагниченности системы.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и ВАНТ в рамках научного проекта № 20-58-54006, а также при финансовой поддержке гранта РНФ № 18-12-00415.

1. V. Markovich *et al.*, Handbook of Magnetic Materials **22**, 1-201 (2014).
2. R. Rawat I. Das, J. Phys.: Cond. Matter **13**, L379 (2001).
3. N. Sakamoto, T. Kyômen, S. Tsubouchi, M. Itoh, Physical Review B **69**, 092401 (2004).
4. J.C.P. Campoy, E.J.R. Plaza, A.A. Coelho, S. Gama, Physical Review B **74**, 134 410 (2006).
5. C.M. Xiong, J.R. Sun *et al.*, IEEE Transactions on Magnetics **41**, 122 (2005).
6. A.G. Gamzatov, A.B. Batdalov, Physica B **406**, 1902 (2011).
7. T. Kasuya, Prog. Theor. Phys. **16**, 58 (1956).
8. K. Kubo, N. Ohata, Journal of the Physical Society of Japan **33**, 21 (1972).
9. A. G. Gamzatov, A.M. Aliev *et al.*, Journal of Applied Physics **124**, 183902 (2018).
10. A.G. Gamzatov, A.B. Batdalov *et al.*, JMMM, **513**, 167209 (2020).

ЗАРОЖДЕНИЕ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ МАГНИТНЫХ ДОМЕНОВ С 90-ГРАДУСНОЙ ДОМЕННОЙ ГРАНИЦЕЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ПОЛЕМ ПОЛОЖИТЕЛЬНОЙ И ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ ПОЛЯРНОСТИ

Т.Т. Гареев*, К.С. Антипин, Н.В. Мясников, Е.П. Николаева, А.П. Пятаков
 Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
 *e-mail: gareev.tt14@physics.msu.ru

Контроль над микромагнитными структурами с помощью неоднородного электрического поля (неоднородный магнитоэлектрический эффект) представляет как фундаментальный интерес в физике мультиферроиков, так и практический — в устройствах спинтроники. На сегодняшний день в работах [1-4] была продемонстрирована возможность электроиндуцированного зарождения микромагнитных топологических неоднородностей — цилиндрических магнитных доменов и скирмионов. Однако зарождение микромагнитных структур наблюдалось только при приложении электрического поля положительной полярности.

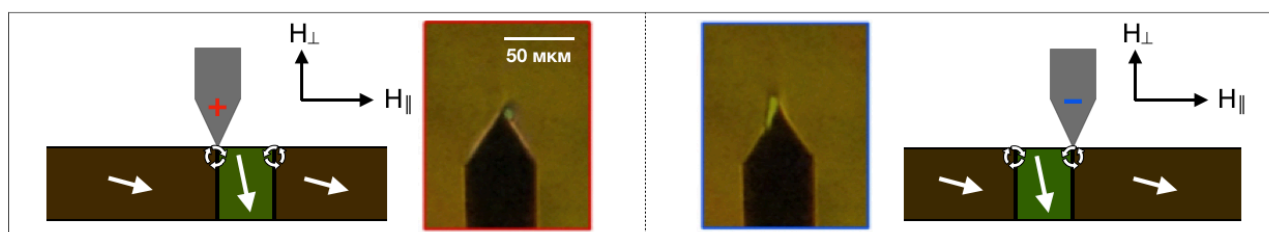


Рис. 1. Электроиндуцированное зарождение цилиндрического магнитного домена: положительно / отрицательно заряженный заостренный электрод.

В настоящей работе нами была показана возможность электроиндуцированного зарождения цилиндрических магнитных доменов с 90-градусной доменной границей как при приложении электрического поля с положительным знаком полярности, так и с отрицательным (рис. 1). В отличие от зарождения цилиндрических магнитных доменов со 180-градусной доменной границей, в случае с 90-градусной доменной границей такой эффект возможен из-за меньших энергетических затрат, требуемых для изменения направления намагниченности.

Данный эффект наблюдался в плёнках ферритов гранатов $(\text{BiLu})_3(\text{FeGa})_5\text{O}_{12}$, выращенных на $\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ с кристаллографической ориентацией (110). Электрическое поле подавалось с высоковольтного источника на электрод, под которым происходило зарождение цилиндрического магнитного домена. В качестве электрода использовалась игла кантилевера VIT_P_C-A NT-MDT сканирующего зондового микроскопа в контактной моде. Величина напряжения, подводимого к электроду, достигала значений $U = \pm 500$ В. Для зарождения цилиндрических магнитных доменов к образцу дополнительно прикладывалось внешнее магнитное поле, направленное перпендикулярно к плоскости подложки образца ($H_{\perp} = 15$ Э); для усиления явления неоднородного магнитоэлектрического эффекта также было приложено магнитное поле в плоскости образца ($H_{\parallel} = 170$ Э). Для визуализации микромагнитной структуры использовался магнитооптический эффект Фарадея.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-02-00828 А.

1. Д. П. Куликова и др., Письма в ЖЭТФ, **104**, 3, 196 (2016).
2. D.P. Kulikova *et al.*, Phys. Status Solidi - Rapid Res., **12**, 1800066 (2017).
3. M. Schott *et al.*, Nano Lett., **17**, 3006 (2017).
4. P. Huang, Nano Lett., **18**, 5167 (2018).

СПИН-ПЕРЕОРИЕНТАЦИОННЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В (110)-ПЛЕНКАХ ФЕРРИТА ВИСМУТА

Т.Т. Гареев^{1*}, А.П. Пятаков¹, З.В. Гареева², А.К. Звездин³

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

²Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфа, Россия

³Институт общей физики им. Прохорова РАН, Москва, Россия

*e-mail: gareev.tt14@physics.msu.ru



Рис. 1. Фазовая диаграмма (110)-пленки BiFeO_3 . $\mathbf{H} \parallel [110]$, $k_1 = 4K_1A/\gamma^2$. 1,2 — линии СПФП второго рода.

В данной работе исследованы особенности фазовых переходов между ПМС и однородными состояниями намагниченности в (110)-ориентированных пленках BiFeO_3 . Термодинамический потенциал системы имеет вид [2]:

$$F = -\frac{\chi_{\perp}}{2} \left(\mathbf{H}_{\text{eff}}^2 - (\mathbf{H}_{\text{eff}} \mathbf{l})^2 \right) + A(\nabla \mathbf{l})^2 + \gamma \mathbf{e}_p ((\mathbf{l} \text{grad}) \mathbf{l} - \mathbf{l}(\text{div} \mathbf{l})) + K_1(\mathbf{n}_u \mathbf{l})^2 + K_2(\mathbf{n}_z \mathbf{l})^2, \quad (1)$$

где $\mathbf{H}_{\text{eff}} = \mathbf{H} + \mathbf{H}_D[\mathbf{l} \times \mathbf{e}_p]$ — эффективное магнитное поле, \mathbf{H}_D — поле Дзялошинского, \mathbf{H} — внешнее магнитное поле, A — константа неоднородного обменного взаимодействия, K_1, K_2 — константы наведенной магнитной анизотропии, χ_{\perp} — поперечная составляющая магнитной восприимчивости, \mathbf{e}_p — единичный вектор электрической поляризации $\mathbf{P}_{\parallel}[111]$, γ — константа магнитоэлектрического взаимодействия, \mathbf{l} — единичный вектор антиферромагнетизма, $\mathbf{n}_u = [110]$, $\mathbf{n}_z = [1\bar{1}0]$ — единичные вектора, ориентированные по нормали к поверхности пленки и в плоскости пленки. Параметры BiFeO_3 $A = 2 \cdot 10^{-12} \text{ J/m}$, $H_D = 10^5 \text{ Э}$, $\chi_{\perp} \sim 5 \cdot 10^{-5}$, $\gamma = 0.6 \text{ mJ/m}^2$, $10^3 \text{ J/m}^3 < K_i < 10^5 \text{ J/m}^3$ ($i = 1, 2$) [2]. На основе минимизации термодинамического потенциала (1) рассчитаны основные магнитные состояния. Показана возможность реализации однородных магнитных состояний типа «легкая плоскость» (EP), угловая Т-фаза, ПМС циклоидного и конусного вида. Исследованы спин-переориентационные фазовые переходы (СПФП) при изменении величины магнитного поля $\mathbf{H} \parallel [110]$ и константы магнитной анизотропии k_1 определены критические параметры k_{1c} , k_{2c} , k_{3c} . Результаты расчетов показаны на рис. 1.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-02-00828 А.

1. I. Sosnowska, T. Neumaier, E. Steichele, J. Phys. C. Solid State Phys. **15**, 4835 (1982).
2. А.К. Звездин, А.П. Пятаков, УФН **174**, 465 (2004).
3. S. Kawachi *et al*, Phys. Rev. Mater. **1**, 024408 (2017).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МОНОДОМЕННОГО СОСТОЯНИЯ И ФАЗОВЫЙ АНАЛИЗ
ФЕРРОМАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ ПО ДАННЫМ ЯМР

А.Ю. Гермов*, Д.А. Прокопьев, К.Н. Михалёв, Б.Ю. Голобородский, А.С. Конев

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: germov@imp.uran.ru

Магнитные наночастицы представляют интерес с появлением всё большего количества их практических приложений. Наночастицы на основе металлов группы железа применяются в катализе [1], биомедицине [2], а также при создании радиопоглощающих материалов [3], нанокомпозитов с квантовыми точками [4,5], суперконденсаторов [6], феррожидкостей и модифицированных поверхностей [7]. Углеродное покрытие наночастиц, с одной стороны, предохраняет сами наночастицы от воздействия агрессивной внешней среды, а с другой – защищает живые ткани организма от токсичных соединений металлов группы железа. При синтезе подобных наночастиц, есть вероятность образования карбидов и металл-углеродных фаз, которые существенно изменяют магнитные свойства частиц.

Для наиболее эффективного прикладного использования магнитных наночастиц необходимо точно контролировать их магнитные характеристики, которые определяются составом и размером частиц. Традиционные методы исследования фазового состава и кристаллической структуры наночастиц не всегда применимы. Резонансные методы, такие как ядерный магнитный резонанс и мёсбауэровская спектроскопия, успешно применяются для исследования наночастиц [8-10] и позволяют определять фазовый состав, локальные распределения сверхтонких полей и зарядов.

В качестве образцов были взяты наночастицы железа в углеродной оболочке. Средний размер частиц составлял 19 нм. Наночастицы были аттестованы с помощью нескольких методов. По данным рентгеновской дифракции наблюдается лишь одна фаза ОЦК железа. Измерения намагниченности дают значение намагниченности насыщения почти вдвое меньше ожидаемого, что говорит о наличии дополнительных фаз. Электронная микроскопия высокого разрешения показывает наличие дополнительных металл-углеродных фаз, но их количество определить не удается.

В работе получены результаты, позволяющие сделать количественный фазовый анализ ферромагнитных наночастиц на основе железа с помощью ЯМР ^{57}Fe ($T = 4.2$ К) и мёсбауэровской спектроскопии ($T = 300$ К). Обнаружены фазы карбидов Fe_3C , Fe_5C_2 , а также парамагнитные фазы γ -железа и твердых растворов железо-углерод. В спектрах ЯМР обнаружена линия, соответствующая однодоменному состоянию. Обсуждаются наведенные сверхтонкие поля на ядрах ^{57}Fe в однодоменных частицах, полученные по данным двух резонансных методов.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Функция» № АААА-А19-119012990095-0.

1. Lopez-Tejedor *et al.*, Catal. Sci. Technol., **8**, 1754 (2019).
2. S. Singamaneni *et al.*, J. Mater. Chem., **21**, 16819 (2011).
3. J. C. Sun, Journal of Alloys and Compounds, **782**, 193-202 (2019).
4. M. Arvand and S. Hemmati, Sensors and Actuators B: Chemical, **238**, 346 (2017).
5. Q.-Y. Zhuang *et al.*, Nanotechnology, **31**, 065101 (2020).
6. E. Mitchell *et al.*, New Journal of Chemistry, **38**, 9 (2014).
7. L. Lindenthal *et al.*, Catalysts, **10**, 268 (2020).
8. K.N. Mikhalev *et al.*, Mater. Res. Express **5**, 055033 (2018).
9. N.E. Gervits *et al.*, Beilstein J. Nanotechnol, **10**, 1964 (2019).
10. M. Manjunatha *et al.*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **453**, 125 (2018).

АНОМАЛЬНОЕ ИЗМЕНЕНИЕ РАЗМЕРА СПИНОВОГО ПОЛЯРОНА В ПАРАМАГНИТНОЙ ОБЛАСТИ ТЕМПЕРАТУР

С.А. Гудин*, Н.И. Солин

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: gudin@imp.uran.ru

В работе продолжены исследования магнитных и электрических свойств двойного перовскита $\text{La}_{1.2}\text{Sr}_{1.8}\text{Mn}_2\text{O}_7$ [1-3], обладающего вблизи температуры Кюри величиной колоссального магнитосопротивления, превышающего 1200. Представлены результаты расчетов удельной проводимости для магнитных полей от 0 до 90 кЭ и температур от 5 до 300 К. В работе считается, что магнитосопротивление в рассматриваемом соединении определяется изменением размеров и направлений магнитных моментов магнитных неоднородностей (спиновых поляронов), — «спин-поляронный» и «ориентационный» механизмы соответственно [4-7]. Под спиновыми поляронами понимаются квазичастицы, описывающие ферромагнитные зарядовые неоднородности нанометровых размеров. Удельная проводимость определяется прыжковой проводимостью носителей с одного спинового (ферромагнитного) полярона на соседний [4-5]. Величина энергетического барьера обратно пропорциональна размеру спинового полярона. Линейный размер спинового полярона (размер полярона вдоль направления, приложенного магнитного поля) увеличивается как с ростом приложенного магнитного поля, так и уменьшением температуры. Показано, что наблюдаемое в $\text{La}_{1.2}\text{Sr}_{1.8}\text{Mn}_2\text{O}_7$ колоссальное магнитосопротивление хорошо описывается на основе «ориентационного» и «спин-поляронного» механизмов проводимости. В работе обнаружено, что при отсутствии магнитного поля линейный размер спинового полярона уменьшается с ростом температуры в ферромагнитной области, а при переходе манганита в парамагнитное состояние линейный размер начинает возрастать, достигая максимума при 180 К. При температурах, превышающих 180 К, аномальное температурное изменение размера спинового полярона исчезает. При отсутствии магнитного поля обнаруженный пик на кривой изменения размера полярона максимален, с включением магнитного поля высота пика уменьшается. В поле 20 кЭ пик полностью исчезает, переходя в точку перегиба на температурной кривой размера спинового полярона. В магнитных полях больше 30 кЭ аномальное температурное поведение размера полярона полностью пропадает. Предложены механизмы, объясняющие такое аномальное температурное поведение размера спинового полярона.

Авторы благодарят К.И. Кугеля за ценные замечания, сделанные при обсуждении результатов этой работы. 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, Н.И. Солин, и др., ФТТ **60**, 6, 1067 (2018).
2. С.А. Гудин, Н.И. Солин, ФТТ **62**, 5, 669 (2020).
3. С.А. Гудин, Н.И. Солин, ЖЭТФ **157**, 4, 648 (2020).
4. A.L. Rakhmanov, K.I. Kugel, Ya.M. Blanter *et al.*, Phys. Rev. B. **63**, 174424 (2001).
5. К.И. Кугель, А.Л. Рахманов, А.О. Сбойчаков и др., ЖЭТФ **125**, 648 (2004).
6. С.А. Гудин, М.И. Куркин, Э.А. Нейфельд и др., ЖЭТФ **148** (5), 1005 (2015).
7. М.И. Куркин, Э.А. Нейфельд, А.В. Королев и др., ЖЭТФ **143**, 948 (2013).

КОНТРОЛИРУЕМОЕ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЕ (PrDy)(FeCoB) МИКРОИГЛ РАЗЛИЧНОЙ ГЕОМЕТРИИ

Е.В. Дворецкая*, О.В. Коплак

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия

*e-mail: dvoretzkaya95@yandex.ru

Методом экстракции висящей капли расплава (ЭВКР) получен новый тип микроигл на основе (PrDy)(FeCoB) сплава. Широкий спектр возможных модификаций диаметра ($\varnothing = 20 - 100 \mu\text{m}$), шероховатости поверхности ($Ra = 5 - 50 \text{ nm}$), фазового состава (доля аморфной фазы от 20 до 85%), содержания редкоземельных и переходных металлов, формы поперечного сечения (от практически круглой до линзообразной) микропроводов и микроигл за счет изменения скорости охлаждения капли расплава и вариаций элементов в сплаве позволяют использовать их в качестве зондов в магнитных манипуляторах, микропинцетах, датчиках магнитных полей и др. [1-4]. В работе приведен анализ процесса перемагничивания (PrDy)(FeCoB) микроигл в зависимости от геометрии образца и доли аморфной фазы.

Магнитная бистабильность, характеризующаяся прямоугольной петлей гистерезиса, наблюдается в микроиглах (PrDy)(FeCoB) диаметром менее $50 \mu\text{m}$ и длиной более $150 \mu\text{m}$, ориентированных вдоль направления магнитного поля (вставка рис. 1а). Зависимости $M(H)$, полученные при разных ориентациях микроиглы по отношению к магнитному полю, демонстрируют угловые зависимости магнитного момента, намагниченности насыщения (рис. 1а). Оценено влияние геометрических параметров микроигл (длина, диаметр) на ориентационную зависимость коэрцитивной силы и остаточной намагниченности.

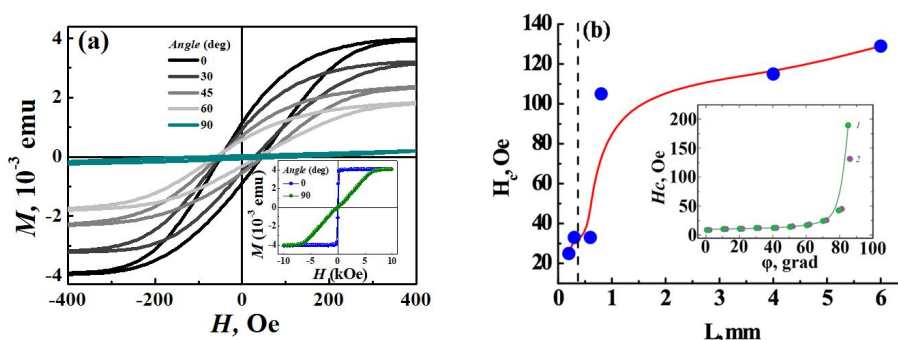


Рис. 1. (а) — Полевая зависимость магнитного момента микроиглы при разных углах φ между осью микроиглы и магнитным полем; (б) — Зависимость коэрцитивной силы H_c с изменением длины микроиглы. На вставке показана угловая зависимость H_c в магнитном поле 0.1 кОе (1) и 1 кОе (2).

Укорочение микроиглы приводило к уменьшению коэрцитивной силы от 130 до 20 Ое, при этом появлялся дополнительный наклон петли гистерезиса, снижался показатель прямоугольности от 0.93 до 0.18 (рис. 1б). Значение коэрцитивной силы изменялось примерно в том же диапазоне при смене ориентации образца относительно направления магнитного поля (вставка рис. 1б). Угловая зависимость коэрцитивной силы H_c описывалась зависимостью $H_c = H_{c0} / \cos \varphi$ (сплошная линия рис. 1б). Установлены факторы, определяющие коэрцитивную силу и формирующие петлю гистерезиса в (PrDy)(FeCoB) микроиглах, и механизм их перемагничивания.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ «Стабильность» 20-32-70025.

1. R.V. Morgunov и др., JMMM **497**, 166004 (2020).
2. О.В. Коплак и др., ФТТ **61**, 2090 (2019).
3. О.В. Коплак и др., ФТТ **62**, 1187 (2020).
4. R. Morgunov и др., Materials Letters **273**, 127954 (2020).

МИКРОМАГНИТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОКОМПОЗИТНЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ МАГНИТОМЯГКОЙ И МАГНИТОТВЕРДОЙ ФАЗ

Е.Ю. Деньгина*, А.С. Болячкин, А.С. Волегов

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: dengina.ekaterina@urfu.ru

Одним из перспективных направлений развития магнитных материалов в области высокоанизотропных соединений является разработка нанокompозитов на основе магнитотвердой ($\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, SmCo_5 , FePt и др.) и магнитомягкой (Fe , Fe-Co и др.) фаз, а также модельных представлений о них. У подобных материалов при определенных условиях прогнозируется существенное увеличение максимального энергетического произведения по сравнению с таковым значением для магнитотвердой фазы в отдельности [1]. На фоне растущего спроса на выработку электроэнергии использование более эффективных функциональных наноматериалов в электромоторах и генераторах способно привести к значительной экономии природных ресурсов, а также к уменьшению загрязнения окружающей среды. Помимо этого, преодоление порога максимального энергетического произведения в 64 МГсЭ ($\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$) даст импульс для дальнейшей миниатюризации электромеханических устройств и поддержит стремительно развивающиеся индустрии ветрогенераторов, электро- и гибридных автомобилей.

Но на пути создания нанокompозитных постоянных магнитов возникает множество проблем как фундаментального характера, так и технологического [2]. К первым относятся трудности в модельном описании нанокompозита как системы кристаллитов, взаимодействующих посредством близкодействующего обменного и дальнодействующего магнито-статического взаимодействий. В частности, доподлинно неизвестны характеристики обменного взаимодействия на границе между кристаллитами и то, как на них влияют микроструктура границы и микромагнитные свойства фаз. Развитие компьютерных моделей нанокристаллических магнетиков как на атомистическом уровне, так и микромагнитном призвано внести определенность в данном вопросе [3]. К проблемам технологического характера относятся сложности обеспечения необходимой микроструктуры нанокompозита во время синтеза (фазовый состав, размеры фазовых выделений и их взаимное расположение, реализация кристаллографической текстуры и др.).

Данная работа посвящена микромагнитному моделированию нанокompозита на основе магнитомягкой фазы $\alpha\text{-Fe}$ и магнитотвердой фазы $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$. Компьютерное моделирование проводилось в программном пакете Muph3 в квазистатическом режиме. Целью работы выступает исследование влияния на гистерезисные магнитные свойства такого нанокompозита двух факторов: величины обменного взаимодействия между кристаллитами и микроструктуры композита. А именно, в работе установлены и проанализированы зависимости коэрцитивной силы и максимального энергетического произведения от объемного соотношения фаз и коэффициента обменной связи между кристаллитами. Полученные результаты позволяют сделать выводы о том, при каких условиях достигаются оптимальные магнитные свойства нанокompозита.

Работа выполнена при поддержке гранта МК-1746.2020.2.

1. R. Skomski and J. M. D. Coey, *Physical Review B* **48**, 15812 (1993).
2. B. Balamurugan, D.J. Sellmyer, G.C. Hadjipanayis and R. Skomski, *Scripta Materialia* **67**, 542 (2012).
3. S. Erokhin and D. Berkov, *Physical Review Applied* **7**, 014011 (2017).

МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В СПЛАВЕ GdZn В ЦИКЛИЧЕСКИХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Ш.З. Джабраилов^{1*}, А.М. Алиев¹, V. Franco²

¹Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

²Department of Condensed Matter Physics, University of Sevilla, University of Sevilla, Seville, Spain

*e-mail: dzhabraiлов70419@mail.ru

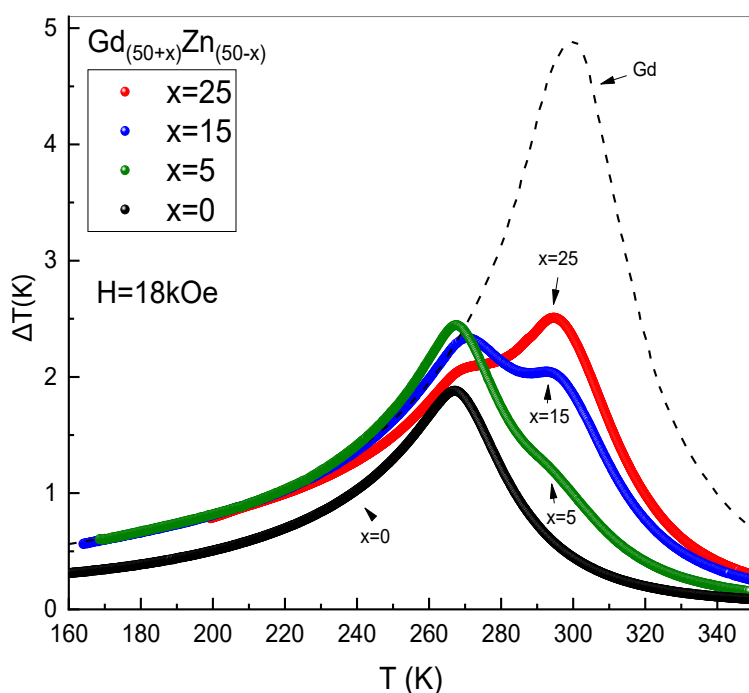


Рис. 1. МКЭ в сплаве GdZn.

Наблюдается у сплава $Gd_{75}Zn_{25}$ и составляет $\Delta T_{ad} = 2.51$ К. Для образцов $Gd_{65}Zn_{35}$, $Gd_{55}Zn_{45}$ и $Gd_{50}Zn_{50}$ максимумы эффекта составляют $\Delta T_{ad} = 2.33$, 2.43 и 1.83 К. Для сравнения, на рисунке также приведены данные МКЭ для чистого Gd. Исследования МКЭ в GdZn показали, что данные сплавы являются перспективными для использования в качестве хладагента твердотельных магнитных охлаждающих машин.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и БРФФИ в рамках научного проекта № 20-52-00047, а также при финансовой поддержке гранта РНФ № 18-12-00415.

Одним из эталонных материалов для МКЭ является Gd, а также сплавы на его основе. Одним из таких перспективных магнитокалорических сплавов является двухфазный сплав GdZn.

В данной работе представлены результаты экспериментальных исследований магнитокалорического эффекта в $Gd_{(50+x)}Zn_{(50-x)}$ ($x = 0, 5, 15$ и 25 ат.%) прямым методом в циклических магнитных полях интервале температур $150 - 350$ К и в магнитных полях до 18 кЭ. Прямые измерения адиабатического изменения температуры проводились модуляционным методом.

На рис. 1 приведена температурная зависимость МКЭ для образцов GdZn в магнитном поле $H = 18$ кЭ. Из рисунка видно, что наибольшая величина эффекта

СЕГРЕГАЦИЯ СПЛАВОВ $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1+x}\text{Sb}_{1-x}$ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

К.Р. Ерагер*, В.В. Соколовский, В.Д. Бучельников

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*e-mail: eragerk@rambler.ru

В настоящее время перспективность сплавов Гейслера обусловлена наличием ряда различных функциональных свойств, таких как эффект памяти формы, магнитосопротивление, магнитокалорический эффект и т.д. Однако недавние экспериментальные исследования [1] показывают, что в зависимости от термообработки соединения с избытком Mn становятся неустойчивыми и распадаются на компоненты, состоящие из $L2_1$ — кубической фазы Ni_2MnX с ферромагнитным (ФМ) порядком и $L1_0$ — тетрагональной фазы NiMn , упорядоченной антиферромагнитно (АФМ).

В данной работе рассматриваются сплавы Гейслера $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1+x}\text{Sb}_{1-x}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$). Исследования сегрегации из первых принципов были выполнены с помощью программного пакета VASP [2,3]. Расчеты проводились для 16-атомной суперячейки в приближении GGA-PBE [4]. Для расчета энергии смешивания, характеризующей тенденцию соединений к сегрегации, была использована следующая формула:

$$E_{\text{mix}} = E_{X_2Y_{1+x}Z_{1-x}} - [(1-x)E_{X_2YZ}^{L2_1} + xE_{(XY)_2}^{L1_0}],$$

где $E_{X_2Y_{1+x}Z_{1-x}}$ — полная энергия соединений со структурой аустенита и мартенсита; $E_{X_2YZ}^{L2_1}$ и $E_{(XY)_2}^{L1_0}$ — полные энергии стехиометрического тройного и бинарного соединений.

По полученным данным построен график зависимости энергии смешивания от концентрации содержания Mn в аустенитной и мартенситной фазах. Как видно из рис. 1, энергия смешивания принимает положительные значения во всем диапазоне концентраций, и сплавы стабильны только при $x = 0$ и 1, следовательно, все нестехиометрические составы проявляют тенденцию к сегрегации.

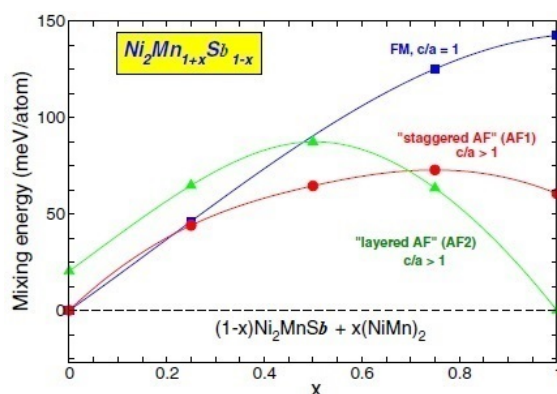


Рис. 1. Зависимость энергии смешивания от содержания Mn для кубического ФМ $L2_1$ и тетрагонального АФМ (АФМ 1 и АФМ 2) $L1_0$. Пунктирная линия показывает нулевой уровень, при котором суммарные энергии нестехиометрических соединений и суммарные энергии продуктов сегрегации равны.

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

1. W.M. Yuhasz *et al.*, J. Appl. Phys. **105**, 07A921(2009).
2. G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
3. G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B **59**, 1758 (1999).
4. J.P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).

ПОДВИЖНОСТЬ МАГНИТНОГО ГЕЛИКОИДА В НАНОСЛОЕ ГОЛЬМИЯ

Р.С. Заворницын*, Л.И. Наумова, М.А. Миляев, М.В. Макарова, В.В. Проглядо,
И.К. Максимова, В.В. Устинов

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: zavornitsyn@imp.uran.ru

Для приготовленных методом магнетронного напыления трехслойных структур металл/Ho/металл и спиновых клапанов конфигурации NiFeCr(5)/CoFe(4.5)/Cu(4)/CoFe(2)/Ho(50)/[CoFe или Ru](2)/FeMn(15)/NiFeCr(6) и NiFeCr(5)/CoFe(4.5)/Cu(4)/CoFe(2)/Ho(50)/Ru(2)/NiFeCr(6) (толщины слоев указаны в скобках в нм) проведены исследования микроструктуры, измерения электросопротивления (для трехслойных структур), магнитосопротивления (для спиновых клапанов) при разных температурах. Определена температура Нееля (T_N) нанослоя гольмия в составе трехслойных структур.

Изменения магнитотранспортных свойств спинового клапана, содержащего нанослой Ho, были использованы для получения информации о магнитном упорядочении в слое гольмия. Обнаружены характерные изменения магнитотранспортных свойств, обусловленные формированием антиферромагнитного геликоидального упорядочения в слое гольмия.

Полученные результаты позволяют сделать следующие выводы:

- 1) Согласно данным структурных исследований, нанослой гольмия в составе спиновых клапанов является поликристаллическим со слабовыраженной осевой текстурой $\langle 0002 \rangle$. Длина структурной когерентности составляет примерно $2/5$ от общей толщины слоя Ho. Ось магнитного геликоида близка к нормали слоя Ho, а непрерывный геликоид повторяется не менее 2–3 раз на всей толщине слоя Ho.
- 2) По результатам измерений температурных зависимостей электросопротивления трехслойных наноструктур CoFe/Ho/CoFe и NiFeCr/Ho/NiFeCr проведена оценка температуры Нееля для слоев гольмия толщиной 40, 50, 60 нм. Для слоев Ho, окруженного слоями CoFe и NiFeCr, T_N составила 99, 101, 105 К и 99, 102, 107 К соответственно.
- 3) Обнаружено, что период магнитного геликоида в слое гольмия зависит от температуры. Угол между моментами базисных плоскостей в магнитном геликоиде меняется, в результате поле обменного смещения в спиновом клапане меняется с температурой.
- 4) Если приложенное магнитное поле изменяется по своей величине и направлению, направление обменного поля смещения в интерфейсах Ho/CoFe изменяется. Таким образом, мы предполагаем, что в антиферромагнитном слое гольмия магнитный геликоид вращается вокруг своей оси под действием магнитного поля, и в базисной плоскости существует нескомпенсированный магнитный момент. Некомпенсированный момент возникает как из-за конечных размеров, так и из-за спин-слип состояния магнитного геликоида.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Спин» АААА-А18-118020290104-2, при поддержке РФФИ (грант № 19-02-00057).

ФОРМИРОВАНИЕ ОДНОНАПРАВЛЕННОЙ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ В СПИНОВОМ КЛАПАНЕ, СОДЕРЖАЩЕМ СЛОЙ Dy

Р.С. Заворницын*, Л.И. Наумова, М.А. Миляев, М.В. Макарова, В.В. Проглядо, В.В. Устинов

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: zavornitsyn@imp.uran.ru

Наноструктуры NiFeCr/CoFe/Cu/CoFe/Dy(t_{Dy1})/Ta типа спиновый клапан, где $t_{Dy1} = 20, 30, 40, 50, 60$ нм и CoFe/Dy(t_{Dy2})/Ta, где $t_{Dy2} = 15, 20, 30, 50, 70, 90, 150$ нм, изготовлены методом магнетронного напыления на подложках из стекла. Методами рентгеновской дифракции проведены исследования микроструктуры. Измерения магнитосопротивления для спиновых клапанов и электросопротивления для трехслойных структур проведены в температурном интервале 85 – 243 К. Определена температура Нееля (T_N) нанослоя диспрозия в составе трехслойных структур.

Изменения магнитотранспортных свойств спинового клапана, содержащего слой Dy, были использованы для получения информации об особенностях формирования обменного сдвига в интерфейсе CoFe/Dy.

Полученные результаты позволяют сделать следующие выводы:

- 1) Согласно данным структурных исследований, нанослой диспрозия в составе спиновых клапанов является поликристаллическим со слабовыраженной текстурой <0002>. Текстура становится более совершенной при увеличении толщины слоя диспрозия.
- 2) По данным измерений температурных зависимостей электросопротивления трехслойных наноструктур CoFe/Dy(t_{Dy2})/Ta определена температура перехода диспрозия в антиферромагнитное состояние для слоев Dy различной толщины. Показано, что температура перехода парамагнетик–антиферромагнетик уменьшается с уменьшением толщины слоя диспрозия, а величина температурного интервала перехода определяется конкуренцией двух факторов — совершенством кристаллической текстуры <0002> и толщиной слоя диспрозия.
- 3) Обнаружено, что при $T < T_N$ в интерфейсе CoFe/Dy возникает антиферромагнитное обменное взаимодействие и формируется однонаправленная анизотропия. Направление обменного поля зависит от направления магнитного момента соседнего с Dy ферромагнитного слоя.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Спин» АААА-А18-118020290104-2, при поддержке РФФИ (грант № 19-02-00057).

МАГНИТОСТРИКЦИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ A2 В СПЛАВОВ Fe – (Ga, Ge, Al): ИССЛЕДОВАНИЯ *ab initio*

М.В. Матюнина, М.А. Загребин*, В.В. Соколовский, В.Д. Бучельников

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*e-mail: miczag@mail.ru

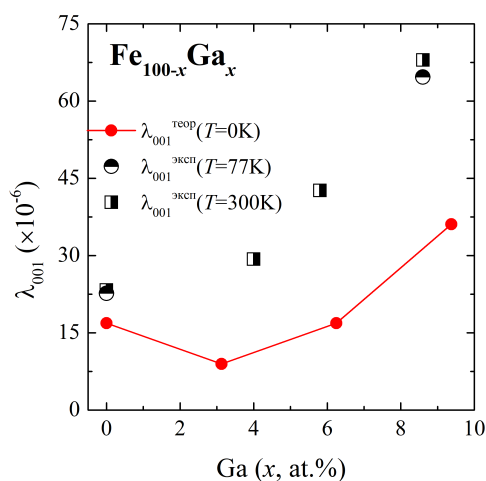


Рис. 1. Концентрационная зависимость величины тетрагональной магнитострикции кристаллической структуры A2 сплава $Fe_{100-x}Ga_x$. Экспериментальные данные приведены из [5].

Расчеты были проведены с использованием пакета VASP (Vienna *Ab initio* simulation package) [7,8]. Для расчетов использовались параметры решетки, полученные в результате геометрической оптимизации кристаллической структуры с учетом подхода 32-атомной суперячейки. Для учета обменно-корреляционных эффектов использовалось приближение обобщенного градиента согласно параметризации Perdew-Burke-Ernzerhof [9]. В расчетах рассматривается кристаллическая структура A2 (пространственная группа $Im\bar{3}m$ № 229, прототип α -Fe) со случайным распределением атомов Fe и (Ga, Ge, Al). В результате получены концентрационные зависимости тетрагональной магнитострикции λ_{001} для сплавов $Fe_{100-x}(Ga, Ge, Al)_x$ (0 – 9.375 ат.%). На рис. 1 показана зависимость для сплава $Fe_{100-x}Ga_x$ в сравнении с имеющимися экспериментальными результатами из работы [5].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 18-12-00283).

1. A.E. Clark *et al.*, J. Appl. Phys. **93**, 8621 (2003).
2. K.H.J. Buschow, Handbook of Magnetic Materials. — Amsterdam: Elsevier Science B.V (2012).
3. O. Kubaschewski, Iron-binary phase diagrams. — Berlin: Springer-Verlag (1982).
4. A.E. Clark *et al.*, J. Appl. Phys. **93**, 8621 (2003).
5. J.B. Restorff *et al.*, J. Appl. Phys. **111**, 023905 (2012).
6. E.M. Summers *et al.*, J. Mater. Sci. **42**, 9582 (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.P. Perdew *et al.*, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).

НОВЫЙ МЕХАНИЗМ АНОМАЛЬНОГО МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

В.В. Ивченко^{1,2*}, П.А. Игошев^{1,2}

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: ivova644@gmail.com

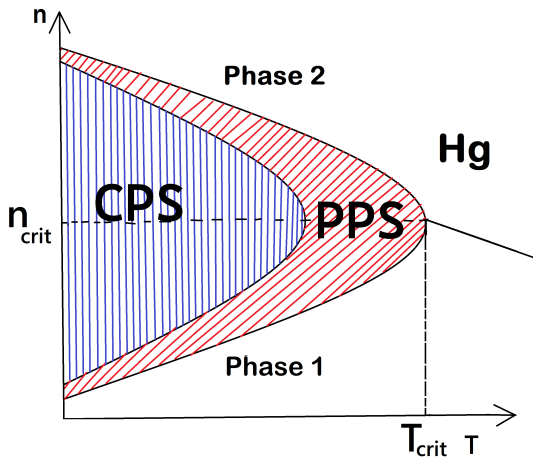


Рис. 1. Схематическое изображение окрестности трикритической точки на фазовой диаграмме в переменных $T - n$.

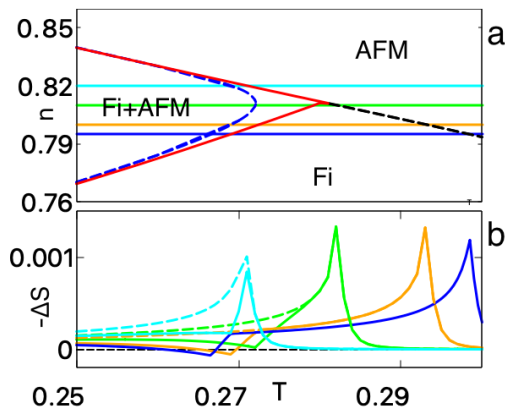


Рис. 2. а) Фазовая диаграмма и $\Delta S(T)$ при кулоновском взаимодействии $U = 4D, h = 10^{-4}D, D$ — четверть ширины зоны, $n = 0.795, 0.80, 0.81, 0.82$. Fi — ферромагнитная фаза, AFM — антиферромагнитная. Красный (синий) — границы ФР при $h = 0$ ($h \neq 0$). Графики $\Delta S(T)$ на б) соответствуют цветам а) и фиксированной n .

и сильная зависимость фазовых долей от температуры).

1. P.A. Igoshev *et al.* Phys. Rev. B **81**, 094407 (2010).

Магнитокалорический эффект (МКЭ) характеризуется изменением ΔS энтропии S образца, находящегося в изотермических условиях, при включении магнитного поля h . Впервые рассмотрен МКЭ в рамках модели Хаббарда для решетки Бете при переходах первого рода, сопровождающихся магнитным фазовым расслоением (ФР).

Основной интерес представляет окрестность трикритической точки $(T_{\text{crit}}, n_{\text{crit}})$, T — температура, n — концентрация носителей тока, где происходит слияние концентрационных границ фазового расслоения и изменение рода фазового перехода в магнитоупорядоченное состояние с первого на второй. При заданном магнитном поле эту область можно разбить на три подобласти (рис. 1): полное фазовое расслоение (CPS) — имеет место в нулевом и конечном магнитном поле, частичное фазовое расслоение (PPS) — расслоение имеет только в нулевом поле и однородная фаза (Hg). Граница между подобластями CPS и PPS зависит от величины магнитного поля.

На рис. 2а представлен пример фазовой диаграммы в окрестности трикритической точки $n_{\text{crit}} = 0.81$ для перехода из ферромагнитной (магнитоупорядоченной) в антиферромагнитную фазу, причем род перехода изменяется с изменением температуры, представляющий иллюстрацию общей фазовой диаграммы (рис. 1). На рис. 2б представлен результат расчета температурной зависимости ΔS в рамках приближения среднего поля с учетом магнитного ФР, возникающего в случае перехода первого рода [1]. Для $n < n_{\text{crit}}$ получен *спутанный* пик с $\Delta S > 0$ (аномальный МКЭ) при температуре перехода в PPS. Пунктиром изображен расчёт без учёта ФР [1].

Мы показали, что основными причинами аномального МКЭ являются существование в образце ФР и его следствия (отрицательный отклик намагниченности магнитоупорядоченной фазы, участвующей в фазовом расслоении, на магнитное поле (отрицательная фазовая магнитная восприимчивость) и сильная зависимость фазовых долей от температуры).

ПОВЕДЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И МАГНИТНЫХ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ ДЕНДРИМЕРА

М.М. Исаева*, М.А. Магомедов

Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

*e-mail: madina.isaeva.92@mail.ru

Исследования различных наноструктур в последние годы как теоретическими, так и экспериментальными методами обусловлены рядом уникальных свойств и перспективой их широкого применения в различных областях науки и техники, одним из которых можно считать адресную доставку лекарственных препаратов, то есть направленный перенос лекарства в поражённую область или клетку, при этом не затрагивая здоровые органы и ткани. При создании препарата направленного действия необходимо четко сформулировать основные требования к переносчику препарата: безопасность, ёмкость, возможность удержания препарата при транспортировке, лёгкость наполнения активным веществом, биосовместимость, защищённость от действия иммунной системы. А также снабдить носитель устройством управляемой доставки для его транспортировки в очаг заболевания. Чаще всего это магнитные носители или химическое соединение, способное реагировать с патологическими клетками.

Наиболее универсальными и чаще используемыми в настоящее время являются магнитные дендримеры, высокая точность предсказания характеристик и размеров макромолекулы делают перспективным его применение в медицине в качестве агентов для адресной доставки.

Эффективным и точным способом для изучения наносистем является моделирование. В данной работе использовался алгоритм Ванга–Ландау на основе метода Монте–Карло. При построении модели было оценено взаимодействие как в самом ядре, так и взаимодействие первых и вторых ближайших соседей. Взаимодействие в ядре оценивается параметром обменного взаимодействия J_0 , взаимодействие между спинами в разных подрешётках характеризует параметр J_1 , а J_2 учитывает взаимодействие между спинами в одной решётке.

Гамильтониан представлен в следующем виде

$$H = -J_0 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j.$$

Алгоритм Ванга–Ландау [1-3] позволяет выяснить магнитную структуру основного состояния и вычислить функцию плотности состояния. Получив значение плотности вероятности можно рассчитать значения термодинамических и магнитных характеристик, таких как внутренняя энергия U , свободная энергия F , энтропия S и теплоёмкость C , намагниченность m , восприимчивость χ .

Проведен анализ структур основного состояния при различных значениях обменных взаимодействий. Показано, что в зависимости от величин обменных взаимодействий система может иметь ферромагнитное или ферримагнитное упорядочение, а также быть сильно вырожденной и неупорядоченной — в системе возникает фрустрация. Рассчитаны температурные зависимости различных термодинамических параметров системы. Показано, что в модели дендримера число поверхностных узлов близко к половине от общего числа узлов, вследствие чего с ростом размеров системы влияние поверхностных узлов на общую картину поведения системы не ослабевает.

1. F. Wang, D.P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
2. D.P. Landau, S.-H. Tsai, M. Exler, Am. J. Phys. **72**, 1294 (2004)
3. М.А. Магомедов, А.К. Муртазаев, ФТТ **60**, 1173 (2018).

МАГНИТОТРАНСПОРТНЫЕ, ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ И МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАНГАНИТА $\text{La}_{0.8}\text{Ag}_{0.1}\text{MnO}_3$

А.Т. Кадырбардеев^{1*}, Г.М. Алиев¹, Г.Г. Ашуров¹, Р.Р. Абдуразаков¹, Р.Р. Гаджимурадов¹,
Д.Н. Ибрагимов¹, Г.М. Рамазанов¹, У.М. Шахруханов¹, А.Г. Гамзатов^{1,2}

¹ Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

² Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

*e-mail: anvar.kadirbardeev@gmail.com

Манганиты, допированные одновалентными ионами (Ag, K, Na), считаются наиболее перспективными и имеют ряд преимуществ перед манганитами, допированными двухвалентными ионами (Ca, Sr, и т.д.): это высокая температура Кюри, небольшое изменение как величин колоссального магнитосопротивления (КМС) и магнитокалорического эффекта (МКЭ), так и температур максимумов эффектов при увеличении концентрации допирующего элемента. Данная работа посвящена изучению магнитотранспортных, теплофизических и магнитокалорических свойств лантан дефицитного манганита $\text{La}_{0.8}\text{Ag}_{0.1}\text{MnO}_3$ в интервале температур 80 – 370 К и в магнитных полях до 8 Тл.

Результаты исследования приведены на рис. 1. Как видно зависимость $\rho(T)$ имеет характерный и для большинства манганитов вид: металлический ход ниже T_{MI} (T_{MI} — температура перехода металл–изолятор), полупроводниковый — выше T_{MI} . В магнитном поле 8 Тл сопротивление подавляется, приводя к эффекту КМС $\Delta\rho/\rho \sim 55\%$ при $T = 302$ К. Наблюдаемая большая величина (около 35%) магниторезистивного эффекта при низких температурах связана с межгранульным туннельным сопротивлением.

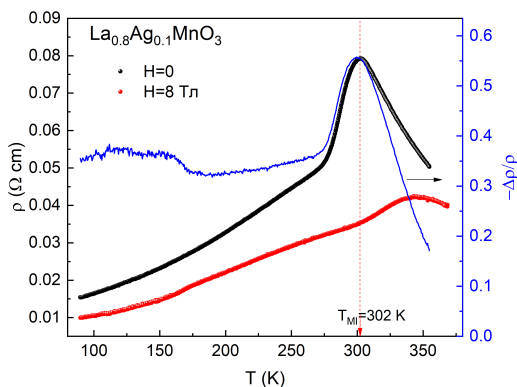


Рис. 1. Зависимость $\rho(T)$ при $H = 0$ и 8 Тл.

На зависимости $C_p(T)$ наблюдается аномалия вблизи T_C , связанная с магнитным фазовым переходом ФМ–ПМ, которая в магнитных полях подавляется, а максимум смещается в сторону высоких температур. Обнаружено аномальное поведение фоновой части теплоемкости в ФМ и ПМ фазах, заключающаяся в скачкообразном изменении фоновой части теплоемкости при переходе в ПМ фазу на величину $\Delta C \sim 12$ J/mol K. Природа такого поведения теплоёмкости требует дальнейших исследований. Исследована температурная зависимость теплопроводности и температуропроводности при $H = 0, 1.8$ и 8 Тл.

С понижением температуры при переходе в ФМ фазу $\kappa(T)$ испытывает скачок, который может быть связан с уменьшением рассеяния фононов на искажениях Яна–Теллера. При переходе в ферромагнитную фазу искажения снимаются, вызывая резкий рост теплопроводности. Магнитное поле снимает ян–теллеровские искажения и приводит к росту теплопроводности вблизи T_C .

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и ВАНТ в рамках научного проекта № 20-58-54006.

ПРЯМОЙ И ОБРАТНЫЙ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В СПЛАВЕ ГЕЙСЛЕРА $\text{Ni}_{47}\text{Mn}_{40}\text{Sn}_{12.5}\text{Cu}_{0.5}$ В ИМПУЛЬСНЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ ДО 500 кЭ

А.П. Каманцев^{1*}, Ю.С. Кошкидько^{1,2}, А.Г. Гамзатов³, А.М. Алиев³, А.Г. Varzaneh⁴, Р. Kameli⁴,
I. Sarsari⁴

¹Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия

²Институт низких температур и структурных исследований ПАН, Вроцлав, Польша

³Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

⁴Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran

*e-mail: kaman4@gmail.com

В настоящей работе был исследован магнитокалорический эффект (МКЭ) методом прямого измерения адиабатического изменения температуры образцов сплава Гейслера $\text{Ni}_{47}\text{Mn}_{40}\text{Sn}_{12.5}\text{Cu}_{0.5}$ в сильных импульсных магнитных полях до 500 кЭ по методике, подробно описанной в [1]. Данный сплав демонстрирует мартенситное фазовое превращение (ФП) 1-го рода в области температур 250 – 280 К и две точки Кюри: при 240 и 313 К (рис. 1а). Ранее магнитокалорические свойства данного сплава вблизи ФП 1-го и 2-го рода изучались в квазистационарных магнитных полях 18 и 80 кЭ в работе [2].

Знак МКЭ в сплаве Гейслера $\text{Ni}_{47}\text{Mn}_{40}\text{Sn}_{12.5}\text{Cu}_{0.5}$ зависит от начальной температуры эксперимента (рис. 1б). Так, при начальных температурах 250 – 280 К (область гистерезиса мартенситного ФП) МКЭ будет обратным, а максимальная его величина $\Delta T = -11.5$ К достигается при убывании магнитного поля при $T_0 = 275$ К. При этом наблюдается гигантская необратимость эффекта — конечная температура образца отличается от начальной на 10 К, что объясняется температурным гистерезисом ФП 1-го рода [1]. При начальных температурах выше мартенситного ФП МКЭ будет прямым и полностью обратимым с максимальным значением $\Delta T = 6$ К в магнитном поле 200 кЭ при $T_0 = 320$ К (рис. 1б).

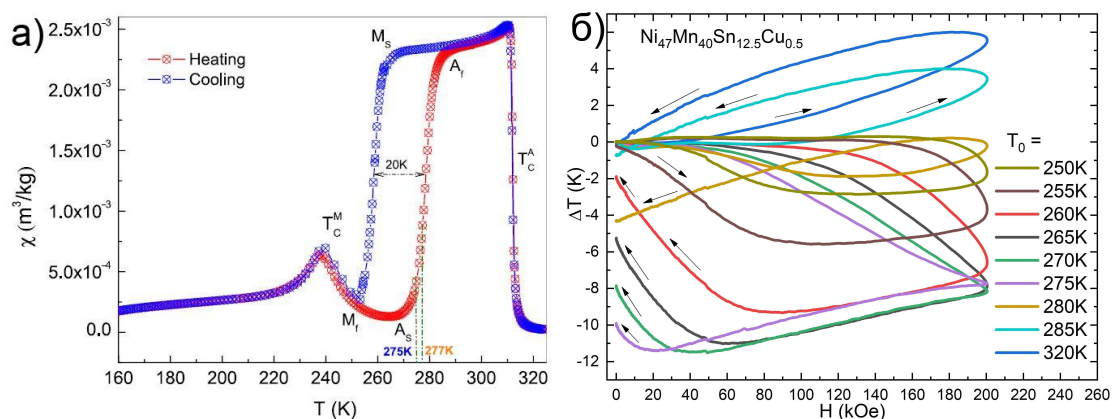


Рис. 1. (а) Температурная зависимость действительной части магнитной восприимчивости сплава $\text{Ni}_{47}\text{Mn}_{40}\text{Sn}_{12.5}\text{Cu}_{0.5}$ по переменному току, обозначены характерные температуры мартенситного перехода и точки Кюри. (б) Зависимость МКЭ сплава $\text{Ni}_{47}\text{Mn}_{40}\text{Sn}_{12.5}\text{Cu}_{0.5}$ от магнитного поля до 200 кЭ при разных начальных температурах в диапазоне 250 – 320 К.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ № 20-58-54006, и частично поддержана грантом Президента РФ № МК-355.2020.2.

1. A.P. Kamantsev *et al.*, *Physics of the Solid State* **62**, 160 (2020).

2. A.G. Gamzatov *et al.*, *Applied Physics Letters* **113**, 172406 (2018).

ЗАРОЖДЕНИЕ ДИФФУЗНЫХ МАГНИТНЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ В ТОНКИХ ПЛЁНКАХ ФЕРРИТА ГРАНАТА ЗА СЧЁТ МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА

А.С. Каминский*, А.В. Ядвичук, Е.П. Николаева, А.П. Пятаков

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

*e-mail: kaminskii.as14@physics.msu.ru

Контроль над магнитными неоднородностями (такими как скирмионы, магнитные домены) посредством статического электрического поля представляет большой практический интерес, поскольку может требовать значительно меньших энергозатрат нежели управление ими посредством импульсных токов или магнитных полей. Сейчас с этой целью активно исследуется зарождение магнитных неоднородностей с помощью неоднородного магнитоэлектрического эффекта.

Целью данной работы было исследование электроиндуцированного зарождения магнитных неоднородностей с диффузным магнитооптическим контрастом. Зарождение таких неоднородностей теоретически было предсказано при больших магнитных полях в плоскости образца [1]. В 2019 году оно было обнаружено экспериментально в плёнке феррита граната [2].

В данной работе зарождение диффузных магнитных неоднородностей под действием неоднородного электрического поля заряженного острого зонда наблюдалось в тонких плёнках феррита граната $(\text{BiLu})_3(\text{FeGa})_5\text{O}_{12}$ с кристаллографической ориентацией (210) на гадолиний-галиевой подложке $(\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12})$ при различных магнитных полях: перпендикулярном плоскости образца (H_{\perp}) и параллельном плоскости образца (H_{\parallel}). Вид такой магнитной неоднородности представлен на рис. 1 (обведена белой линией).

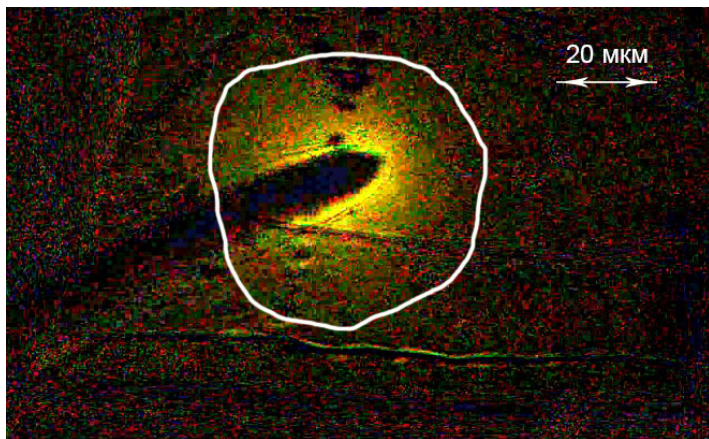


Рис. 1. Диффузная магнитная неоднородность; напряжение на игле $U = +1.6$ кВ; $H_{\perp} = 26,8$ Э; $H_{\parallel} = 200$ Э.

Доменная структура наблюдалась при помощи магнитооптического эффекта в геометрии Фарадея. Поляризатор и анализатор при этом были слегка раскрещены (их угол отличался от величины 90° на величину порядка 1°), при таком контрасте домены с одним направлением намагниченности выглядят светлее других, а отклонение намагниченности от оси лёгкого намагничивания сопровождается затемнением или просветлением (в зависимости от того в какую сторону происходит отклонение намагниченности).

Симметрия контраста зарождающихся неоднородностей позволяет предполагать, что причиной их зарождения является локальное изменение электрическим полем иглы магнитной анизотропии в кристалле.

Работа поддержана грантом РФФИ 19-02-00828 А «Электроиндуцированное зарождение магнитных доменов и топологических дефектов».

1. Р.М. Вахитов и др., ФТТ. **61**, 6, 1120 (2019).
2. А. Pyatakov *et al.*, World Scientific Publishing Compan. **9**, 02, 1940004 (2019).

Влияние ориентации подложки MgO и толщины слоя Gd на относительную охлаждающую мощность в многослойных структурах W/Gd/W/MgO

С.Н. Кашин^{1,2*}, О.В. Коплак¹

¹Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

*e-mail: sergo-vaz@yandex.ru

Возрастающий интерес к исследованию магнитокалорического эффекта (МКЭ) в структурах, содержащих редкоземельный металл Gd, обусловлен температурой перехода Gd в ферромагнитное состояние близкую к комнатной ($T_C = 293$ К). Соединения, содержащие Gd, обладают гигантским магнитокалорическим эффектом, что позволяет использовать его в качестве рабочего тела магнитных холодильных машин. Особый интерес представляют многослойные структуры на основе гадолиния, в которых величина МКЭ может зависеть от механических микродеформаций и внутренних напряжений, возникающих из-за различных коэффициентов теплового расширения в подложке и чередующихся слоях металлов. В работе были использованы структуры W/Gd/W/MgO, полученные с помощью магнетронного напыления [1]. С целью определения влияния ориентации подложки MgO и толщины слоя Gd на относительную охлаждающую мощность варьировалась толщина слоя пленки гадолиния $d = 100 - 300$ нм и ориентация подложки оксида магния ($\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$). Изменение параметров решетки на интерфейсе Gd/W/MgO приводит к формированию напряженного слоя Gd, что отражается на его магнитных свойствах. Наибольшие значения микронапряжений и величины МКЭ обнаружены для образцов с ориентацией подложки $\langle 111 \rangle$ (рис. 1a,b). Изменение магнитной энтропии ΔS различается для образцов с ориентацией подложки и достигает максимальных значений 7.9 Дж/кгК в поле 5 Тл для образца Gd($d = 100$)MgO $\langle 111 \rangle$.

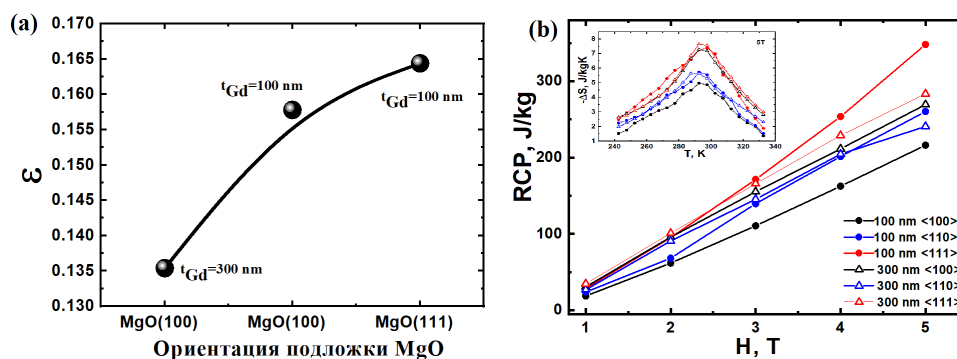


Рис. 1. (a) Микронапряжения, возникающие в образцах Gd с ориентациями подложки $\langle 100 \rangle$, $\langle 111 \rangle$. (b) Относительная мощность охлаждения для образцов Gd с разной ориентацией подложки и/или разной толщиной слоя. На вставке: изменение энтропии ΔS при $H = 5$ Тл.

Определен вклад деформации пленок Gd, выращенных на подложке разной ориентации на температурные зависимости магнитного момента пленки и величину МКЭ. Установлена взаимосвязь между структурными параметрами образцов и величиной относительной охлаждающей мощности (RCP) (рис. 1b).

Работа выполнена в соответствии с Гос.заданием ИПХФ РАН АААА-А19-119092390079-11.

1. Tadout, M. Lambert *et al.*, Crystals. **9**(6), 278 (2019).

ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ ЭФФЕКТА МАГНИТНОГО ИМПЕДАНСА МНОГОСЛОЙНОЙ ПЛЕНОЧНОЙ СТРУКТУРЫ: ФОКУС НА СОЗДАНИЕ ДЕТЕКТОРОВ ДАВЛЕНИЯ

Н.В. Козлов^{1*}, С.О. Волчков¹, А.А. Членова^{1,2}, Г.В. Курляндская¹

¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

²Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: nkzfc3@gmail.com

Явление гигантского магнитного импеданса (ГМИ) вызывает интерес исследователей в последние десятилетия в связи с перспективой создания высокочувствительных датчиков магнитного поля, температуры, напряжений и др. [1]. Многослойные пленочные структуры, состоящие из слоев ферромагнетика, разделенных высокопроводящими слоями, могут регистрировать изменение внешнего механического давления [2]. Ввиду высоких значений динамической магнитной проницаемости пермаллой FeNi широко применяется в качестве материала ферромагнитных слоев в ГМИ многослойных структурах. Данный сплав позволяет достичь высоких значений чувствительности МИ и, в зависимости от небольших отклонений от состава Fe₂₀Ni₈₀, имеет варьируемую константу магнитострикции, модификация которой, приводит к изменению особенностей ГМИ. Экспериментально зависимость величины ГМИ от состава слоев FeNi ранее была подтверждена в работе [2].

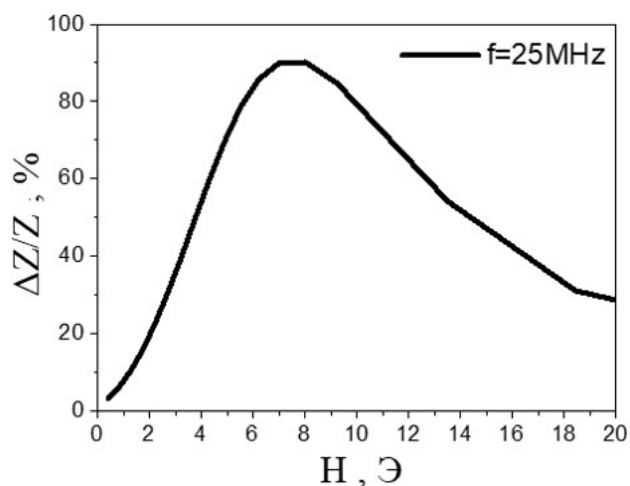


Рис. 1. Зависимость МИ-соотношения $\Delta Z/Z$ многослойной пленочной структуры FeNi(500 нм)/Cu(500 нм)/FeNi(500 нм) на частоте переменного тока 25 МГц.

насыщения 630 Г, величина ГМИ отношения полного импеданса $\Delta Z/Z = [Z(H) - Z(H_{\max})]/Z(H_{\max})$ достигала 90% (рис. 1), что согласуется с экспериментально получаемыми значениями [2] для данного сплава.

Работа выполнена при частичной поддержке в рамках государственного задания № FEUZ-2020-0051.

1. V.E. Makhotkin, B.P. Shurukhin, V.A. Lopatin, P.Yu. Marchukov and Yu.K. Levin, Sens. Act. A **27**, 759 (1991).
2. A.A. Chlenova, V.N. Lepalovsky, V.O. Vas'kovskiy, A.V. Svalov and G.V. Kurlyandskaya, AIP Conference Proceedings **1886**, 020005 (2017).

МАГНИТОСТРИКЦИЯ В СПЛАВАХ Fe — Si: ИССЛЕДОВАНИЯ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

А.Б. Кошкин*, М.А. Загребин, М.В. Матюнина, В.В. Соколовский, В.Д. Бучельников

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*e-mail: koshkin.alexei2016@yandex.ru

В данной работе исследуется магнитострикция сплавов $\text{Fe}_{100-x}\text{Si}_x$ ($5 \leq x \leq 25$) с помощью первопринципных вычислений. Вычисления выполнены с помощью пакета SPR—KKR [1]. В работе вычислена концентрационная зависимость величины продольной магнитострикции λ_{001} вдоль тетрагональной оси с помощью метода вращающего магнитного момента, а также величина объёмной магнитострикции с помощью вычисления параметров магнитного обменного взаимодействия J_{ij} . Детали вычислений аналогичны вычислениям, выполненным для сплавов $\text{Fe}_{100-x}\text{Ga}_x$ [2,3].

На рис. 1(а) представлена зависимость величины продольной магнитострикции λ_{001} вдоль тетрагональной оси сплавов $\text{Fe}_{100-x}\text{Si}_x$ от содержания Si ($5 \leq x \leq 25$). Расчетные данные представлены для трех кристаллических структур A2, B2 и $D0_3$ (сплошные линии). Из рис. 1(а) видно, что поведение зависимостей, полученных в результате расчетов, находится в согласии с экспериментальной зависимостью (пунктирная линия) [4,5]. Разница в значениях может быть вызвана тем, что эксперименты были сделаны при комнатной температуре, а расчеты соответствуют $T = 0$ К.

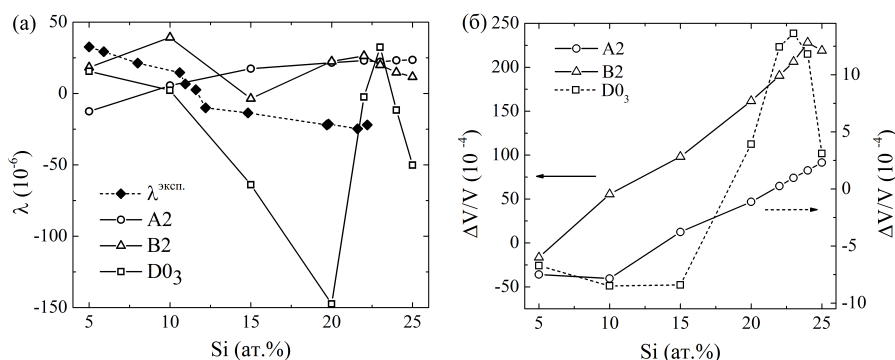


Рис. 1. Зависимость величины магнитострикции от содержания Si. (а) — продольная вдоль тетрагональной оси, (б) — объёмная.

На рис. 1(б) представлена зависимость величины объёмной магнитострикции сплавов $\text{Fe}_{100-x}\text{Si}_x$ от содержания Si ($5 \leq x \leq 25$). Из рис. 1(б) видно, что величина объёмной магнитострикции увеличивается с ростом концентрации Si для фаз A2 и B2. Для фазы $D0_3$ величина магнитострикции растёт, достигая максимума при 23 ат.% Si, после чего идет резкое снижение величины магнитострикции. Значения величины объёмной магнитострикции сплавов Fe–Si аналогичны значениям для сплава Fe–Ga [2]. Однако величина объёмной магнитострикции сплава Fe–Ga немного меньше, чем для сплавов Fe–Si. Это может быть следствием того, что у Si более низкий коэффициент теплового расширения.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках госзадания № 075-00250-20-03.

1. Ebert H. *et al.*, Reports on Progress in Physics **74**, 096501 (2011).
2. М.В. Матюнина и др., Вестник ЮУрГУ **12**(2), 57 (2020).
3. З. М.В. Матюнина и др., Челябинский физико–математический журнал **5**(2), 174 (2020).
4. J.B. Restorff *et al.*, J. Appl. Phys. **111**, 023905 (2012).
5. W.J. Carr, Jr., R. Smoluchowski, Phys. Rev. **83**, 1236 (1951).

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ МАГНИТНОЙ ГИПЕРТЕРМИИ В АНСАМБЛЕ НЕПОДВИЖНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ СУПЕРПАРАМАГНИТНЫХ ЧАСТИЦ

А.А. Кузнецова*, Е.А. Елфимова

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: anastasia.kuznetsova@urfu.ru

Магнитная гипертермия — это прогрессивный метод лечения раковых опухолей. Идея этого метода заключается во введении магнитных частиц в область, где был диагностирован рак. Затем частицы и вместе с ними клетки опухоли нагреваются магнитным полем. В ходе многочисленных научных исследований определена температура, при которой раковые клетки погибают, в то время как здоровые клетки, имеющие более высокий температурный порог, остаются целыми. Соответственно для того, чтобы медицинская эффективность этого метода возросла, необходимо более точно предсказывать и контролировать изменение температуры опухолевой ткани.

Магнитный отклик однодоменной магнитной частицы под действием внешнего магнитного поля основывается на двух механизмах релаксации магнитного момента частицы. Это Броуновское вращение магнитной частицы с зафиксированным магнитным моментом и суперпарамагнитное Неелевское вращение магнитного момента внутри частицы благодаря тепловым флуктуациям. Для ансамбля магнитных наночастиц, внедренных в некоторую жидкость, оба механизма релаксации возможны. Но в случае, когда частицы зафиксированы в некоторой полимерной матрице или биологической ткани, зачастую магнитные частицы теряют их трансляционную и ориентационную степень свободы. В данном случае суперпарамагнитная Неелевская релаксация становится основным механизмом в определении магнитных свойств ансамбля магнитных обездвиженных частиц. В данной работе рассчитывается удельная поглощаемая мощность (SLP) ансамбля суперпарамагнитных частиц с фиксированным направлением оси легкого намагничивания, поскольку на вычислении SLP строится теоретическая основа метода магнитной гипертермии. Особое внимание в работе уделяется взаимодействиям между частицами.

Рассматривается монодисперсный ансамбль сферических однородных намагниченных суперпарамагнитных частиц, внедренных в полимерную матрицу. Все частицы имеют одноосную магнитную анизотропию, и оси легкого намагничивания частиц сонаправлены. Внешнее переменное магнитное поле располагается под некоторым углом к оси легкого намагничивания. Вращательное движение магнитного момента описывается функцией вероятности ориентации магнитного момента, которая является решением уравнения Фоккера-Планка-Брауна. Взаимодействия между частицами включены на основе модифицированной теории усредненного поля [1]. В ходе аналитических и численных вычислений получена функция вероятности ориентации магнитного момента, которая используется для подсчета динамической восприимчивости и SLP. Также в работе описывается зависимость SLP от направления магнитного поля, концентрации частиц, интенсивности взаимодействия между частицами, высоты магнитного кристаллографического энергетического барьера.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-02-00358).

1. A.O. Ivanov, V.S. Zverev, S.S. Kantorovich, *Soft Matter* 12, 3507 (2016).

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СВОЙСТВ ПЛЕНОЧНЫХ СТРУКТУР С ОДНОНАПРАВЛЕННОЙ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ

Н.А. Кулеш*, Н.Е. Пермяков, В.С. Зверев, А.С. Болячкин, А.А. Кошелев

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: nikita.kulesh@urfu.ru

Пленочные системы с обменным смещением на основе ферромагнитных и антиферромагнитных слоев нашли широкое применение в многочисленных датчиках, основанных на регистрации величины магнитного поля и системах записи информации. Сложность поиска новых или оптимизации уже известных систем с обменным смещением во многом обусловлена комплексным характером явления и большим количеством влияющих на ключевые характеристики среды параметров. По этой причине, несмотря на неослабевающий интерес к таким магнитным структурам и большому количеству предложенных моделей, до сих пор не найдено относительно простого и универсального метода прогнозирования гистерезисных свойств среды на основании характеристик используемых материалов. На данный момент к наиболее успешным методам описания обменно-связанных слоистых систем относятся микромагнитное моделирование и атомистический расчет, которые не только требуют корректной формулировки относительно сложной задачи, но и значительных вычислительных ресурсов. В настоящей работе предпринята попытка применить комплексный подход, включающий использование ресурсоемкого микромагнитного моделирования, позволяющего получать реалистичный результат при учете большого количества параметров и методов машинного обучения, которые позволяют крайне эффективно решать задачи поиска корреляций между входными параметрами и предсказывать значения выходных параметров, например, в виде коэрцитивной силы и поля обменного смещения.

Для решения указанной задачи нами был использован пакет микромагнитного моделирования Mumax3 [1], в рамках которого реализована модель поликристаллической двухслойной пленочной структуры, в которой антиферромагнитный слой был заменен на антиферромагнитный с отключенным магнитостатическим взаимодействием и внешним полем. Варьируемыми параметрами выступали константы магнитной анизотропии обоих слоев, толщина ферромагнитного слоя, коэффициент ослабления межслойного обменного взаимодействия и т.д. В рамках расчета была получена выборка из порядка 2000 петель гистерезиса с параметрами, варьируемыми случайным образом, которая и была использована для обработки методами машинного обучения. Был использован последовательный подход для анализа данных (кластеризация и понижение размерности методом главных компонент), а также построены предсказательные модели нескольких типов. В результате работы была продемонстрирована эффективность подхода в плане предсказания выходных параметров системы на основе вектора входящих параметров, а также возможностей анализа зависимостей и внутренних корреляций входных параметров.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 19-72-00141).

1. J. De Clercq *et al.*. J Phys. D: Appl. Phys. **49** (2016), 435001.

СПЕРИ- И СПЕРОМАГНЕТИЗМ В МНОГОСЛОЙНЫХ ПЛЕНКАХ $[\text{Tb} - \text{Co}/\text{Si}]_n$

И.А. Макарович*, Е.В. Кудюков, Е.А. Степанова, А.В. Свалов

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: makarochkin98@gmail.com

Многослойные тонкопленочные структуры, содержащие редкоземельные и переходные металлы, продолжают оставаться предметом пристального внимания исследователей как материалы для создания устройств памяти и магнитных сенсоров типа спиновых клапанов [1]. Отличительной особенностью пленок Tb–Co является сперимагнитная структура, обусловленная сильной локальной анизотропией атомов Tb, приводящей к случайному распределению моментов Tb в пределах некоторого пространственного конуса [2].

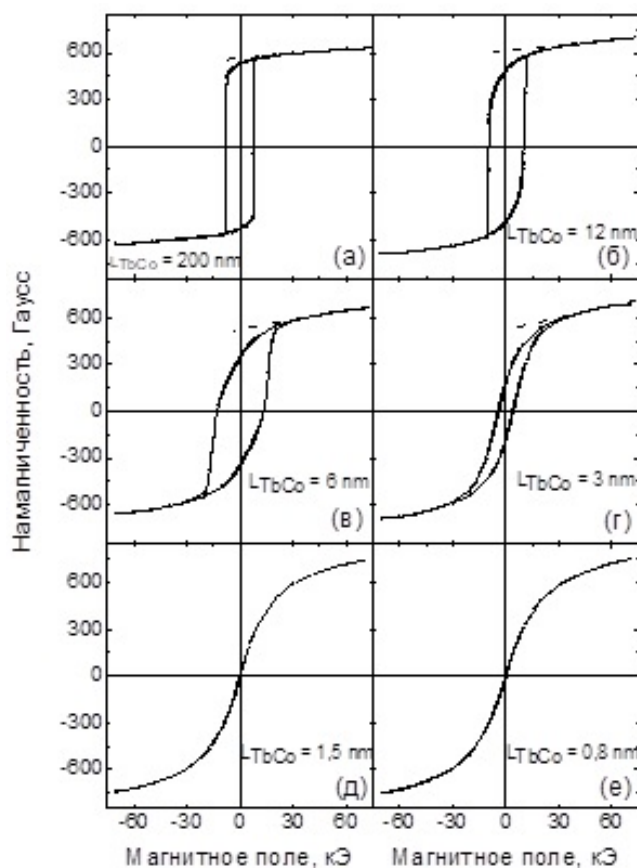


Рис. 1. Петли гистерезиса пленок $[\text{Tb}-\text{Co}/\text{Si}]_n$ с разной толщиной магнитных слоёв, измеренные при $T = 5$ К.

стекла. Определённые из температурных зависимостей обратной величины магнитной восприимчивости значения эффективного магнитного момента Tb для этих пленок оказались близкими к аналогичной величине для трехвалентного Tb.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 18-72-10044.

1. L. Wang *et al.*, Appl. Phys. Lett. **117**, 022408 (2020).
2. J.M.D. Coey *et al.*, Phys. Rev. Lett. **36**, 1061 (1976).
3. R. Hasegawa *et al.*, AIP Conf. Proc. **24**, 110 (1975).

В работе представлены результаты исследований многослойных пленок $[\text{Tb}-\text{Co}(L_{\text{Tb}-\text{Co}})/\text{Si}(2 \text{ нм})]_n$, осажденных на стеклянные подложки методом высокочастотного ионно-плазменного распыления. Влияние толщины магнитных слоев на особенности магнитной структуры пленок установлено на основе анализа петель гистерезиса (рис. 1) и температурных зависимостей намагниченности пленок с привлечением феноменологической модели коллинеарного ферромагнетизма Нееля в рамках теории молекулярного поля [3]. Показано, что особенности магнитной структуры пленок $[\text{Tb}-\text{Co}/\text{Si}]_n$ определяются не только толщиной магнитных слоёв, но и влиянием на их свойства прослоек кремния. В частности, уменьшение $L_{\text{Tb}-\text{Co}}$ приводит к увеличению раствора конуса сперимагнетизма. Кроме того, увеличивается относительная роль межслойных интерфейсов, возникающих в результате межслойной диффузии, что вызывает снижение среднего магнитного момента кобальта вследствие эффекта переноса заряда от атомов Si к атомам Co [3]. При $L_{\text{Tb}-\text{Co}} < 3$ нм пленки обладают свойствами спинового

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ СПЛАВАХ СИСТЕМЫ Pr – Fe – В

В.Е. Мальцева^{1*}, С.В. Андреев¹, И.В. Солдатов^{1,2}, А.С. Волегов¹¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия²Leibniz Institute for Solid State and Materials Research, Dresden, Germany*e-mail: viktoria.maltseva@urfu.ru

Магнитотвердые материалы и изготавливаемые из них постоянные магниты находят широкое применение в современных технических устройствах. Развитие аддитивных технологий применительно к производству магнитов и магнитных систем сложных конфигураций открывает новые горизонты для применения нанокристаллических композиционных сплавов [1]. Практическое применение наноструктурированных сплавов в этой области требует детального понимания процессов перемагничивания, в зависимости от которых пути достижения высококоэрцитивного состояния будут различаться. Вопрос о процессах перемагничивания в быстрозакалённых сплавах исследовался неоднократно, однако окончательно однозначного ответа до сих пор нет. Существует несколько точек зрения. Например, в соответствии с выводами, полученными в рамках модели Кнеллера–Хавига [2], магнитотвердые зерна перемагничиваются при условии равенства энергии «уплотненной» доменной границы в магнитомягком зерне и энергии доменной границы в магнитотвёрдом. В работе [3] вывод об образовании зародышей делается на основании хорошего описания температурной зависимости коэрцитивной силы исследованных нанокристаллических сплавов формулой Кронмюллера. В работе [4] вывод о преобладающем процессе перемагничивания (между образованием зародышей и задержкой смещения доменных границ) сделан на основе внешнего вида кривых намагничивания и частных петель гистерезиса.

Цель настоящей работы заключается в определении преобладающего механизма перемагничивания наноструктурированных сплавов системы Pr–Fe–В.

В качестве образцов была синтезирована серия быстрозакалённых сплавов системы Pr – Fe – В с различным массовым содержанием Pr для того, чтобы варьировать количество центров формирования зародышей в образце и изменения связи между частицами. Исходные сплавы по фазовому составу можно условно разделить на две группы: с содержанием Pr 26% и 28% имеют близкий к стехиометрии интерметаллида Pr₂Fe₁₄В состав. Образцы с содержанием Pr 20% и 22% являются достехиометрическими. Сплавы были получены методом индукционного плавления в кварцевом тигле исходных компонентов с последующей разливкой на железный диск, вращающийся с линейной скоростью движения поверхности 30 м/с. Полученные ленты подвергались отжигу в вакууме при температурах 650°С и 675°С в течение 30 минут, что соответствует оптимальным магнитным свойствам. Измерения магнитных свойств образцов проводились посредством измерительных систем MPMS XL 7 ES и DynaCool 9 T.

На основе полученных результатов можно сделать вывод, что преобладающим процессом перемагничивания для образцов данной серии является задержка смещения доменных границ. Подробнее о механизмах перемагничивания и полученных результатах будет рассказано в докладе.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ МК-1746.2020.2.

1. A.S. Volegov *et al.*, *Acta Materialia* **188**, 733 (2020).
2. E.F. Kneller, R. Hawig, *IEEE Transactions on Magnetism* **27**(4), 3588 (1991).
3. З.Н. Kronmüller, D. Goll, *Scripta Materialia* **47**, 551 (2002).
4. Kung-Te Chu *et al.*, *J. Phys. D.: Appl. Phys.* **38**, 4009 (2005).

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ ПЛЕНОК Fe и Co
НА ПОВЕРХНОСТИ ПЛАТИНЫ.

М.В. Мамонова*, М.Ю. Макеев, А.А. Зенова

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

*e-mail: mamonovamv@omsu.ru

С точки зрения численных расчётов расчёт энергии магнитной анизотропии (МАЭ) является весьма сложной задачей. С одной стороны, мы должны оценить разницу между полными энергиями магнитного материала для различных ориентаций намагниченности, а с другой — методы зонной структуры не могут быть применены к этим системам из-за отсутствия трансляционной симметрии. Расчёты МАЭ для монослоев Fe и Co на Pt (111) с использованием формализма SPR-KKR проводились ранее [1]. В данной работе представлены результаты первопринципных численных расчётов МАЭ и магнитных характеристик пленок Fe и Co на поверхности Pt с использованием пакета программ VASP [2] методом PAW. Рассчитаны значения полной энергии различных коллинеарных спиновых конфигураций и магнитных моментов атомов Fe и Co. Исследовано энергетическое преимущество различных положений адатомов и спиновых конфигураций. Исследована система, состоящая из ферромагнитных пленок, адсорбированных с обеих сторон на немагнитной металлической пластине толщиной от 3 до 15 моноатомных слоев с ориентацией грани поверхности с низким показателем Миллера. Для моделирования многослойной структуры использовалась периодическая суперячейка с постоянной решетки, соответствующей подложке, которую мы получили в результате расчетов с учетом оптимизации параметров решетки. Рассмотрены следующие спиновые конфигурации атомов пленок: ферромагнитное (все спины в одном направлении) и антиферромагнитное состояние, когда магнитные моменты атомов в пленках по обе стороны от пластины направлены противоположно. В случае трехкомпонентного вектора спина ориентации были перпендикулярны и параллельны поверхности пластины. Результаты наших расчетов показывают, что нахождение адатомов в междоузлии для всех ориентаций поверхности наиболее энергетически выгодно. Магнитные моменты атомов Co и Fe принимают наибольшее значение в ферромагнитной конфигурации в атомном слое, наиболее удаленном от подложки. Поверхностные атомы немагнитной подложки слабо подмагничиваются, абсолютные значения магнитных моментов слабо зависят от спиновой конфигурации. Исследование сходимости МАЭ по количеству k -точек и энергии обрезания плоских волн, используемых для получения самосогласованного потенциала, показало, что для платиновой подложки сходимость хуже, чем для медной подложки. Эти результаты могут быть применены при численном моделировании методами Монте-Карло неравновесного поведения многослойных магнитных сверхструктур [3].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ. Для проведения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН».

1. O. Sipr, S. Bornemann, J. Minar, and H. Ebert, Phys. Rev. B, **82**, 174414 (2010).
2. P.G. Kresse and J. Furthmuller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
3. В.В. Прудников, В.В. Прудников, М.В. Мамонова, УФН **60**, 762 (2017).

ИЗМЕНЕНИЕ СВОЙСТВ ГАЗОРАСПЫЛЕННОГО ПОРОШКА СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Fe – Nd – В ПРИ ДЛИТЕЛЬНОМ ИЗОТЕРМИЧЕСКОМ ОТЖИГЕ

А.О. Марухин*, В.В. Савин, Л.А. Савина, М.Н. Сороковиков, В.А. Чайка

Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия

*e-mail: marukhin.artem.o@gmail.com

Магнитный материал, применяющийся с целью производства постоянных магнитов, обязан соответствовать ряду условий: обладать высокой температурной устойчивостью, большими показателями коэрцитивной силы и остаточной индукции, а также способностью получения различных форм тела посредством механического обрабатывания либо спекания и доступностью исходных материалов. Наибольшего успеха в этом направлении достигли японские исследователи, предложившие Fe–Nd–В сплавы [1].

Полученные по уникальной технологии газораспыленные порошки (ГРП) на основе сплава системы Fe–Nd–В [2] являются перспективными материалами для изготовления постоянных магнитов общего и специального назначения.

В работе исследовалось влияние изотермического отжига при 600°С в вакууме в течении 1 и 2 часов на микроструктуру и магнитные свойства ГРП 2-х сплавов системы Fe–Nd–В: без легирования Fe₇₈Nd₁₅B₇ и легированного металлами ТМ и REM. Для этих сплавов с увеличением времени отжига характерно увеличение размера зерен и их слияние, но с разной динамикой (см. рис. 1).

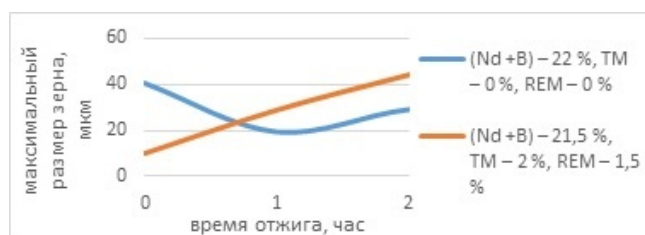


Рис. 1. Среднее значение максимального размера зерна.

При этом металлографические исследования указывают на тенденцию роста количества пор в объеме частиц. Наиболее вероятно наблюдаемый результат связать с повышенным окислением межзеренного пространства (преимущественно состоящего из обогащенной неодимом тройной эвтектики) и выпадение с поверхности металлографического шлифа (в процессе его полировки и травления) различных выделений и включений.

В работе изготавливали магнитопласты (размерами 10 × 10 × 10 мм) из исходных и отожженных порошков с содержанием пластификатора 10% по массе. Изготовленные из нелегированного сплава магнитопласты имеют следующие показатели остаточной магнитной индукции на поверхности: для исходного состояния значение 55 мТл, для 1 и 2-х часов отжига 44 мТл и 51 мТл, соответственно; для легированного сплава показатели выше: 63 мТл, 66 мТл и 71 мТл для исходного и отожженного в течение 1 и 2-х часов, соответственно.

Выводы:

1. Легированные ГРП сплава системы Fe–Nd–В металлами ТМ и REM не более 3,5 мас% имеют устойчивую динамику роста зерен Fe₁₄Nd₂B с увеличением времени отжига при 600°С в вакууме.
2. Изменения значений магнитной индукции магнитопластов с течением времени отжига коррелируют с изменениями значений среднего максимального размера зерна фазы Fe₁₄Nd₂B в сплавах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Субъекта РФ (Калининградская область) в рамках научного проекта № 19-48-390002/20.

1. M. Sagawa, S. Fujimura, N. Togawa *et al.*, Journal of Applied Physics, **55**(6), 2083 (1984).
2. В.В. Савин, Е.Ю. Костенко, Кристаллохимия промежуточных фаз и аморфных сплавов на основе переходных металлов. Монография — Запорожье, Запорожский национальный университет (2005).

ТЕТРАГОНАЛЬНАЯ МАГНИТОСТРИКЦИЯ В СПЛАВАХ Fe – (Ga, Ge): ИССЛЕДОВАНИЯ 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

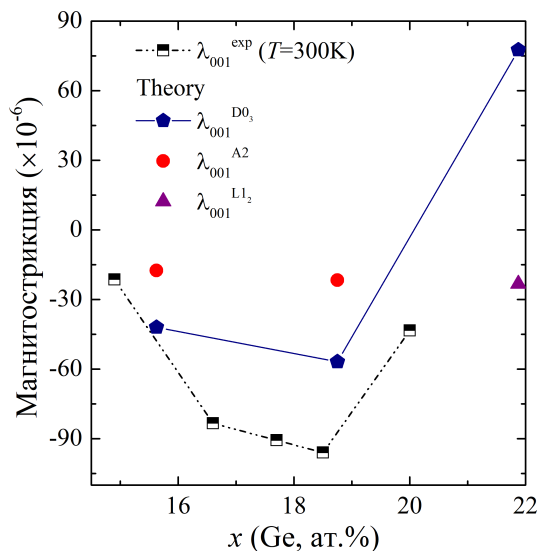


Рис. 1. Концентрационная зависимость величины тетрагональной магнитоэлектрической структуры A2, D0₃ и L1₂. Экспериментальные данные приведены из [4].

Учет обменно-корреляционных эффектов проводился в приближении обобщенного градиента в форме Perdew-Burke-Ernzerhof [8]. Моделирование кристаллических структур проводилось в рамках подхода суперъячеек для следующих групп симметрии: A2 – $Im\bar{3}m$ (№ 229), B2 – $Pm\bar{3}m$ (№ 221), D0₃ – $Fm\bar{3}m$ (№ 225) и L1₂ – $Pm\bar{3}m$ (№ 221). Рассчитана величина тетрагональной магнитоэлектрической структуры λ_{001} в различных кристаллических структурах в зависимости от содержания Ga/Ge в сплавах Fe_{100-x}(Ga, Ge)_x. На рис. 1 представлена полученная зависимость $\lambda_{001}(x)$ для сплава Fe-Ge в сравнении с экспериментальными данными.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 18-12-00283).

1. A.E. Clark *et al.*, J. Appl. Phys. **93**, 8621 (2003).
2. G. Petculescu *et al.*, J. Appl. Phys. **105**, 07A932 (2009).
3. K.H.J. Buschow, Handbook of Magnetic Materials. — Amsterdam: Elsevier Science B.V (2012).
4. J.B. Restorff *et al.*, J. Appl. Phys. **111**, 023905 (2012).
5. O. Kubaschewski, Iron-binary phase diagrams. — Berlin: Springer-Verlag (1982).
6. G. Kresse, J. Furthmüller, Phys. Rev. B. **54**, 11169 (1996).
7. G. Kresse, D. Joubert, Phys. Rev. B. **59**, 1758 (1999).
8. J.P. Perdew *et al.*, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).

Многофункциональные соединения на основе железа интересны своими необычными механическими, магнитными и электрическими свойствами, в частности значительными магнитоэлектрическими свойствами [1-4]. Фазовые диаграммы сплавов Fe-Ga и Fe-Ge схожи для областей с высоким содержанием железа [5], однако концентрационные зависимости величины тетрагональной магнитоэлектрической структуры λ_{001} существенно различаются [4]. Исследование магнитного упорядочения и магнитных свойств, выяснение механизмов магнитоэлектрической структуры и условий ее увеличения в сплавах Fe-(Ga, Ge) разного состава позволит создавать более эффективные и миниатюрные устройства, обладающие большой магнитоэлектрической в малых магнитных полях.

Настоящая работа представляет собой *ab initio* исследование магнитных свойств сплавов Fe_{100-x}(Ga, Ge)_x (15.625 ≤ x ≤ 21.875 ат.%) в кубических кристаллических структурах A2, B2, D0₃ и L1₂ при помощи теории функционала плотности, реализованной в пакете VASP [6,7].

МНОГОСЛОЙНЫЕ ПЛЕНОЧНЫЕ СТРУКТУРЫ ДЛЯ ВЫСОКОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ МАГНИТНЫХ БИОСЕНСОРОВ НА ОСНОВЕ МАГНИТОИМПЕДАНСНОГО ЭФФЕКТА

Г.Ю. Мельников*, В.Н. Лепаловский, Г.В. Курляндская

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: grisha2207@list.ru

Гигантский магнитоимпедансный эффект (МИ) — это изменение импеданса ферромагнитного проводника при протекании по нему переменного тока высокой частоты во внешнем магнитном поле. МИ — один из наиболее чувствительных эффектов, позволяющих создавать специализированные сенсоры магнитных полей для детектирования биоманнитных сигналов. Многослойные пленочные структуры на основе пермаллоя — магнитомягкие материалы с высокой динамической магнитной проницаемостью и высоким МИ эффектом, перспективные для биоприменений [1] (например, для контроля особенностей кровотока в кровеносных сосудах). Целью данной работы является исследование состава, структуры и магнитных свойств пленочных элементов и детектирование магнитной вставки из оксидной смолы с микрочастицами Fe_3O_4 , моделирующей тромб в кровеносном сосуде.

Многослойные пленочные элементы $\text{Ti}(5 \text{ нм})/[\text{FeNi}(25 \text{ нм})/\text{Ti}(5 \text{ нм})]_{10}/[\text{Cu}(50 \text{ нм})/\text{Ti}(5 \text{ нм})]_5/[\text{FeNi}(25 \text{ нм})/\text{Ti}(5 \text{ нм})]_{10}$ в виде полос ($10 \text{ мм} \times 0.5 \text{ мм}$) были получены методом ионно-плазменного распыления. Структура пленок исследовалась с помощью рентгеноструктурного анализа.

Петли магнитного гистерезиса были измерены с помощью вибромагнитометра и магнитооптического Керр-микроскопа. Продольный ГМИ эффект измерялся с использованием спектрального анализатора импеданса Agilent HP E 4991 A. МИ соотношение для импеданса Z рассчитано следующим образом: $\Delta Z/Z = 100 \times (Z(H) - Z(H_{\text{max}}))/Z(H_{\text{max}})$, где $H_{\text{max}} = 100 \text{ Э}$.

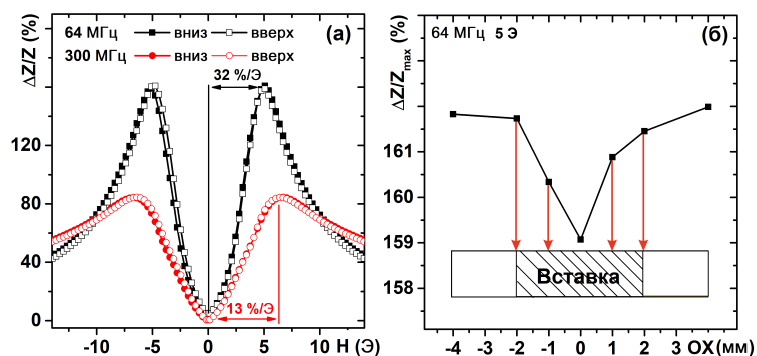


Рис. 1. Полевая зависимость МИ соотношения на частотах 300 МГц и 64 МГц, чувствительность МИ соотношения 13%/Э и 32%/Э соответственно (а); зависимость максимального МИ соотношения от положения магнитной вставки, стрелками указаны положения измерения МИ (б).

FeNi прослойками Ti наблюдается уменьшение размера зерна пермаллоя с 30 до 10 нм. Магнитная вставка в виде цилиндра располагалась на расстоянии 0.5 мм от поверхности МИ элемента и перемещалась перпендикулярно его длинной стороне. Для каждого положения вставки были измерены полевые зависимости МИ соотношения (рис. 1(а)). Максимальное изменение величины МИ в присутствии и отсутствии вставки наблюдалось при частоте 64 МГц в поле порядка 5 Э: при совмещении центра МИ элемента и магнитной вставки наблюдалась минимальная величина МИ (рис. 1(б)). В данной работе были исследованы свойства пленочных элементов на основе пермаллоя, и показана возможность их использования в магнитных биосенсорах на основе МИ эффекта.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ, проект № 18-19-00090.

1. F.A. Blyakhman *et al.*, *Sensors* **18**, 3 (2018).

ПРОТИВОКРАЖНЫЕ СИСТЕМЫ (ИЗУЧЕНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ЭЛЕМЕНТОВ ПРОТИВОКРАЖНЫХ СИСТЕМ)

К.А. Меренцова*, Д.С. Незнахин

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: merencovak@mail.ru

Самая острая проблема магазинов розничной продажи — это воровство покупателей. Для уменьшения потерь выручки, связанной с кражами, в настоящее время повсеместно используются «противокражные» системы. Наиболее широкое распространение получили системы, состоящие из датчика, который крепится непосредственно на товар, и детектора («ворота»), которые устанавливаются непосредственно у выхода и которые реагируют на активированный датчик. Целью данной работы является повышение чувствительности «противокражного» датчика.

В данной работе проведено изучение магнитных свойств магнитных элементов «противокражной» системы акустомагнитной технологии. Также рассмотрены бесконтактные способы идентификации объекта, использующие различные физические принципы. Конструкционные особенности «противокражных» систем, основанных на трех различных технологиях: электромагнитной, акустомагнитной и радиочастотной. Исследование пленок акустомагнитного датчика заключалось в химическом и рентгеноструктурном анализе, получении магнитных гистерезисных свойств, определении магнитного фазового состава материала, измерении резонансных спектров. Проведены последующие термические отжиги, с целью изменения и улучшения имеющихся свойств датчика.

Нами определены особенности магнитного состояния магнитных элементов «противокражных» систем, изготовленных по акустомагнитной технологии. Изучено влияние термических отжигов на магнитные характеристики.

В датчиках, работающих на акустомагнитной технологии, существует два типа лент, которые выполняют различные функции.

Ленты первого типа, с эффектом магнитострикции, являются магнитомягкими лентами ($H_c = 20$ Э) на основе Fe и Ni в соотношении 1/1 и добавлением В. Данные ленты изначально находятся в аморфном состоянии с температурой Кюри 375°C . После отжигов при температурах выше 400°C происходит кристаллизация, которая приводит к изменению фазового состава, в сплаве формируется несколько магнитных фаз, каждая со своей температурой Кюри. Также происходит снижение H_c примерно до 10 Э. При этом резонансный пик спектра возбуждения катушки, в которую помещается лента в исходном состоянии или после отжигов, изменяется не значительно.

Ленты второго типа, которая выполняет функцию «постоянного» магнита, также является магнитомягкой лентой ($H_c = 20$ Э) на основе Fe и Ni в соотношении 2/1. Данные ленты изначально находятся в кристаллическом состоянии, в них присутствуют фазы Fe-Ni и FeB. После отжигов при температурах выше 400°C происходит гомогенизация лент, что приводит к снижению H_c примерно до 10 Э. При этом резонансный пик спектра возбуждения катушки, в которую помещается лента в исходном состоянии или после отжигов, не изменяется.

На основании проделанной работы можно заключить, что отжиги изменяют кристаллическую структуру магнитных элементов «противокражных» датчиков акустомагнитной системы, но это, к сожалению, не способствует увеличению чувствительности этих элементов.

1. С.В. Вонсовский, Магнетизм, — М., Наука (1971).

2. А.И. Гусев, А.А. Ремпель, Нанокристаллические материалы — М.: ФИЗМАТЛИТ (2001).

ВЛИЯНИЕ ТЕРМООБРАБОТКИ НА ПРОЦЕСС ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК СПЛАВА FINEMET

Е.А. Михалицына*, В.А. Катаев

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: evgenia.mihalitsyna@urfu.ru

Эффективным способом управления магнитными свойствами быстрозакаленных лент сплавов типа FeNbCuSiB (Finemet) [1] является термомагнитная обработка, в процессе которой в присутствии магнитного поля в лентах происходят структурные изменения. Подвергая их контролируемой термомагнитной обработке можно влиять на напряжения, регулировать размер зерен и объем кристаллической фазы, способствовать возникновению наведенной одноосной анизотропии с осью легкого намагничивания вдоль направления приложенного в процессе отжига внешнего магнитного поля. Присутствие наведенной магнитной анизотропии оказывает влияние на улучшение свойств ферромагнетика [2].

В данной работе сплав Finemet был рассмотрен в виде тонких пленок, полученных методом высокочастотного ионно-плазменного распыления. Осаждение пленок толщиной 10 – 200 нм осуществлялось на стеклянные подложки в атмосфере аргона в присутствии технологического магнитного поля напряженностью 100 Э. Термообработка образцов пленок проводилась при температурах 350, 400, 450°С в течение 30 минут в камере для напыления также в присутствии магнитного поля. Анализ процессов перемагничивания тонких пленок проводился на основе магнитооптических петель гистерезиса и изображений доменной структуры пленок, полученных с помощью магнитооптического микроскопа на основе эффекта Керра.

В состоянии после получения все пленки демонстрировали присутствие наведенной одноосной магнитной анизотропии, вывод о которой был сделан на основе полученных петель гистерезиса. Вдоль оси легкого намагничивания перемагничивание начиналось с образования доменов обратной фазы на границах образца до формирования полосовой доменной структуры, после чего происходило смещение доменных стенок. Термообработка при температурах ниже температуры начала кристаллизации, 350 и 400°С, приводила к заметному изменению вида доменной структуры пленок, хотя форма петель гистерезиса не претерпевала заметных трансформаций. Перемагничивание пленок после термообработки по-прежнему начиналось с образования доменов обратной фазы на границах пленки. Однако при дальнейшем снижении поля, прорастающие домены не имели четко определенной формы и направления. Такой неупорядоченный вид доменной структуры характерен для материалов со слабой магнитной анизотропией [3] при отсутствии наведенной одноосной анизотропии. При этом ориентация доменов определялась формой образцов, локальными неоднородностями структуры, слабыми остаточными напряжениями, влиянием поверхности. После отжига при 450°С, в результате которого формируются нанозерна ОЦК–FeSi. Наличие кристаллических зерен с относительно высокой константой естественной анизотропии приводит к усилению роли удельной энергии доменных стенок и уменьшению их числа, с целью минимизации полной энергии. В результате этого формировалась плоскопараллельная доменная структура и процесс перемагничивания происходил преимущественно смещением доменных стенок.

1. Y. Yoshizawa *et al.*, Journal of Applied Physics **64**, 10 (1988).

2. А.Г. Лесник, Наведенная магнитная анизотропия. – К.: Наукова думка (1976).

3. O. Životský, IEEE Transactions on Magnetics **48**, 4 (2012).

ВЛИЯНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА НА ТЕМПЕРАТУРУ СПИНОВОЙ ПЕРЕОРИЕНТАЦИИ В СОЕДИНЕНИЯХ ТИПА $\text{Fe}_{7-x}\text{M}_x\text{Se}_8$ С.Н. Мозговых^{1*}, Н.В. Баранов², А.С. Волегов¹, Н.В. Селезнева¹¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия²Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*e-mail: Stepan.Mozgovykh@urfu.ru

В последние годы селениды железа Fe–Se вызывают большой интерес в связи с перспективностью их применения в специфических электронных, оптических и магнитных устройствах, а также благодаря разнообразию их физических свойств. Их магнитные и проводящие свойства зависят от химического состава, и они могут быть ферро- или ферримагнитными металлами, полупроводниками или даже сверхпроводниками. В монокристаллах ферримагнитного соединения Fe_7Se_8 наблюдается спонтанная спиновая переориентация, т.е. изменение кристаллографического направления спинов атомов железа при изменении температуры (T_{SR}). Показано, что если соединение кристаллизуется в гексагональной сингонии, то переход происходит скачком при $T_{\text{SR}} \sim 120 - 130$ К, если в моноклинной сингонии, то процесс начинается при охлаждении ниже $T_{\text{SR}} \sim 220$ К и носит постепенный характер. В работе [1] показано, что распределение вакансий в результате изменения химического состава или условий получения образцов могут оказывать сильное влияние на спин-переориентационные переходы. Ранее нами было установлено, что при недостатке железа в соединении $\text{Fe}_{6.9}\text{Se}_8$ температура спиновой переориентации понижается до $T_{\text{SR}} \sim 90$ К.

Целью настоящей работы было изучение влияния замещения железа в катионной под решетке атомами других $3d$ металлов на поведение спиновой переориентации и магнитный момент железа в соединениях типа $\text{Fe}_{7-x}\text{M}_x\text{Se}_8$.

В работе получали образцы соединений $\text{Fe}_{7-x}\text{M}_x\text{Se}_8$ (где M — V, Cr, Co, Ni, Cu) модифицированным методом Бриджмена в вакуумированных кварцевых ампулах, в градиентной вертикальной печи. Аттестация фазового состава проводилась на дифрактометре Bruker D8 Advance. Температурные и полевые зависимости намагниченности измерялись в температурном интервале 2 – 380 К с помощью СКВИД-магнитометра MPMS (Quantum Design) в магнитных полях до 70 кЭ.

Установлено, что соединения $\text{Fe}_{7-x}\text{M}_x\text{Se}_8$ при $x \leq 0.5$ однофазны и кристаллизуются в гексагональной сингонии. Исключением является замещение медью, которое приводит к фазовому расслоению на фазы $\text{Fe}_{7-x}\text{M}_x\text{Se}_8$ и Cu_{2-6}Se .

Были получены и изучены полевые и температурные зависимости намагниченности монокристаллов $\text{Fe}_{7-x}\text{M}_x\text{Se}_8$. Установлено, что даже небольшое отклонение от химического состава Fe_7Se_8 приводит к значительным изменениям в температуре спиновой переориентации. Например, замещение кобальтом приводит к увеличению температуры, тогда как атомы ванадия понижают температуру спиновой переориентации и при концентрации $x = 0.5$ полностью подавляют переход.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации проект № FEUZ-2020-0054.

1. I.S. Lyubutin *et al.*, The Journal of chemical physics **141** (4), 044704, (2014).

МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ И НАМАГНИЧЕННОСТЬ В СПЛАВАХ $Gd_5(Si_xGe_{1-x})_4$ В ЦИКЛИЧЕСКИХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

А.А. Мухучев^{1*}, А.А. Амиров¹, J.H. Belo², А.М. Алиев¹

¹Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

²IFIMUP, Physics Department of Science Faculty, Porto University, Porto, Portugal

*e-mail: mukhuch87@mail.ru

Интерес к поиску и исследованию магнитокалорических материалов не ослабевает в связи с перспективой их использования в технологии магнитного охлаждения. Наибольшие значения магнитокалорического эффекта (МКЭ) среди известных магнитокалорических материалов наблюдаются в материалах с магнитоструктурными фазовыми переходами, в которых изменение энтропии магнитной подсистемы сопровождается также изменением энтропии решетки за счет индуцированного магнитоструктурного фазового перехода.

Одним из таких перспективных материалов является сплав $Gd_5(Si_xGe_{1-x})_4$. Резкое изменение объема решетки данных сплавов при магнитоструктурном переходе приводит к гигантским значениям МКЭ, но одновременно приводит и к недостаткам этих материалов. В частности, из-за широких температурных гистерезисов, для индуцирования обратимых фазовых переходов требуются сильные магнитные поля, что ограничивает возможное использование таких материалов. Для практического приложения, эти материалы нужно менять таким образом, чтобы большие значения МКЭ наблюдались в относительно небольших полях, и свести к минимуму ширину температурного гистерезиса.

В данной работе приводятся результаты исследования магнитокалорических свойств сплавов $Gd_5(Si_xGe_{1-x})_4$ с различным соотношением Si и Ge. 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 кЭ в интервале температур от 180 – 350 К при частотах до 20 Гц (в последнем случае амплитуда изменения поля составляла 6.2 кЭ). 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 К, соответственно. В образце $Gd_5Si_{2.8}Ge_{1.2}$, в отличие от первых двух, температурный гистерезис не проявляется.

В слабых магнитных полях ($\Delta H = 0.5, 1, 2, 3$ кЭ) на зависимости $\Delta T(T)$ хорошо прослеживается двухфазность $Gd_5Si_{1.8}Ge_{2.2}$ и $Gd_5Si_2Ge_2$ в виде двойных пиков. Величина максимума МКЭ растет с увеличением концентрации кремния. В полях 18, 40 и 80 кЭ на зависимости $\Delta T(T)$ двойные пики отсутствуют. Максимальное значение МКЭ наблюдается для $Gd_5Si_2Ge_2$ и равна $\Delta T_{max} = 11.3$ К в поле 80 кЭ. В образце $Gd_5Si_{2.8}Ge_{1.2}$, в котором гистерезисные эффекты не проявляются, величина МКЭ в поле 80 кОе составляет 9.4 К.

Исследования частотной зависимости МКЭ показывают, что при частоте 20 Гц величина эффекта по сравнению с МКЭ при частоте 0.5 Гц 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.

С ростом концентрации кремния повышается температура перехода и одновременно растет ширина температурного интервала эффекта. Ширина полумаксимумов эффекта в поле 80 кЭ в образцах $Gd_5Si_{1.8}Ge_{2.2}$, $Gd_5Si_2Ge_2$ и $Gd_5Si_{2.8}Ge_{1.2}$ составляют 44, 56 и 116 К, соответственно. Полученные результаты показывают, что посредством изменения соотношения концентрации кремния и германия можно не только регулировать температуры максимумов МКЭ, но и значения МКЭ, и температурный интервал эффекта в широкой области комнатных температур.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и БРФФИ в рамках научного проекта № 20-52-00047, а также при финансовой поддержке гранта РНФ № 18-12-00415.

ВЛИЯНИЕ ОБРАБОТКИ АЦЕТОНОМ НА МАГНИТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АМОРФНОГО МАГНИТОМЯГКОГО СПЛАВА Co – Ni – Fe – Cr – Mn – Si – B

Е.С. Некрасов*, Н.Д. Денисов, Н.А. Скулкина

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: ENekrasovv@yandex.ru

Ленты быстрозакаленного аморфного магнитомягкого сплава АМАГ-172 (Co-Ni-Fe-Cr-MnSi-B) находят применение в магнитном экранировании, поскольку обладают высокими значениями максимальной магнитной проницаемости (μ_{\max}). Ацетон широко используется для обезжиривания поверхностей материалов, в том числе и лент аморфных магнитомягких сплавов. Известно, что в присутствии катализатора имеют место реакции окисления и гидрирования ацетона. Катализаторами этих реакций являются переходные металлы и их оксиды, которые присутствуют на поверхности лент исследуемых сплавов. Ранее проведенные исследования показали, что обработка поверхности ленты ацетоном способствует перераспределению намагниченности в ленте и оказывает влияние на магнитные характеристики. В состояниях ленты с разными знаками магнитострикции насыщения характер этого влияния на магнитные характеристики противоположный [1]. В настоящей работе исследовали влияние длительности обработки ацетоном и временную стабильность эффекта. Исследования проводили на образцах в форме полос размерами $100 \times 10 \times 0.020$ мм. Объем доменов с ортогональной намагниченностью ($V_{\text{орт}}$) определяли с помощью авторской методики [2–3]. Предварительно отожженные на воздухе при 380°C с длительностью изотермической выдержки 40 мин, формирующей состояние с $\lambda_s > 0$ [2], образцы погружали в ацетон на 20 и 46 часов. Образцы обладали следующим исходным уровнем магнитных характеристик: $\mu_{\max} = 460000$; $V_{\text{орт}} = 9.7$; острота магнитной текстуры в плоскости ленты (отношение объемов доменов с планарной намагниченностью, ориентированной вдоль и поперек оси ленты) $\eta = 1.20$.

Таблица 1. Относительное изменение магнитных характеристик образцов после обработки ацетоном ($\mu_{\max_{1,2}}$, $V_{\text{орт}_{1,2}}$, $\eta_{1,2}$ — магнитные характеристики до (после) обработки ацетоном).

Длительность обработки	$\mu_{\max_2}/\mu_{\max_1}$	$V_{\text{орт}_2}/V_{\text{орт}_1}$	η_2/η_1
20	1.00	1.08	2.54
46	0.91	1.15	1.91

Исследования показали, что обработка ленты ацетоном в состоянии с $\lambda_s > 0$ способствует увеличению $V_{\text{орт}}$ и η , что может быть обусловлено действием преимущественно плоских анизотропных сжимающих напряжений, индуцируемых в ленте из-за уменьшения концентрации водорода и кислорода в результате каталитического окисления и гидрирования ацетона [1]. Увеличение длительности обработки ацетоном приводит к большему росту $V_{\text{орт}}$ и меньшему увеличению η . В результате этого наблюдается уменьшение μ_{\max} . Это может быть следствием более длительного процесса каталитического окисления и гидрирования ацетона, способствующего росту уровня индуцируемых сжимающих напряжений из-за увеличения толщины слоя, обедненного кислородом и водородом. Влияние обработки ацетоном на магнитные характеристики ленты аморфного сплава не исчезает с течением времени.

1. Н.А. Скулкина, Н.Д. Денисова, А.С. Боярченко, Е.С. Некрасова, ФММ **121**, 576 (2020).
2. Н.А. Скулкина, О.А. Иванов, А.К. Мазеева, П.А. Кузнецов, Е.А. Степанова, О.В. Блинова, Е.А. Михалицына, Н.Д. Денисов, В.И. Чекис, ФММ **118**, 1176 (2017).
3. Н.А. Скулкина, О.А. Иванов, Е.А. Степанова, Изв. АН, сер. физ. **65**, **10**, 1483 (2001).

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ЖЕЛЕЗА НА СТРУКТУРУ И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЫСОКОИНТЕРКАЛИРОВАННЫХ СОЕДИНЕНИЙ $\text{Fe}_x\text{TiS}_{1.7}\text{Se}_{0.3}$

В.С. Носовец*, Е.М. Шерокалова

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: vadim.nosovets@urfu.ru

Дихалькогениды титана $\text{Ti}(\text{S},\text{Se})_2$ обладают слоистой структурой типа CdI_2 с пространственной группой $P-3m1$, в которой имеются Ван-дер-Ваальсовы щели, открывающие возможность внедрения в их пространство различных атомов. Варьирование концентрации и сорта внедряемых атомов, а также состава матрицы позволяет модифицировать физические свойства. Например, в соединениях $\text{Fe}_{0.5}\text{TiS}_{2-y}\text{Se}_y$ ниже температуры Нееля (T_N) приложение магнитного поля индуцирует метамагнитный фазовый переход из антиферромагнитного (АФ) состояния в состояние с большой намагниченностью (ферромагнитное (Ф) или ферримагнитное (ФИ)). Значение критического поля возрастает с увеличением содержания селена от ~ 50 кЭ для $\text{Fe}_{0.5}\text{TiS}_2$ ($y = 0$) и достигает максимального значения около 470 кЭ для состава $\text{Fe}_{0.5}\text{TiSe}_2$ ($y = 2$). Наблюдаемый АФ–Ф(ФИ) переход в соединениях с $y < 0.5$ сопровождается эффектом гигантского магнитосопротивления (до 27% для $\text{Fe}_{0.5}\text{TiS}_2$) и высокими значениями коэрцитивной силы ($H_c \sim 60$ кЭ для $\text{Fe}_{0.5}\text{TiS}_{1.7}\text{Se}_{0.3}$) [1].

В настоящей работе были получены и исследованы поликристаллические образцы системы $\text{Fe}_x\text{TiS}_{1.7}\text{Se}_{0.3}$ со значениями $x = 0.66, 0.75, 0.85$. Синтез образцов проводился методом твердофазных реакций в вакуумированных кварцевых ампулах и включал три стадии. Рентгеноструктурный анализ проводился при помощи дифрактометра Bruker AXS D8 ADVANCE с последующей обработкой результатов программным комплексом FullProf. Измерение температурных зависимостей электросопротивления производилось стандартным 4-х контактным методом на постоянном токе с помощью криостата замкнутого цикла CryoFree204 в интервале температур 10 – 300 К. Намагниченность измерялась на вибрационном магнитометре LakeShore VSM 7407 в диапазоне 80 – 1000 К.

При уточнении кристаллической структуры соединений $\text{Fe}_x\text{TiS}_{1.7}\text{Se}_{0.3}$ было учтено перемешивание атомов Fe и Ti в катионных слоях. Наличие такого перемешивания ранее было установлено для родственных соединений $\text{Fe}_{0.66}\text{TiS}_2$ и $\text{Fe}_{0.75}\text{TiS}_2$ при помощи нейтронной дифракции.

Образец с содержанием железа $x = 0.66$ кристаллизуется в структурном типе Cr_3S_4 с пространственной группой $I2/m$. Упорядочение атомов железа в данном соединении приводит к образованию сверхструктуры $\sqrt{3}a_0 \times a_0 \times 2c_0$ по отношению к исходной матрице $\text{TiS}_{1.7}\text{Se}_{0.3}$ с параметрами a_0 и c_0 . В соединении $\text{Fe}_{0.85}\text{TiS}_{1.7}\text{Se}_{0.3}$ реализуется структура исходной матрицы, при этом сверхструктура не образуется. Такое повышение симметрии при увеличении x подтверждает наличие перемешивания атомов железа и титана в катионных слоях.

Согласно предварительным термомагнитным измерениям исследованные соединения $\text{Fe}_x\text{TiS}_{1.7}\text{Se}_{0.3}$ являются ферримагнетиками ниже $T_N \sim 120$ К. Ниже T_N на температурных зависимостях электросопротивления наблюдается аномальный рост, связанный с магнитным фазовым переходом. На температурной зависимости намагниченности $\text{Fe}_{0.66}\text{TiS}_{1.7}\text{Se}_{0.3}$ при $T \sim 800$ К обнаружено отклонение от закона Кюри–Вейсса, связанное с разупорядочением вакансий в катионной подрешётке.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (проект № FEUZ-2020-0054).

1. N. Baranov *et al.*, Physical Review B **100**, 024430 (2019).

СИСТЕМА GdFeAl – GdFeSi со сменой типа решетки

С.П. Платонов^{1*}, А.Г. Кучин¹, В.С. Гавико^{1,2}, М.Ю. Яковлева¹¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия²Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*e-mail: platonov@imp.uran.ru

Синтезированы новые интерметаллические соединения $\text{GdFeAl}_{1-x}\text{Si}_x$, $x = 0 - 1$. Сплавы $\text{GdFeAl}_{1-x}\text{Si}_x$ кристаллизуются в гексагональную фазу ($x = 0 - 0.8$) типа MgZn_2 ($P6_3/mmc$), тетрагональную ($x = 0.4 - 1$) типа CeFeSi ($P4/nmm$) и кубическую ($x = 0 - 0.7$) типа MgCu_2 ($Fd3m$). Параметры решеток для всех трех фаз уменьшаются с ростом содержания Si. Намагниченность насыщения M_{sat} в системе $\text{GdFeAl}_{1-x}\text{Si}_x$ растет по мере увеличения содержания Si. Известно, что Fe магнитно в кубической и гексагональной фазах состава $x = 0$ и немагнитно в тетрагональной фазе сплава $x = 1$. Возможно, магнитный момент у ионов Fe существует во всех фазах промежуточного состава и уменьшается по мере заполнения $3d$ зоны Fe внешними электронами Si. Так можно объяснить рост $M_{\text{sat}}(x)$, поскольку магнитный момент иона Fe противоположен моменту иона Gd, величина которого неизменна в любой фазе.

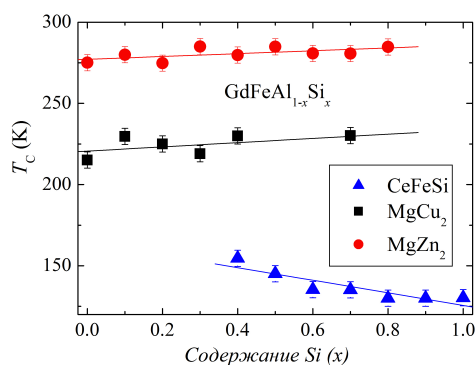


Рис. 1. Концентрационные зависимости температур Кюри $T_C(x)$ для гексагональной типа MgZn_2 ($P6_3/mmc$) (●), тетрагональной типа CeFeSi ($P4/nmm$) (▲) и кубической типа MgCu_2 ($Fd3m$) (■) фаз соединений $\text{GdFeAl}_{1-x}\text{Si}_x$.

Как показано на рис. 1, температура Кюри $T_C(x)$, по мере роста x , увеличивается для гексагональной и кубической фаз в интервалах 275 – 281 К и 214 – 230 К, соответственно, и уменьшается для тетрагональной фазы от 155 до 130 К. Корреляция между $T_C(x)$ и параметрами решеток $a(x)$, $c(x)$ для тетрагональной фазы (взаимно пропорциональны) противоположна случаю гексагональной и кубической фаз (обратно пропорциональны). T_C гексагональной и кубической фаз могут расти с ростом x в случае уменьшения момента Fe в этих фазах и, следовательно, уменьшения энергии отрицательных обменных взаимодействий между ионами Fe и Gd. Для тетрагональной фазы подобные рассуждения не срабатывают, возможно, из-за другой электронной структуры фазы вблизи уровня Ферми. Изучено изотермическое изменение магнитной энтропии $-\Delta S_M(T)$ (магнитокалорический эффект МКЭ) и оценено возможное максимальное значение МКЭ для каждой фазы. Перспективными для создания однофазного сплава с высоким МКЭ при комнатной T можно считать кубическую фазу в составе $x = 0$ с МКЭ 2.3 Дж/кгК (в поле 17 кЭ) и $T_C = 210$ К и гексагональную фазу в составах $x = 0 - 0.8$ с МКЭ 1-2.6 Дж/кгК и $T_C = 275 - 281$ К. Возможность выбором режима отжига стабилизировать гексагональную или кубическую фазу в сплаве GdFeAl показана в работе [1].

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 18-72-10098.

1. M. Klimczak, E. Talik, J. Jarosz, T. Mydlarz, Materials Science-Poland **26**, 953 (2008).

ПРЯМОЙ И ОБРАТНЫЙ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ СОЕДИНЕНИЙ $\text{Nd}(\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x)_2$ ($x = 0 - 0.16$)

М.С. Аникин, Е.В. Потапов*, Е.Н. Тарасов, Д.С. Незнахин, М.В. Рагозина, А.В. Зинин
Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e-mail: jeka19981225@gmail.com

Интерметаллические соединения тяжелых редкоземельных металлов с кобальтом типа RCo_2 ($\text{R} = \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}$), интенсивно изучаются в течение более чем трех десятилетий в качестве потенциальных кандидатов рабочих тел магнитных охлаждающих машин. Эти материалы обладают значительными величинами магнитокалорического эффекта (МКЭ), такими как изотермическое изменение магнитной части энтропии (ΔS_m) и адиабатическое изменение температуры (ΔT_{ad}), при температурах, близких к температурам их магнитного упорядочения [1]. В соединении HoCo_2 помимо температуры Кюри наблюдается спин-переориентационный переход при температуре 14.4 К, при котором ось легкого намагничивания меняется от [110] к [100] [2]. В окрестностях данного перехода также наблюдается резкий рост величин МКЭ [3]. В квазибинарных соединениях $\text{R}(\text{Co-Fe})_2$ ($\text{R} = \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}$), за счет добавки железа увеличивается температура перехода из ферри- в парамагнитное состояние, но в соединениях $\text{Ho}(\text{Co-Fe})_2$ отсутствует СП [4]. В соединениях с легким редкоземельным элементом неодимом, спин-переориентационный переход присутствует во всей серии $\text{Nd}(\text{Co-Fe})_2$ [5]. Что представляет интерес с точки зрения исследования МКЭ. Поэтому в данной работе представлены результаты исследования температурных и полевых зависимостей магнитных свойств и МКЭ соединений $\text{Nd}(\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x)_2$ ($x = 0, 0.04$ и 0.16).

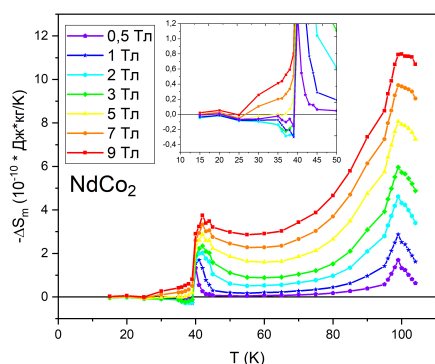


Рис. 1. Зависимости $\Delta S_m(T)$ при различных напряженностях магнитного поля для соединения NdCo_2 .

На рис. 1 представлены температурные зависимости (ΔS_m) соединения NdCo_2 . На графике явно различимы два пика: первый при температуре СП равной 40 К, второй при температуре Кюри (T_C) равной 100 К. При температурах ниже СП наблюдается обратный МКЭ в магнитных полях до 3 Тл.

Другой интересной особенностью на зависимости $\Delta S_m(T)$, является различная зависимость от магнитного поля максимального значения ΔS_m , при СП и T_C . Например, в магнитном поле 0.5 Тл максимальные значения ΔS_m в окрестности обоих переходов примерно равны, то при увеличении поля ΔS_m при T_C будет больше ΔS_m при СП, что можно связать с подавлением магнитным полем структурного перехода при СП [6].

Аналогичные соединению NdCo_2 результаты наблюдаются и на других исследованных соединениях $\text{Nd}(\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x)_2$. Полученные результаты обсуждаются.

Работа выполнена при поддержке Государственного контракта № 3.6121.2017/8.9 Минобрнауки России; Гранта Российского научного фонда № 19-72-00038.

1. Y.B. Yu, M. Liu, P.W. Egolf, A. Kitanovski, International Journal of Refrigeration **33**, 1029 (2010).
2. D. Gignoux, F. Givord, and R. Lemaire, Phys. Rev. B **12**, **9**, (1975).
3. A.M. Tishin, Y.I. Spichkin, 1st edition (Institute of Physics publishing, Bristol), 232 (2003).
4. M. Anikin, E. Tarasov, N. Kudrevatykh *et al.*, J. Magn. Magn. Mater. **418**, 181 (2016).
5. C.C. Hu, Y.G. Shi, T.F. Zheng *et al.*, Journal of Applied Physics **112** 063902 (2012).
6. Z.W. Ouyang, F.W. Wang, Q. Huang *et al.*, Phys. Rev. B **71**, 064405 (2005).

МИКРОМАГНИТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ С ОДНОНАПРАВЛЕННОЙ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ

И.А. Пушкарев*, Н.А. Кулеш, В.О. Васьковский, М.Е. Москалев, О.А. Аданаква

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: ilya.empire@gmail.com

Исследование тонких магнитных пленок с однонаправленной магнитной анизотропией представляет существенный интерес благодаря широкому спектру возможностей их применения, например, в носителях информации с высокой плотностью записи, магнитных сенсорах и т.д. Такой эффект возникает на интерфейсе между двумя магнитными слоями, один из которых ферромагнитный, а другой антиферромагнитный. Магнитная предистория образца играет существенную роль в формировании гистерезисных свойств образца и может привести к нетривиальному поведению коэрцитивной силы и поля обменного смещения с температурой. В данной работе нами была предложена микромагнитная модель, позволяющая описать температурный ход гистерезисных свойств ферромагнитного слоя при различных протоколах охлаждения обменно-связанной системы.

Образцы пленок типа FeNi/FeMn были получены методом магнетронного распыления. Их кристаллическая структура была исследована с помощью дифрактометра, а магнитные свойства с помощью вибрационного магнитометра и MPMS на основе СКВИД магнетометра. Для микромагнитного моделирования был использован программный пакет Mumax3 [1], в котором реализована дискретизация методом конечных разностей. Для создания поликристаллического состояния было использовано независимое разбиение слоев по методу многогранников Вороного. При использовании микромагнитного подхода нельзя задать истинное антиферромагнитное состояние, поэтому было использовано приближение, в котором антиферромагнитный слой был заменен ферромагнитным с отключенными обменным взаимодействием между кристаллитами, внешним полем, магнитостатическим взаимодействием [2]. В результате нам удалось получить немонотонные зависимости коэрцитивной силы и поля обменного смещения характерные для предварительного охлаждения образца в поле антипараллельном или параллельном направлению обменного смещения, которые качественно повторяли ход зависимостей экспериментальных. В качестве одного из основных параметров при этом выступало распределение величины константы магнитной анизотропии в зернах антиферромагнитного слоя, которое позволило моделировать наличие мелких и крупных зерен в реальных образцах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 19-72-00141).

1. R.L. Stamps *et al.*, Physical Review B **71**(9), 094405 (2005).
2. J. De Clercq *et al.*, J Phys. D: Appl. Phys. **49**, 435001 (2016).

ИЗМЕРЕНИЕ СПИН-ВОЛНОВОЙ ЖЕСТКОСТИ В ГЕЛИМАГНЕТИКАХ С ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ДЗЯЛОШИНСКОГО-МОРИЯ

К.А. Пшеничный^{1,2*}, Е.В. Алтынбаев^{1,2}, С.В. Григорьев¹

¹Петербургский Институт Ядерной Физики, Гатчина, Россия

²Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Троицк, Москва, Россия

*e-mail: pshcyrill@mail.ru

Метод «косой» динамики, разработанный для изучения спиновых волн в ферромагнетиках, был предложен и реализован в Ленинградском институте ядерной физики в середине 80-х годов 20 века в Гатчине [1,2]. Метод основан на анализе лево-правой асимметрии в магнитном рассеянии поляризованных нейтронов, возникающей в случае, когда направление намагниченности в образце наклонено по отношению к волновому вектору падающего пучка. Рассеяние нейтронов на спиновых волнах сконцентрировано внутри конуса, ограниченного критическим углом — углом отсечки, который равен отношению массы магнона к массе нейтрона. Измеряя это отношение находят массу магнона и константу жёсткости спиновых волн в ферромагнитном материале. Эксперименты по измерению жёсткости спиновых волн в гелимагнетиках с взаимодействием Дзялошинского–Мория (ДМ) методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов показали наличие квадратичного закона дисперсии, смещённого в направлении поля на величину волнового вектора спирали \mathbf{k}_S [3]:

$$\epsilon_q = A(\mathbf{q} - \mathbf{k}_S)^2 - g\mu_B(H - H_{C2}), \quad (1)$$

где ϵ_q — энергия спиновой волны, \mathbf{q} — волновой вектор, g — g -фактор электрона, μ_B — магнетон бора, H и H_{C2} — внешнее магнитное поле и критическое поле перехода в индуцированную ферромагнитную фазу. Как было показано [3], даже в полностью поляризованном состоянии (внешнее магнитное поле $H > H_{C2}$) присутствие ДМ взаимодействия приводит к киральности спиновых волн и к асимметричному сдвигу кривой дисперсии в направлении магнитного поля на величину, равную волновому вектору спирали \mathbf{k}_S . Это явление названо магнитокиральной невзаимностью распространяющихся магнонов, причём знак их невзаимности зависит от киральности магнитной системы [4,5]. Благодаря высокому импульсному разрешению метода МУРН удалось не только экспериментально показать необычный вид дисперсионного соотношения, но и измерить величину и температурную зависимость константы жёсткости спиновых волн для целого ряда бинарных и квазибинарных соединений: MnSi, Mn_{1-x}Fe_xSi, FeGe, Mn_{1-x}Fe_xGe, Fe_{1-x}Co_xSi, Cu₂OSeO₃.

Авторы благодарят за поддержку Российский Научный Фонд (грант № 17-12-01050).

1. A.I. Okorokov, V.V. Runov, B.P. Toperverg, *et al.*, JETP Lett. **43**, 503 (1986).
2. V. Deriglazov, A. Okorokov, V. Runov, *et al.*, Physica B **262**, 181182 (1992).
3. S. V. Grigoriev, A. S. Sukhanov, *et al.*, Phys. Rev. B **92**, 220415(R) (2015).
4. Iguchi Y., Uemura S., Ueno K., Onose Y., Phys. Rev. B **92**, 184419 (2015).
5. Seki S., Okamura Y., Kondou K. *et al.*, Phys. Rev. B **93**, 235131 (2016).

ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ И МАГНИТОТЕПЛОВЫХ СВОЙСТВ СОЕДИНЕНИЙ $\text{Ho}_{1-x}\text{Y}_x(\text{Co}_{0.84}\text{Fe}_{0.16})_2$

М.С. Аникин*, М.В. Рагозина, Е.Н. Тарасов, Д.С. Незнахин, С.В. Андреев, Е.В. Потапов,
А.В. Зинин

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: maksim.anikin@urfu.ru

Бинарные ферритмагнетики $R\text{Co}_2$ с тяжелыми редкоземельными металлами (R) обладают значительными величинами магнитокалорического эффекта (МКЭ) при температуре перехода из ферри- в парамагнитное состояние (ФП) [1]. В соединении HoCo_2 МКЭ наблюдается дополнительный пик при температуре 14.4 К, при котором происходит изменение оси легкого намагничивания от [110] к [100] [2,3], т.е. спин-переориентационный переход (СП). В квазибинарных соединениях $R(\text{Co-Fe})_2$, отсутствуют СП, но наблюдается МКЭ при температурах ниже ФП, в окрестности так называемого «низкотемпературного» максимума, возникновение которого авторы связали с частичным разупорядочением R магнитной подрешетки из-за слабого межподрешеточного взаимодействия [4]. Для лучшего понимания роли обменных взаимодействий между R и $3d$ -магнитными подрешетками в таких системах мы подготовили серию соединений $\text{Ho}_{1-x}\text{Y}_x(\text{Co}_{0.84}\text{Fe}_{0.16})_2$ ($x = 0 \div 1$), в которых магнитоактивный R -элемент (Ho) замещается иттрием (Y), имеющим больший атомный радиус и не обладающим собственным результирующим магнитным моментом, с целью ещё сильнее ослабить межподрешеточное обменное взаимодействие.

В результате проведённой работы были определены значения температур Кюри (T_C) и параметр кристаллической решетки (a) соединений $\text{Ho}_{1-x}\text{Y}_x(\text{Co}_{0.84}\text{Fe}_{0.16})_2$ с $x = 0 \div 1$. Замещение Ho на Y ведет к линейному увеличению параметра кристаллической решетки a (от 7.2015 до 7.2391 Å) и уменьшению T_C (от 333 К до 200 К). Последнее свидетельствует об ослаблении обменных взаимодействий между R и $3d$ магнитными подрешетками.

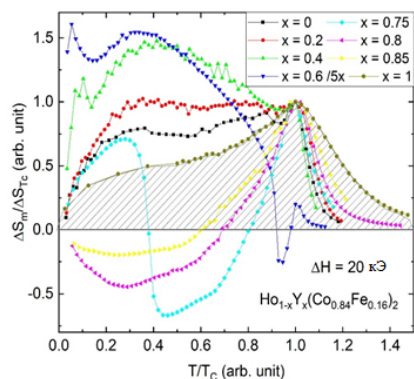


Рис. 1. Температурные зависимости изменения магнитной части энтропии в относительных единицах $\Delta S_m / \Delta S_{T_C}$ для $\text{Ho}_{1-x}\text{Y}_x(\text{Co}_{0.84}\text{Fe}_{0.16})_2$ с $x = 0 \div 1$ при изменении внешнего магнитного поля $\Delta H = 20$ кЭ. Значения для $x = 0.6$ уменьшены в 5 раз.

Установлена нелинейная зависимость от x с минимумом при $x = 0.8$.

Работа выполнена в рамках гранта Российского научного фонда №19-72-00038.

1. M. Anikin, E. Tarasov, N. Kudrevatykh *et al.*, J. Magn. Magn. Mater. **418**, 181 (2016).
2. D. Gignoux, F. Givord, and R. Lemaire, Phys. Rev. B **12**, 3878 (1975).
3. A.M. Tishin, Y.I. Spichkin, The Magnetocaloric Effect and Its Applications, 1st edition (Institute of Physics publishing, Bristol) 232 (2003).

Определенные температурные зависимости изменения магнитной части энтропии представлены на рис. 1. Из полученных результатов следует, что форма температурных зависимостей изменения магнитной части энтропии (ΔS_m), исследуемых соединений, сильно зависит от концентрации иттрия (x). Так, например в соединениях с $x = 0.60$ и 0.75 , при температурах 260, 95 К соответственно происходит компенсация намагниченностей подрешеток гольмия и $3d$ -металлов, обозначаемая как точка магнитной компенсации (T_K). Чистый вклад в ΔS_m от $3d$ -подрешетки (Co – Fe) наблюдается на соединении $\text{Y}(\text{Co}_{0.84}\text{Fe}_{0.16})_2$, которое вследствие того, что иттрий не имеет магнитного момента, ведет себя в отношении ΔS_m как обычный ферромагнетик и имеет только максимум при T_C .

Из сравнения максимальных значений ΔS_m при T_C и «низкотемпературном» максимуме (рис. 1) видно, что замещение Ho на Y приводит к относительному увеличению значений ΔS_m при «низкотемпературном» максимуме относительно T_C , до концентрации $x = 0.6$, что подтверждает предположение [1].

В образцах с $x = 0.6 - 0.85$ следует отметить наличие обратного МКЭ в интервале температур от T_K до T_C , величина обратного МКЭ зависит от x , с максимумом при $x = 0.8$.

Из кривых намагничивания, измеренных в магнитных полях до 90 кЭ при 5 К, были рассчитаны концентрационные зависимости магнитного момента, приходящегося на атом Ho при 5 К.

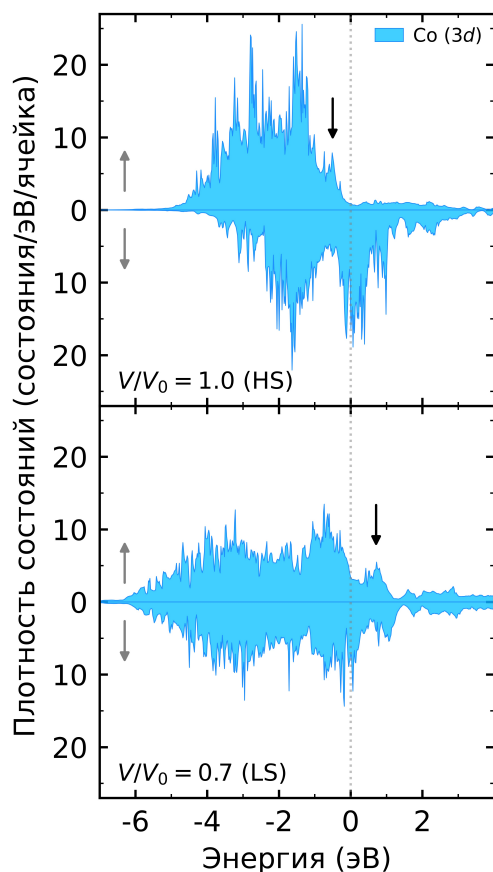
СПИНОВЫЙ ПЕРЕХОД В LuCo_3 Д.И. Радзивончик^{1*}, Д.С. Незнахин², А.В. Лукоянов^{1,2}¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия²Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*e-mail: radzivonchik@imp.uran.ru

Рис. 1. Плотность состояний d -электронов кобальта. Черными стрелками обозначено положение пика.

в этой области энергий для противоположной проекции спина всегда имеет относительно большие значения, поэтому пересечение пиком уровня Ферми приводит к неустойчивости в d -электронной подсистеме (переход из низкоспинового состояния в высокоспиновое). Движение пика относительно уровня Ферми обусловлено уширением/сжатием спин-поляризованных d -зон при уменьшении/увеличении объема V . Предполагается, что в целом подобный сценарий достижения неустойчивости реализуется и в магнитном поле, где положение пика регулируется силой зеемановского взаимодействия.

В докладе подробно анализируется указанный переход, а также будет предложено его модельное описание. Ожидается, что результаты могут быть обобщены и на другие соединения $R\text{Co}_3$ (R — редкоземельный элемент) с аналогичной структурой.

1. D.S. Neznakhin, D.I. Radzivonchik *et al.*, Phys. Rev. B **101**, 224432 (2020).

Монокристалл LuCo_3 (пространственная группа $R\bar{3}m$; № 166) показывает фазовый переход первого рода, заключающийся в резком изменении намагниченности при приложении магнитного поля $\mu_0 H = 47$ Тл (вдоль и перпендикулярно легкой оси кристалла) [1]. Причину данного фазового перехода можно прояснить через рассмотрение электронной структуры. Методом теории функционала плотности в пакете Quantum Espresso были рассчитаны магнитные моменты атомов и электронная структура для серии объемов, которые были получены изотропным изменением элементарной ячейки. Расчет показал, что при $V/V_0 = 0.86$ (V и V_0 — текущий и экспериментальный объем, соответственно) происходит резкое изменение магнитных моментов подрешеток кобальта на $0.35 - 0.50 \mu_B$, что близко соответствует экспериментальным значениям. Так же показано, что ферромагнитное упорядочение магнитных моментов трех подрешеток кобальта — наиболее энергетически выгодно.

Причина магнитного фазового перехода в соединении LuCo_3 при изменении объема связана с особенностью строения электронной структуры в области уровня Ферми (рис. 1). Плотность электронных состояний кобальта для d -электронов с проекцией спина «вверх» в окрестности Ферми имеет заметный пик (основной вклад в который вносят электроны $d_{xz,yz}$ симметрии). При этом плотность состояний

ВЛИЯНИЕ СОСТАВА НА СТРУКТУРУ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ПЛЁНОК СИСТЕМЫ Dy-Co

А.С. Русалина^{1*}, Е.В. Кудюков¹, О.А. Аданаква¹, Е.А. Степанова¹, Е.А. Кравцов^{1,2},
В.О. Васьковский^{1,2}

¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

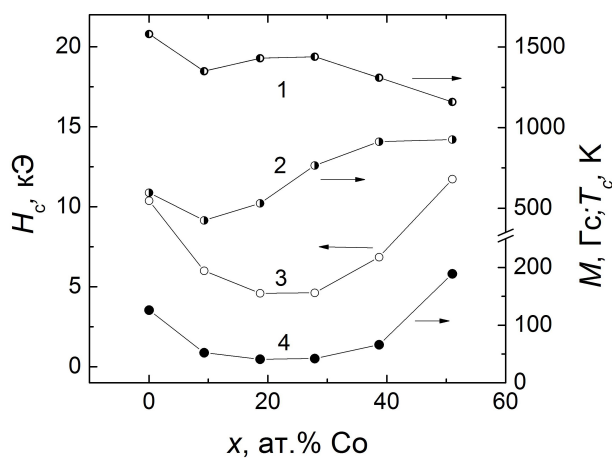
²Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: anastasia.rusalina@urfu.me

Предметом повышенного интереса современной физики магнитных материалов и смежных с ней областей являются малогабаритные элементы со сложной магнитной структурой, в частности с магнитной хиральностью [1,2]. Естественными носителями неколлинеарного магнетизма являются редкоземельные металлы. К их числу относится Dy, который является геликоидальным антиферромагнетиком в широком диапазоне температур. Аморфные системы, содержащие Dy, также представляют интерес, как носители неколлинеарного магнетизма, в частности, те, в состав которых входят металлы группы железа. Настоящая работа посвящена изучению магнетизма тонких плёнок системы Dy-Co.

Исследования проводились на плёнках типа Dy_xCo_{100-x} ($0 \leq x \leq 85$) толщиной 110 ± 10 нм, осаждённых на стеклянные подложки Corning при давлении аргона 10^{-3} мм.рт.ст. и покрытых защитным слоем Ta толщиной 5 нм. Элементный состав образцов определялся с помощью рентгенофлуоресцентного спектрометра Nanohunter с погрешностью 0,1 ат.%, рентгеноструктурная характеристика проведена на дифрактометре Empyrean в излучении $CoK\alpha$, магнитные измерения выполнены на установке MPMS XL-7.

Анализ магнитных свойств проведён раздельно для двух концентрационных областей $0 \leq x \leq 50$ и $50 \leq x \leq 85$. В первой из них Co не несёт магнитного момента, во второй его магнитный момент в расчёте на атом монотонно возрастает с увеличением x . В частности, на рисунке представлены концентрационные зависимости максимальной намагниченности M_s при $H = 70$ кЭ (кривая 1), остаточной намагниченности M_r (кривая 2), коэрцитивного поля H_C (кривая 3) и температуры Кюри T_C (кривая 4) в плёнках $Dy_{100-x}Co_x$ при $x \leq 50$. Их интерпретация выполнена в привязке к структурным изменениям, которые характеризуются переходом от поликристаллического состояния, свойственного Dy, к аморфному состоянию, реализующемуся в плёнках при $x > 20$. В том числе показано, что в данной концентрационной области превалирует асперомагнитная структура. При $x > 50$ она переходит в сперимагнитную структуру, параметры которой также охарактеризованы в работе.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект №19-32-90082\19.

1. A.S. Samardak et.al. NPG Asia Materials 12, 51 (2020).
2. V.V. Tarnavich, D. Lott, S. Mattauch *et al.*, Phys. Rev. B. **89**, 054406 (2014).

ВЛИЯНИЕ АМПЛИТУДЫ ПЕРЕМЕННОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ДИНАМИЧЕСКИЙ ОТКЛИК ФЕРРОЖИДКОСТИ

М.С. Русанов*, В.С. Зверев, Е.А. Елфимова

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: rusanoff.mixail@yandex.ru

Исследование динамического отклика феррожидкости на переменное магнитное поле представляет теоретический интерес. В разбавленных феррожидкостях, где дипольными межчастичными взаимодействиями можно пренебречь, динамическая теория хорошо развита для широкого диапазона амплитуд переменного поля. Однако этого теоретического подхода недостаточно, когда мы имеем дело с высокой концентрацией феррочастиц, где межчастичные взаимодействия играют ключевую роль. Было предпринято множество попыток включить эффекты дипольных взаимодействий для моделирования динамического отклика феррожидкости (например, [1,2]), но полученные результаты применимы только к слабым переменным полям. Однако для ряда случаев знание динамического отклика при высокой амплитуде переменного поля имеет важное значение. Например, при магнитной гипертермии ферро-частицы подвергаются воздействию переменного поля с высокой амплитудой. В данной работе получена зависимость магнитной восприимчивости феррожидкости от частоты в переменном поле с произвольной амплитудой, включая дипольные взаимодействия между феррочастицами.

Феррожидкость моделируется как суспензия сферических равномерно намагниченных частиц. Предполагается, что релаксация магнитных моментов феррочастиц происходит по броуновскому механизму. Вращение магнитного момента описывается распределением плотности вероятности, которая является решением уравнения Фоккера–Планка. Межчастичные дипольные взаимодействия учитываются с помощью дополнительного слагаемого в уравнении Фоккера–Планка. Этот член определяется на основе модифицированной теории среднего поля [2], основанной на классической статистической механике. Он описывает общее магнитное поле, создаваемое всеми магнитными диполями в дополнение к внешнему переменному магнитному полю. Численное решение уравнения Фоккера–Планка осуществляется с помощью конечно-разностной схемы с весом для задач конвекции–диффузии [3]. Плотность вероятности используется для вычисления действительной и мнимой частей восприимчивости. Показано, как спектр восприимчивости зависит от концентрации феррочастиц, амплитуды переменного магнитного поля (рис. 1) и интенсивности межчастичного диполь-дипольного взаимодействия.

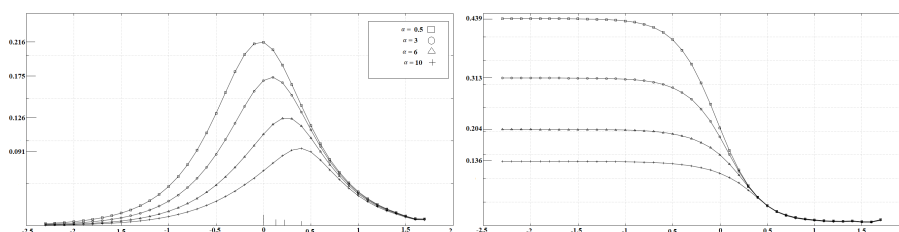


Рис. 1. Действительная χ' (a) и мнимая χ'' (b) часть восприимчивости в зависимости от частоты f переменного поля для различных амплитуд α . Используется логарифмический масштаб.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-02-00358).

1. T.M. Batrudinov, Y.E. Nekhoroshkova *et.al.* Physical Review E **98** 052602 (2018).
2. A.O. Ivanov, V. S. Zverev, S. S. Kantorovich, Soft Matter **12**, 3507 (2016).
3. Н.М. Афанасьева, П.Н. Вабищевич, М.В. Васильева, Известия вузов **57**, 1 (2013).

ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ СТРУКТУРНЫХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА CoNiSn

А.А. Саносян*, В.В. Соколовский, В.Д. Бучельников

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*e-mail: arthursanosyan@mail.ru

Функциональные свойства сплавов Гейслера на основе Co являются перспективными, в частности, при создании постоянных магнитов [1]. Данные сплавы, состоящие из относительно дешевых элементов, могут стать заменой современных постоянных магнитов на редкоземельных элементах, таких как Dy и Nd. В результате это позволит значительно удешевить их себестоимость.

В данной работе рассматриваются сплавы Гейслера $\text{Co}_2\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}_{1-x}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$). Исследования из первых принципов были выполнены в программном пакете VASP [2,3]. Расчеты проводились для 16 атомной суперячейки в приближении GGA-PBE для различных типов кристаллических структур в кубической и тетрагональной фазе. В результате были рассчитаны равновесные состояния для каждой структуры с различным соотношением Ni и Sn. Также рассчитана зависимость энергии кристалла от степени тетрагонального искажения c/a (рис. 1). В качестве кристаллической структуры аустенитной и мартенситной рассматривались пять типов решеток с различным атомным упорядочением (рис. 2).

В ходе расчетов были определены устойчивые кристаллические структуры для каждой из представленных композиций. Рассчитаны равновесные состояния сплавов в зависимости от параметра решетки. Из рис. 1 видно, что в аустенитной фазе преобладает структура #1 с атомным упорядочением, представленным на рис. 2(a), а в мартенсите наиболее выгодной является структура #2 с типом кристаллической структуры, изображенной на рис. 2(b)).

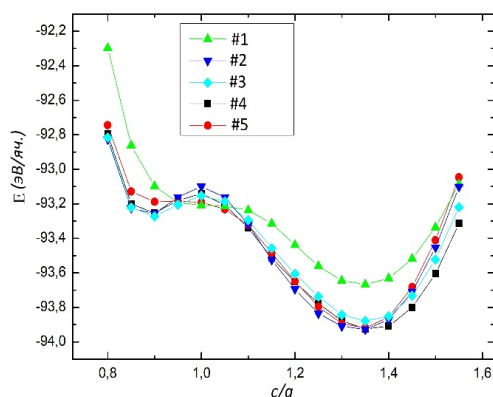


Рис. 1. Зависимость энергии кристалла Co_2NiSn от степени тетрагонального искажения c/a .

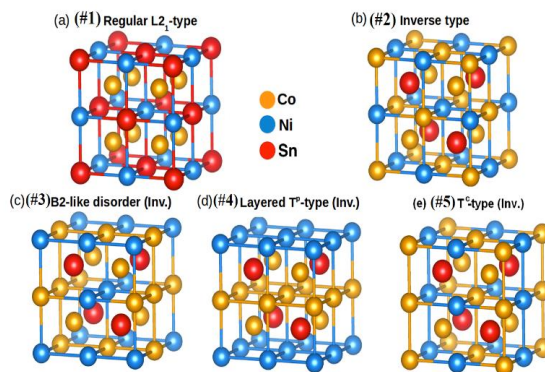


Рис. 2. Типы кристаллических структур.

Исследования выполнены при финансовой поддержке проекта государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации № 075-00250-20-03.

1. A. Planes *et al.*, J.Phys.: Condens. Matter **21**, 233201 (2009).
2. G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
3. G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B **59**, 1758 (1999).

ОПИСАНИЕ НЕЙТРОНОГРАММ ПРИ ЗАМЕЩЕНИИ 3d-ИОНОВ В ОЛИВИН СТРУКТУРЕ

М.А. Сёмкин^{1,2*}, Н.В. Урусова³, А. Хосер⁴, А.Н. Пирогов^{1,2}¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия²Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия³Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия⁴Берлинский центр материалов и энергии имени Гельмгольца, Берлин, Германия

*e-mail: semkin@imp.uran.ru

Соединения LiTPO_4 (T – 3d-ион) интересны для исследования как с практической, так и с фундаментальной точки зрения. Во-первых, это прикладные материалы катодных элементов литий-ионных батарей, во-вторых, они обладают магнитными и магнитоэлектрическими свойствами, для которых важно знать их структурное состояние [1]. Цель работы: рассмотреть варианты распределения Ni и Co в оливин структуре $\text{LiNi}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{PO}_4$.

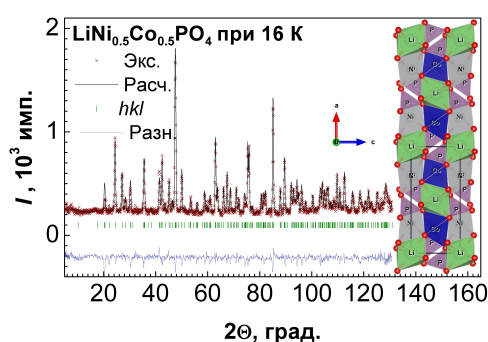


Рис. 1. Экспериментальная (точки) и расчетная (линия) нейтронограммы $\text{LiNi}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{PO}_4$ при 16 К, разность между ними (линия внизу) и угловые положения ядерных рефлексов (вертикальные штрихи). На вставке показана кристаллическая структура в проекции на плоскость для модели распределения 3d-ионов Ni-Co-Ni-Co (красным обозначены атомы кислорода).

Кристаллическая структура LiTPO_4 описывается пространственной группой $Pnma$. Ионы Li занимают позицию 4a с координатами (0; 0; 0), ионы T и P занимают позиции 4c (x ; 0.25; z), а ионы O расположены в двух узлах 4 и позиции 8d (x ; y ; z).

Поликристаллический образец $\text{LiNi}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{PO}_4$ был получен глицерин-нитратным методом синтеза. На порошковом дифрактометре высокого разрешения E9 FIREPOD (г. Берлин, Германия) измерены нейтронограммы этого соединения в диапазоне температур от 7 до 16 К. Благодаря тому, что амплитуды когерентного рассеяния нейтронов ядрами кобальта примерно в четыре раза меньше $b_{\text{Co}} = 0.249 \cdot 10^{-12}$ см, чем ионами никеля $b_{\text{Ni}} = 1.03 \cdot 10^{-12}$ см, нам удалось рассмотреть три варианта взаимного распределения ионов никеля и кобальта (Ni-Ni-Co-Co; Ni-Co-Ni-Co; Ni-Co-Co-Ni) в позиции 4c с координатами (при температуре 16 К): 1: (0.2759; 0.25; 0.9834), 2: (0.7759; 0.25; 0.5166), 3: (0.7241; 0.75; 0.0166) и 4: (0.2241; 0.75; 0.4834).

Наилучшее согласие экспериментальных данных достигается для конфигурации Ni-Co-Ni-Co, соответствующая экспериментальная и расчетная нейтронограммы приведены на рис. 1. Видно, что все структурные рефлекссы нейтронограммы $\text{LiNi}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{PO}_4$ хорошо описываются (фактор $\chi^2 = 2.5\%$). Ионы никеля образуют плоскости ab , чередующиеся с плоскостями кобальта в направлении кристаллографической оси c структуры (см. вставку на рис. 1). Для остальных моделей распределения 3d-ионов в оливин-структуре на расчетных нейтронограммах наблюдаются дополнительные сверхструктурные пики, которых нет на эксперименте.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-60011.

1. N.V. Urusova, M.A. Semkin *et al.*, J. All. Comp. **781**, 581 (2019).

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА АНСАМБЛЯ НЕПОДВИЖНЫХ СУПЕРПАРАМАГНИТНЫХ ФЕРРОЧАСТИЦ

С.А. Сокольский*, А.Ю. Соловьева, Е.А. Елфимова

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: sokolksy2304@gmail.com

В данной работе было исследовано влияние диполь–дипольного межчастичного взаимодействия на термодинамические и магнитные свойства ансамбля неподвижных монодисперсных суперпарамагнитных частиц, расположенных в узлах простой кубической решетки. В рамках исследования был рассмотрен случай с неелевским механизмом вращения магнитного момента. Рассмотрено два варианта направлений лёгких осей намагничивания: параллельно и перпендикулярно направлению внешнего магнитного поля. Для теоретического описания данной модели использовалось разложение свободной энергии Гельмгольца в классический вириальный ряд с точностью до второго вириального коэффициента. Полученное аналитическое выражение свободной энергии Гельмгольца позволило дополнительно исследовать статическую намагниченность и начальную магнитную восприимчивость. Для определения области применимости построенной теории было проведено компьютерное моделирование модельной системы методом Монте–Карло. Оказалось, что даже в отсутствие внешнего магнитного поля при определенных параметрах наблюдалось упорядочение магнитных моментов частиц в антипараллельные цепи, которые прорастали в ячейке моделирования вдоль направления осей анизотропии. Такое структурирование магнитных моментов вело к резкому снижению начальной магнитной восприимчивости системы. В рамках исследования удалось точно определить область режимных параметров системы, при которых начинал проявляться данный эффект. Построенная теория оказалась способной описать магнитный отклик системы только в той области параметров, где не наблюдалось спонтанного упорядочения магнитных моментов. Полученные результаты о поведении модельной системы могут быть использованы при разработке магнитных материалов с контролируемыми свойствами.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-02-00358).

1. A.Y. Solovyova, A.A. Kuznetsov, E.A. Elfimova, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **558**, 124923 (2020).

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ И СПИНОВАЯ СТРУКТУРА НИЗКОРАЗМЕРНОГО ФРУСТРИРОВАННОГО МАГНЕТИКА $\text{Li}_2\text{MnTeO}_6$, ОПРЕДЕЛЁННАЯ МЕТОДОМ НЕЙТРОННОЙ ПОРОШКОВОЙ ДИФРАКЦИИ

А.Е. Суслопарова^{1*}, А.И. Курбаков¹, В.Ю. Помякушин²

¹Петербургский институт ядерной физики, Гатчина, Россия

²Laboratory for Neutron Scattering and Imaging LNS, Paul Scherrer Institut, Switzerland

*e-mail: susloparova_ae@npi.nrcki.ru

Исследовательский интерес к низкоразмерным фрустрированным магнетикам обусловлен несколькими причинами, одна из которых — нарушение теоремы Мермина–Вагнера, из-за чего установление дальнего магнитного порядка в таких системах становится затруднительным [1]. В частности, в новом структурном семействе A_2MnTeO_6 (A — одновалентный металл), которому принадлежит $\text{Li}_2\text{MnTeO}_6$, возможно возникновение новых квантовых явлений при низких температурах. Например, магнитная восприимчивость не проявляет никаких аномалий, указывающих на возникновение дальнего магнитного упорядочения в слабом магнитном поле, но высокотемпературная область описывается законом Кюри–Вейсса с $\Theta_W = -51$ К.

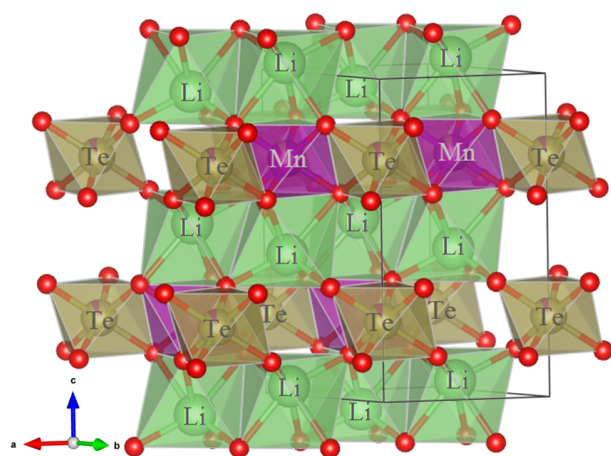


Рис. 1. Схема кристаллической структуры $\text{Li}_2\text{MnTeO}_6$. Красные, зеленые, коричневые и фиолетовые шары — ионы кислорода, лития, теллура и марганца соответственно.

Для определения спиновой структуры в упорядоченном состоянии и её температурной эволюции были проведены нейтронные исследования на порошковом дифрактометре DMC, PSI, Швейцария. В результате профильного анализа была построена модель спинового состояния при температуре ниже температуры Нееля $T_N = 6$ К, которая описывается соизмеримым вектором распространения $\mathbf{k} = (1/3 \ 1/3 \ 0)$ [2].

При этом предполагается, что обменное взаимодействие между соседними магнитными слоями значительно меньше, чем взаимодействия внутри слоев, что соответствует низкоразмерной природе исследуемого объекта.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 18-12-00375.

1. V.B. Nalbandyan, I.L. Shukaev *et al.* *Inorg. Chem.*, **58**, 5524 (2019).
2. E.A. Zvereva *et al.*, *Physical Review B* **102**, 094433 (2020).

Кроме того, кристаллическая структура образца обеспечивает условия, которые необходимы для возникновения фрустрированных взаимодействий в магнитной подсистеме. $\text{Li}_2\text{MnTeO}_6$ кристаллизуется в пространственную группу $P\bar{3}1c$, где катионы Mn^{4+} и Te^{6+} образуют сотовые слои, которые чередуются с немагнитными слоями, состоящими из катионов Li^+ , схема кристаллической структуры представлена на рис. 1. Каждый отдельный слой $(\text{MnTeO}_6)^{2-}$ упорядочен так, что магнитные ионы Mn^{4+} образуют треугольную сеть, что в присутствии антиферромагнитного типа упорядочения ионов марганца делает систему фрустрированной, в которой становится возможной реализация слабого супер-суперобмена Mn–O–Te–O–Mn.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТРЕХСЛОЙНОЙ МАГНИТОТВЕРДОЙ/МАГНИТОМЯГКОЙ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ

Т.А. Тааев*, К.Ш. Хизриев, А.К. Муртазаев

¹Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

²Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

*e-mail: taaev89@mail.ru

Магнитные многослойные структуры, состоящие из чередующихся магнитотвердых и магнитомягких слоев, представляют собой уникальные системы и вызывают большой интерес у исследователей. Они открывают возможность для увеличения энергетического произведения $(BH)_{\max}$, и в них возникает ряд необычных явлений, таких как формирование во внешнем магнитном поле одномерной гетерофазной спиновой пружины [1].

Для исследования трехслойной магнитотвердой/магнитомягкой гетероструктуры была использована модель [2-6], обобщающая стандартную XY-модель. Магнитные моменты атомов магнитомягкого и магнитотвердого слоев расположены в узлах простой кубической решетки.

Гамильтониан модели был представлен в виде

$$H = -\frac{1}{2} \sum J(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) - \sum K(S_i^x)^2 - g\mu_B \sum (H_0^x S_i^x + H_0^y S_i^y),$$

где первая сумма учитывает обменное взаимодействие каждого магнитного атома с ближайшими соседями внутри слоев с обменами $J = J_{\text{hard}}$ и $J = J_{\text{soft}}$ в магнитотвердом и магнитомягком слоях, а также межслойное взаимодействие с параметром $J = J_{\text{int}}$; вторая сумма учитывает вклад анизотропии в энергию системы, $K = K_{\text{hard}}$ и $K = K_{\text{soft}}$ — константы анизотропии магнитотвердого и магнитомягкого слоев; третья сумма — вклад внешнего магнитного поля в энергию системы, $g \approx 2$ — фактор Ланде, μ_B — магнетон Бора, $H_0^{x,y}$ — проекции внешнего магнитного поля \mathbf{H}_0 , $S_i^{x,y}$ — проекции спина \mathbf{S}_i , локализованного на узле i , $|\mathbf{S}_i| = 1$.

Расчеты проводились стандартным алгоритмом Метрополиса метода Монте-Карло для систем с линейными размерами $Lx \times Ly \times Lz$ при температуре T намного ниже T_c [2]. Линейные размеры системы были фиксированы ($Lx = Ly = 50$; $Lz = 100$).

Рассматривались две системы:

1. hard/soft/hard — толщина каждого магнитотвердого слоя принимала значение 25 атомных монослоев, а магнитомягкого – 50 монослоев.
2. soft/hard/soft — толщина магнитотвердого слоя принимала значение 50 атомных монослоев, а каждого магнитомягкого – 25 монослоев.

Мы провели исследование модели трехслойной магнитотвердой/магнитомягкой гетероструктуры. Изучили влияние увеличения многослойности структуры на магнитные и термодинамические свойства данной магнитной гетероструктуры. Провели сравнение полученных результатов с результатами для двухслойной модели [2-6]. Увеличение многослойности системы при сохранении толщины магнитотвердого и магнитомягкого слоев приводит к улучшению магнито жестких свойств модели.

1. E.E. Fullerton, J.S. Jiang, M. Grimsditch *et al.*, Phys. Rev. B. **58**, 12193 (1998).
2. Т.А. Тааев, К.Ш. Хизриев, А.К. Муртазаев, ЖЭТФ **149**, 1022 (2016).
3. Т.А. Тааев, К.Ш. Хизриев, А.К. Муртазаев, ЖЭТФ **151**, 1084 (2017).
4. Т.А. Тааев, К.Ш. Хизриев, А.К. Муртазаев, J. Alloys and Comp. **785**, 1253 (2019).
5. Т.А. Тааев, К.Ш. Хизриев, А.К. Муртазаев, ЖЭТФ **156**, 331 (2019).
6. Т.А. Тааев, К.Ш. Хизриев, А.К. Муртазаев, ФТТ **6**, 846 (2020).

ПОИСК ФАЗЫ $L1_0$ В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ Fe – NiМ.Н. Ульянов^{1,2,3*}, С.В. Таскаев^{1,2}, М.А. Гаврилова¹, М.Ю. Богуш¹, Д.В. Гундеров^{4,5}¹Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия²Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия³Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия⁴Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфа, Россия⁵Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа, Россия

*e-mail: max-39@yandex.ru

В результате интенсивной пластической деформации (ИПД) наноструктурные материалы содержат высокую концентрацию дефектов. Дефекты структуры могут привести к резкому увеличению подвижности атомов внутри вещества и ускорению процесса диффузии атомов, что в свою очередь может привести к формированию новых, неизвестных до этого фаз. Примером таких фаз является фаза тетратенита $L1_0$, наблюдаемая в некоторых металлических и каменных метеоритах [1-2]. Фаза $L1_0$ появляется в результате химического упорядочения атомов железа и никеля в соотношении 50:50, но возможно небольшое отклонение от стехиометрии. В силу медленной скорости диффузии атомов синтез этой фазы в земных условиях практически невозможен. Тем не менее, были найдены условия, в которых этот процесс происходит значительно быстрее [3-5].

В нашей работе мы сообщаем о попытках синтеза фазы $L1_0$ в сплавах Fe–Ni, легированных 3d металлами. Для значительного ускорения кинетики образования фазы $L1_0$ была применена ИПД кручением под высоким давлением (КВД) и последующий низкотемпературный отжиг. В результате КВД было обнаружено небольшое уменьшение (до 10%) намагниченности насыщения M_S для систем Fe₅₀Ni₅₀, Fe-Ni-Ti, Fe-Ni-Al, вызванное увеличением концентрации дефектов после ИПД. Также было обнаружено уменьшение коэрцитивной силы пластически деформированных образцов более чем на порядок по сравнению с литыми образцами. Такое поведение, скорее всего, указывает на образование суперпарамагнитных кластеров внутри пластически деформированного материала. Низкотемпературный отжиг при $T = 300^\circ\text{C}$ в течение времени $t = 1300$ часов приводит к увеличению M_S на 3-10% и снижению коэрцитивной силы для разных композиций относительно деформированных неотожженных образцов до 5 – 10%. Вероятно, такие изменения возможны за счет получения более совершенной структуры при отжиге — уменьшения количества дислокаций, неравновесных вакансий, увеличения степени упорядочения. Однако, говорить об образовании даже небольшого количества фазы $L1_0$ преждевременно. Требуются дополнительные исследования.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №19-72-00047 и программы повышения конкурентоспособности БФУ им. И. Канта (5-100).

1. J. Petersen, M. Avdin and J.M. Knudsen, Phys. Lett. A **62**, 192 (1977).
2. J.T. Wasson, Geochim. Cosmochim. Acta **75**, 1757(2011).
3. L. Neel, J. Pauleve, R. Pauthenet, J. Laugier, and D. Dautreppe, J. Appl. Phys. **35**, 873 (1964).
4. S. Lee, K. Edalati, H. Iwaoka, Z. Horita, T. Ohtsuki, T. Ohkochi, M. Kotsugi, T. Kojima, M. Mizuguchi, K. Takanashi, Philosophical Magazine Letters **94:10**, 639-646 (2014).
5. P. Manchanda, R. Skomski, N. Bordeaux, L.H. Lewis, and A. Kashyap, Journal of Applied Physics **115**, 17A710 (2014).

МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ И СТЕКЛООБРАЗУЮЩАЯ СПОСОБНОСТЬ
В ОБЪЕМНО-АМОРФНЫХ СПЛАВАХ Gd – Sc – Co – Ni – AlС.А. Упоров^{1,2}, Н.С. Упорова^{3*}, Р.Е. Рыльцев^{1,2}, В.А. Быков^{1,2}, С.Х. Эстемирова¹,
Н.М. Щелкачев^{2,4}¹Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия²Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия³Институт геологии и геохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия⁴Институт высоких давлений РАН, Троицк, Россия*e-mail: NUporova84@gmail.com

Магнитное охлаждение на основе магнитокалорического эффекта (МКЭ) является многообещающей альтернативой сжатию пара, лежащей в основе традиционных холодильных систем [1]. Важной задачей в этой области является поиск новых хладагентов с улучшенными магнитокалорическими характеристиками. Недавние исследования показали, что аморфные сплавы на основе Gd являются привлекательными кандидатами для этих целей [2].

Новые сплавы Gd–Sc–Co–Ni–Al были изготовлены из чистых металлов дуговой плавкой в атмосфере проточного гелия, методом вакуумной отливки в виде стержня диаметром 3 мм и длиной 50 мм. Структура приготовленных образцов проверена методом рентгеновской дифракции (XRD) при комнатной температуре. Для изучения стеклования в образцах Gd–Sc–Co–Ni–Al исследована структура как литых, так и закаленных образцов. Закаленные стержни диаметром 3 мм демонстрируют полностью стекловидную структуру. В случае литых слитков дифракция рентгеновских лучей выявляет широкий ореол с крошечными пиками Брэгга, которые указывают на присутствие небольшого количества кристаллической фазы. По нашим оценкам, процент кристаллитов в слитках составляет менее 5% для каждого отлитого образца, что говорит о превосходной стеклообразующей способности (GFA).

Проведено сканирование стеклообразных стержней методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) в широком диапазоне температур путем измерения теплового сигнала при нагревании и охлаждении. Полученные термические кривые демонстрируют четкое стеклование, за которым следует один или несколько пиков экзотермической кристаллизации, в зависимости от химического состава сплава. По ДСК–кривым определены тепловые параметры стекол.

Магнитные измерения показывают, что выше точек Кюри все образцы являются парамагнетиками. Измеренная намагниченность при приложенном магнитном поле 100 Э показывает, что все стекла представляют собой сверхмягкие ферромагнитные материалы, коэрцитивная сила которых при 4 К не превышает 10 Э. Рассчитанные магнитокалорические параметры для стекол, демонстрируют превосходные характеристики, в том числе отличную относительную мощность охлаждения (RCP), которая значительно лучше, чем у стекол на основе Gd с аналогичным химическим составом.

Можно заключить, что исследованные объемно-аморфные сплавы Gd–Sc–Co–Ni–Al являются более эффективными хладагентами по сравнению с аналогичными системами стекол. Кроме того, новые металлические стекла демонстрируют улучшенную GFA.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ № 18-03-00626 и темой государственного задания ИГТ УрО РАН 0316-2019-0004.

1. V.K. Pecharsky, J. Cui, D.D. Johnson, Phil. Trans. Math. Phys. Eng. Sci. **374**, 20150305 (2016).
2. D. Shishkin, A. Gazizov, A. Volegov, V. Gaviko, N. Baranov, J. Non-Cryst. Solids **478**, 12 (2017).

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ В ПОСТОЯННЫХ МАГНИТАХ СИСТЕМ Nd – Fe – В и Sm – Co

А.Н. Уржумцев^{1*}, В.Е. Мальцева¹, М.К. Шарин², Д.В. Таранов², А.С. Вологов¹

¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

²ООО «ПОЗ — Прогресс», Верхняя Пышма, Россия

*e-mail: andrei.urzhumtsev@urfu.ru

Коэрцитивная сила H_c является одним из ключевых параметров для реализации потенциала ферромагнитного материала в роли постоянного магнита (ПМ). Модели процессов перемагничивания в высокоанизотропных магнетиках рассматриваются еще с начала XX века, начиная с работ Кондорского, Керстена, Стонера и Вольфарта и др. [1].

В литературе, как правило, для ПМ рассматриваются только две причины гистерезиса, задержка образования зародыша перемагничивания для системы Nd – Fe – В и задержка смещения доменной границы для Sm – Co. Разные механизмы связаны с качественно различным поведением $H_c(\theta)$ как функции от угла θ между приложенным полем и осью текстуры магнита. Зародышеобразование может быть описано как механизм когерентного вращения вектора намагниченности $H_c(\theta) \sim (\cos^{2/3} \theta + \sin^{2/3} \theta)^{3/2}$. В случае пиннинга зависимость описывается формулой (правило Кондорского) $H_c(\theta) \sim (1/\cos \theta)$.

Измерения зависимостей $H_c(\theta)$ и релаксационной $H_r(\theta)$ проводились на вибрационном магнитометре с ориентацией оси текстуры образца относительно магнитного поля.

В процессе изучения $H_c(\theta)$ спеченных металлокерамических ПМ Nd – Fe – В и Sm – Co, а также порошка марки MQA, полученного методом HDDR (Hydrogenation–Decomposition–Desorption–Recombination — гидрирование–разложение–десорбция–рекомбинация) показано, что в небольших углах, в пределах от 0 до 40 – 45°, для ПМ Sm – Co между приложенным полем и осью текстуры величина H_c монотонно снижается, что хорошо согласуется с моделью Кондорского и многими статьями [2], и перемагничивание осуществляется за счет задержки смещения доменных стенок. При углах $\theta > 50^\circ$ характер зависимостей $H_c(\theta)$ существенно меняется, и не может быть описан ни в рамках модели Кондорского, ни в рамках модели Стонера – Вольфарта. Механизм перемагничивания носит гораздо более сложный характер, чем дает суперпозиция рассматриваемых моделей в аналитическом представлении по формуле

$$H_c(\theta) \sim A \times (\cos^{2/3} \theta + \sin^{2/3} \theta)^{3/2} + B \times (1/\cos \theta) \quad (1)$$

где A и B — весовые коэффициенты, позволяющие моделировать парадокс Брауна. В случае некоторых ПМ системы Sm–Co характер зависимости $H_c(\theta)$ качественно схож с таковым для Nd–Fe–В. Как показывают результаты наших исследований в реальных ПМ, произведенных в Китае, на ООО «ПОЗ — Прогресс» и УрФУ, процессы их перемагничивания не могут быть полностью описаны в рамках существующих моделей. Это объясняется тем, что в любом образце существует распределение по размерам кристаллитов, вариация типов их окружений и стыков, несовершенство текстуры, локальные вариации значения констант магнитокристаллической анизотропии. Учёт указанных причин показывает, что в условиях локальных дефектов, процессам перемагничивания порой энергетически более выгодно проходить по другому механизму, нежели предсказанному моделью для данного материала, в приближении идеальной структуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФИ № 20-32-90211.

1. E.C. Stoner, E.W. Wohlfarth, Phil. Trans. R. Soc. London **240**, 599 (1948).
2. O. Gutfleisch, Acta Materialia **54**, 997 (2006).

ПРИМЕНЕНИЕ МАГНИТОРЕЗИСТИВНОГО ИНДИКАТОРА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МАГНИТОСТРИКЦИИ ТОНКИХ ПЛЁНОК

А.А. Фещенко^{1*}, Е.В. Кудюков¹, В.Н. Лепаловский¹, К.Г. Балымов¹, В.О. Васьковский^{1,2}

¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

²Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: asynickname@mail.ru

Одним из фундаментальных свойств магнитоупорядоченных веществ является магнитострикция. Характеристики магнитострикционных материалов широко изучены в массивном состоянии [1]. Однако, в тонкопленочном состоянии (~ 100 нм) измерение магнитострикционных свойств представляет собой нетривиальную задачу из-за невозможности применения прямых методов. Для преодоления соответствующих экспериментальных трудностей может быть использован эффект анизотропии магнитосопротивления, который даёт косвенную информацию о магнитном состоянии деформируемого образца и, соответственно, о его магнитоупругих свойствах [2]. Однако, не все материалы обладают данным эффектом. В таком случае можно применить вспомогательный слой с низкой магнитострикцией и большой анизотропией магнитосопротивления — магниторезистивный индикатор, который наносится на поверхность основной плёнки. Данная работа посвящена изучению возможности реализации этой идеи с применением индикаторного слоя пермаллоя.

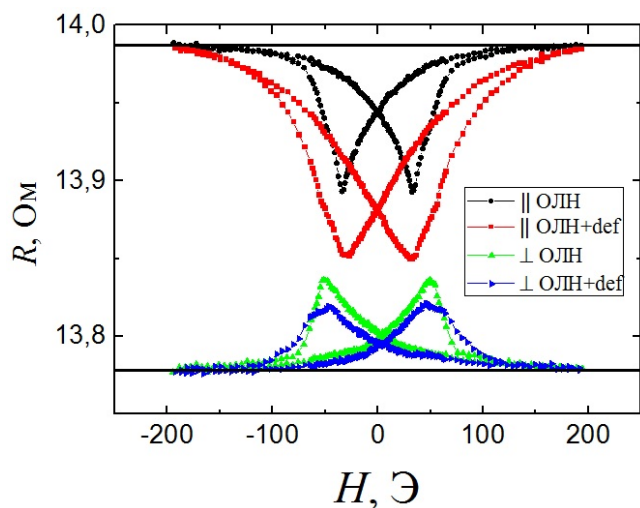


Рис. 1. Магниторезистивные петли пленки $\text{Fe}_{40}\text{Co}_{60}/\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$ толщиной каждого слоя 40 нм

люют возможность регистрации деформационных изменений магнитной структуры на качественном уровне. В работе также выполнен их количественный анализ.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 18-72-10044.

1. R. Grössinger, R.S. Turtelli, N Mehmood, IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – IOP Publishing **60**, №1, 012002 (2014).
2. А.А. Фещенко, Е.В. Кудюков, К.Г. Балымов. Материалы конференции ВНКСФ-26, 104, (2020).

Исследования выполнены на пленках $\text{Fe}_{40}\text{Co}_{60}$ и $\text{Fe}_{86}\text{Al}_{14}$ толщиной 40 и 80 нм. Толщина индикаторного слоя $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$ составляла 40 нм. Плёнки получены методом высокочастотного ионно-плазменного распыления. Деформация исследуемых образцов осуществлялась путем цилиндрического изгиба. Величина стрелы прогиба δ – составляла 100 мкм. Согласно методике, описанной в [2], магнитное поле направлялось параллельно и перпендикулярно току, который был направлен вдоль оси легкого намагничивания (ОЛН) пленки.

На рис. 1 в качестве примера приведены магниторезистивные кривые пленки $\text{Fe}_{40}\text{Co}_{60}/\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$ в исходном и деформированном (def) состояниях. Они демонстриру-

ТЕПЛОВЫЕ, МАГНИТНЫЕ И МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{28}\text{Ga}_{22-x}(\text{Cu}, \text{Zn})_x$ ($x = 0; 1.5$)

Ш.К. Хизриев^{1*}, А.Г. Гамзатов¹, А.Б. Батдалов¹, А.М. Алиев¹, I.S. Abdolhosseini², P. Kameli²,
A. Ghotbi²

¹Институт физики им. Х.И. Амирханова ДНЦ РАН, Махачкала, Россия

²Исфаханский технологический университет, Исфахан, Иран

*e-mail: Shakhban1994@gmail.com

В последние годы появление новых типов материалов с гигантским магнитокалорическим эффектом в значительной степени способствовало развитию технологии магнитного охлаждения при комнатной температуре. Среди таких материалов сплавы Гейслера Ni-Mn-Z ($Z = \text{In}, \text{Sn}, \text{Sb}$ и Ga) вызывают особый интерес, как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения, особенно те сплавы, которые не содержат дорогостоящих редкоземельных элементов [1,2]. Благодаря совмещенным магнитным и магнитоструктурным фазовым переходам в этих материалах наблюдаются гигантские значения магнитокалорического эффекта (МКЭ), которые обусловлены не только изменением в магнитной подсистеме, но и вкладом решетки [3].

В данной работе приводятся результаты экспериментального исследования магнитных, магнитокалорических и теплофизических свойств системы $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{28}\text{Ga}_{22-x}\text{A}_x$ (где $x = 0, 1.5$; $\text{A} = \text{Zn}, \text{Cu}$).

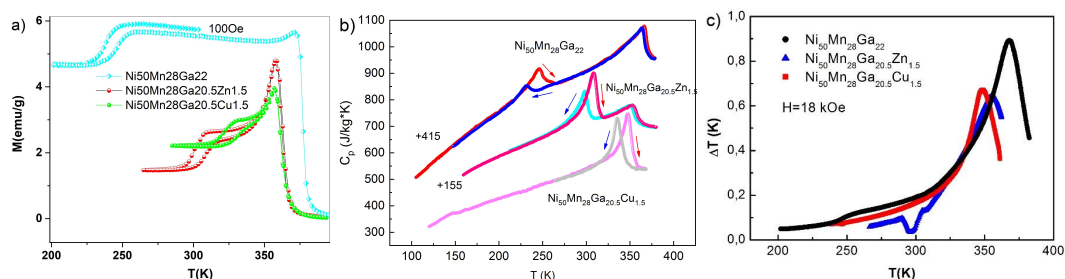


Рис. 1. а) Температурные зависимости намагниченности в сплавах $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{28}\text{Ga}_{22-x}\text{A}_x$ ($x = 0, 1.5$; $\text{A} = \text{Cu}, \text{Zn}$) при $H = 100$ Э. б) Температурные зависимости теплоемкости в нулевом магнитном поле. в) Температурные зависимости МКЭ в магнитном поле 18 кЭ.

На рис. 1(а) приведена зависимость намагниченности от температуры при $H = 100$ Э. Как видно на зависимости $M(T)$ небольшое замещение атомов Ga атомами Zn и Cu вызывает значительный рост температуры структурных превращений и уменьшение T_C , что характерно для системы Ni-Mn-Ga [3]. На рис. 1(б) представлены температурные зависимости теплоемкости в нулевом магнитном поле в режиме нагрева и охлаждения. Как видим, вблизи магнитоструктурного переходов зависимость $C_p(T)$ сопровождается характерным широким гистерезисом. Наблюдаемые аномалии на зависимости $C_p(T)$ хорошо коррелируют с данными $M(T)$ (рис. 1а). На рис. 1(с) представлены результаты прямых измерений МКЭ в магнитном поле 18 кЭ в режиме нагрева. Максимальная величина МКЭ наблюдается для исходного состава $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{28}\text{Ga}_{22}$ и равна $\Delta T_{\text{max}} \approx 0.9$ К.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 20-38-90230.

1. А.Н.Васильев, В.Д. Бучельников, и др., УФН **173**, 577 (2003).
2. Z. Zhong, S. Ma, D. Wang, Y. Du, Journal of Mat. Science & Tech. **28**, 193 (2012)
3. А.М. Алиев, А.В. Батдалов, L.N. Khanov, et al, JALCOM. **676**, 601 (2016).

ПРЯМОЙ И ОБРАТНЫЙ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В ЛЕНТОЧНОМ ОБРАЗЦЕ СПЛАВА ГЕЙСЛЕРА $\text{Ni}_{45}\text{Co}_5\text{Mn}_{31}\text{Al}_{19}$

Ш.К. Хизриев*, А.Г. Гамзатов, А.М. Алиев

Институт физики им. Х.И. Амирханова ДНЦ РАН, Махачкала, Россия

*e-mail: Shakhban1994@gmail.com

Сплавы Гейслера Ni-Mn-(Sn, Al) являются яркими представителями материалов с гигантскими значениями магнитокалорического эффекта (МКЭ), демонстрирующими как прямой, так и обратный МКЭ. Обратный эффект вызван структурным превращением мартенсит-аустенит, а прямой эффект связан с фазовым переходом (ФП) ферромагнетик-парамагнетик (ФМ-ПМ). Частичное замещение атомов Ni атомами Co в сплавах Ni-Mn-(Sn, Al) приводит к значительному увеличению изменения намагниченности M при переходе мартенсит-аустенит. Температура структурного перехода снижается, в то время как температура ФП ФМ-ПМ, T_C , значительно увеличивается с увеличением концентрации Co [1]. Таким образом, замена Ni на Co может значительно улучшить обменные взаимодействия в сплавах [1]. По сравнению с объемными образцами того же состава, ленточные образцы обладают другой кристаллической структурой и магнитными свойствами. Температура структурного превращения в ленточных сплавах $\text{Ni}_{50-x}\text{Co}_x\text{Mn}_{31}\text{Al}_{19}$ ($x = 5, 10$) значительно ниже, чем у массивных сплавов, что приводит к различию в магнитных ФП [1].

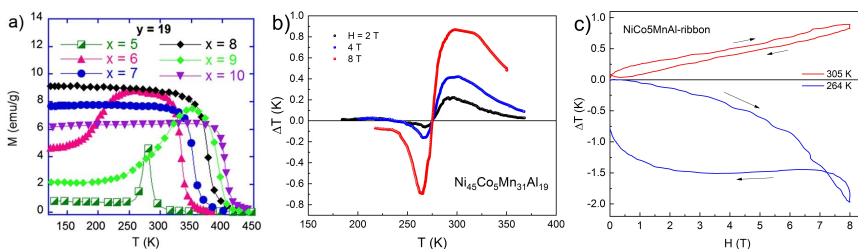


Рис. 1. а) Зависимости $M(T)$ для $\text{Ni}_{50-x}\text{Co}_x\text{Mn}_{31}\text{Al}_{19}$ ($x = 5 - 10$) при $H = 100$ Ое. б) Зависимость $\Delta T(T)$ для $\text{Ni}_{45}\text{Co}_5\text{Mn}_{31}\text{Al}_{19}$ в полях 2, 4 и 8 Тл, в) Зависимость $\Delta T(H)$ для $T = 264$ и 305 К.

В данной работе приводятся результаты экспериментального исследования магнитных и магнитокалорических свойств ленточного образца $\text{Ni}_{45}\text{Co}_5\text{Mn}_{31}\text{Al}_{19}$. На рис. 1(а) приведены зависимости $M(T)$ при $H = 100$ Э. Как видим, T_C увеличивается

с 291 К до 408 К при увеличении концентрации Co с 5% до 10%. ФП мартенсит-аустенит исчезает при концентрациях $\text{Co} \geq 7\%$, за исключением образца с $x = 9$. На рис. 1(б) представлены температурные зависимости МКЭ, измеренные прямым методом в циклических полях 2, 4 и 8 Тл. В циклическом поле 8 Тл величины прямого и обратного эффектов примерно совпадают по абсолютной величине и равны ~ 0.8 К. На рис. 1(в) представлена полевая зависимость МКЭ, полученная при разовом включении магнитного поля при температурах 264 К и 305 К, соответственно, вблизи магнитоструктурного и магнитного ФП. Вблизи T_C полевая зависимость вплоть до 8 Тл носит линейный характер, что не характерно для магнитных ФП. Вблизи магнитоструктурного превращения ($T = 264$ К) наблюдается необратимый ФП.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №20-38-90230, а также при финансовой поддержке гранта РНФ № 18-12-00415.

1. К.Х. Нау, V. M. Quang *et.al*, Journal of Electronic materials **48**, 6540 (2019).

ВРЕМЕННЫЕ И ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ РЕЗОНАНСНЫЕ ЯВЛЕНИЯ СПИНОВЫХ ВОЛН В МАГНИТНЫХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МИКРОДИСКАХ, ВОЗБУЖДАЕМЫХ УЛЬТРАКОРОТКИМИ ВЫСОКОЧАСТОТНЫМИ ЛАЗЕРНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ

А.Е. Храмова^{1,2*}, И.В. Савочкин^{1,2}, М. Кокецки³, М.А. Кожяев^{1,4}, А.Н. Шапошников⁵,
В.Н. Бержанский⁵, А.К. Звездин^{1,4}, Д.Р. Яковлев⁵, М. Баер³, В.И. Белотелов^{1,2}

¹Российский Квантовый Центр, Москва, Россия

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

³Дортмундский Технологический Университет, Дортмунд, Германия

⁴Институт общей физики им. А.М. Прохорова, Москва, Россия

⁵Крымский Федеральный Университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Россия

*e-mail: ae.khramova@gmail.com

В настоящее время большое значение имеют исследования в области магноники. Практическое применение спиновых волн быстро развивается как альтернатива существующим методам передачи цифровой информации [1].

В данной работе мы демонстрируем взаимосвязь между двумя резонансными особенностями распространения спиновых волн в висмутзамещенных гранатовых микродисках $(\text{BiLuGdEu})_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$, возбуждаемых сверхбыстрыми лазерными импульсами. Оптическое возбуждение спиновых волн происходило с частотой, сопоставимой с собственной частотой прецессии намагниченности, что позволяло резонансно увеличивать амплитуду прецессии намагниченности. В дисках диаметром 300 мкм была обнаружена интерференция спиновых волн от краев (рис. 1а). В этих дисках возбуждались преимущественно обратные магнитостатические волны. При уменьшении диаметра дисков возбуждались моды различных типов (BMVSW и MSSW) за счет большей локализации электромагнитной энергии в небольших дисках (рис. 1б, рис. 1в) [2,3]. Было продемонстрировано двукратное усиление амплитуд некоторых первых магнитостатических мод с частотой, близкой к частоте пучка накачки, по сравнению с другими модами (рис. 1б).

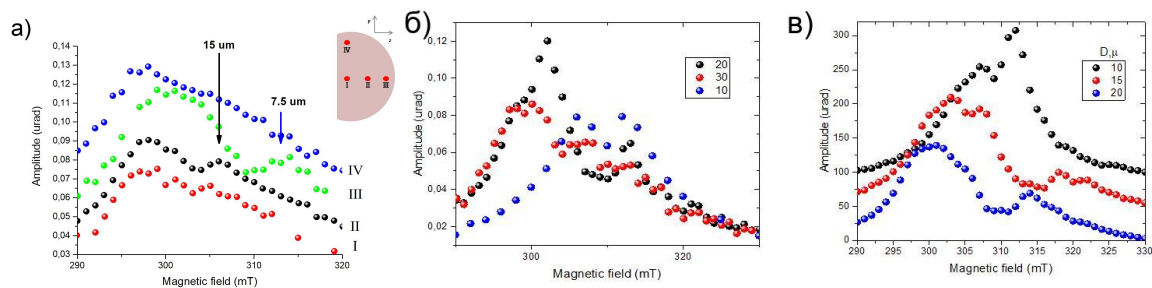


Рис. 1. а) Зависимости амплитуды прецессии намагниченности от приложенного магнитного поля для диска 300 мкм при четырех положениях луча накачки; б) зависимость амплитуды прецессии намагниченности от магнитного поля для дисков 10 мкм, 20 мкм и 30 мкм; в) микромагнитное моделирование зависимости амплитуды прецессии намагниченности от магнитного поля для дисков 20, 15 и 10 мкм.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ (20-52-27 12047) и Фонда «Базис» (18-2-6-202-1).

1. M. Gündoğan, P.M. Ledingham *et al.*, Phys. Rev. Lett. **114** (2015)
2. E.R. Edwards, M. Buchmeie *et al.*, Journal of Applied Physics **113**, (2013)
3. A.I. Chernov, M.A. Kozhaev *et al.*, Optics Letters **42** (2017)

ВОЛНЫ НАМАГНИЧЕННОСТИ В РАЗБАВЛЕННОЙ СИСТЕМЕ

К.Б. Циберкин

Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Россия

e-mail: kbtsiberkin@psu.ru

Представлен анализ динамики намагниченности примесных ионов в разбавленном магнитном полупроводнике [1,2], помещённом в однородное постоянное магнитное поле, в приближении сплошной среды. Принято, что существенно косвенное обменное взаимодействие примесных ионов между собой и дипольное взаимодействие с парамагнитной матрицей. Уравнения эволюции циклических компонент намагниченности примеси M и матрицы m имеют следующий вид:

$$i\dot{m} \approx (1 + 2Sa)m + a \left[\frac{\sqrt{\sigma S}}{2} \left(M + \frac{a_0^2}{16} \Delta M \right) - \left((S - M^z) + \frac{a_0^2}{16} \Delta(S - M^z) \right) m \right],$$

$$i\dot{M} \approx \gamma M + j \Delta M a \left[\frac{\sqrt{\sigma S}}{2} \left(m + \frac{a_0^2}{16} \Delta m \right) - \left((\sigma - m^z) + \frac{a_0^2}{16} \Delta(\sigma - m^z) \right) M \right],$$

где $a = 4n_F^2 \gamma p_p$, $j = Sn_F^{2/3} \bar{J}$, n_F – концентрация примеси, γ – нормированное гиромангнитное отношение ионов примеси, p_p – энергия дипольного взаимодействия в системе в единицах зеемановской энергии, σ , S – спин ионов матрицы и примеси, соответственно, \bar{J} – средняя энергия обменного взаимодействия между ионами примеси, a_0 – постоянная решётки матрицы, Δ – оператор Лапласа.

Предполагая, что намагниченность матрицы однородно прецессирует вокруг направления внешнего поля с частотой $\omega = 1 + 2Sa$, можно представить поперечную намагниченность примесной подсистемы в виде

$$M = V(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}/q - ct) \exp(i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t))$$

где огибающая определяется решением дифференциального уравнения:

$$M'' + i(c + 2jq)M' + ((\gamma - 1) + a|m|^2 - jq^2)M + \frac{a|m|}{2} = 0.$$

Скорость волны и форма огибающей даются соотношениями:

$$c = -2jq, \quad V = A \cos(k(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}/q - ct) + \phi), \quad k^2 = \frac{(\gamma - 1) + a|m|^2}{j} - q^2.$$

Благодаря взаимодействию с матрицей возникает ненулевое среднее значение поперечной намагниченности примесной подсистемы. Величина её намагниченности остаётся ограниченной, если $k^2 > 0$. При преобладании в системе ферромагнитного взаимодействия величина может реализоваться ограниченный спектр бегущих волн постоянной амплитуды. В случае преобладания антиферромагнитного взаимодействия бегущие волны намагниченности в примесной подсистеме неустойчивы.

Работа выполнена при поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации, проект № МК-1422.2020.2.

1. T. Dietl, Nature Mater **9**, 965 (2010)
2. В.А. Иванов, Известия РАН. Серия физическая **71**, 1651 (2007)

НАМАГНИЧЕННОСТЬ СИСТЕМЫ ДИМЕРОВ СО СЛУЧАЙНОЙ ЭНЕРГИЕЙ СВЯЗИ

К.Б. Циберкин*, Я.Ю. Струнина

Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Россия

*e-mail: kbtsiberkin@psu.ru

Рассматривается система магнитных ионов, образующих димеры случайных размеров на проводящей подложке, помещённая в постоянное магнитное поле. Ионы внутри димеров связаны РККИ-взаимодействием. Рассмотрены две модели описания взаимодействия — гауссово распределение энергии для различных димеров и логнормальное распределение расстояния между ионами в димере r [1].

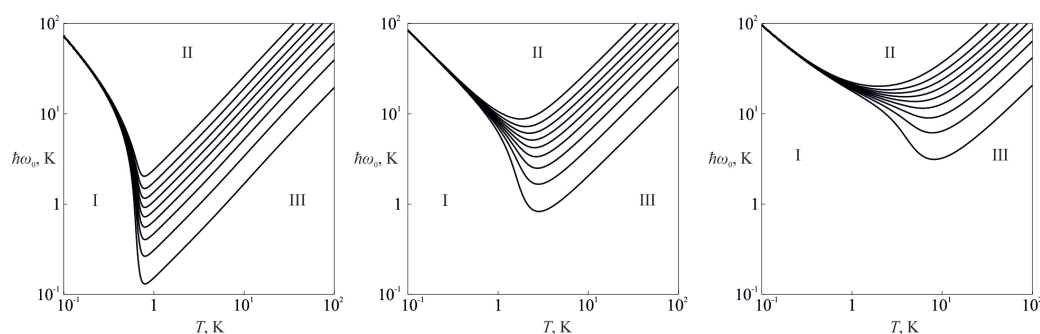


Рис. 1. Изолинии намагниченности системы димеров на плоскости параметров «температура–энергия Зеемана», при дисперсии энергии 0.5 мэВ, и среднем значении 1.0 мэВ (слева), 0.0 мэВ (по центру), –1.0 мэВ (справа); римскими цифрами отмечены: I — немагнитное состояние; II — насыщение; III — область выполнения закона Кюри; показаны изолинии от 0.1 до 0.9 с шагом 0.1

На рис. 1 показана рассчитанная намагниченность системы при варьировании параметров распределения обменной энергии, в зависимости от температуры и энергии Зеемана, соответствующей одиночному магнитному моменту из пары, составляющей димер. При высокой температуре независимо от знака средней энергии намагниченность близка к функции Бриллюэна. Существует пороговое поле, ниже которого немагнитное состояние не реализуется благодаря тепловым флуктуациям и состояниям димеров с нулевым полным спином. По мере понижения температуры наблюдается резкий, но непрерывный спад намагниченности. При логнормальном распределении расстояния между ионами в димерах намагниченность системы ведёт себя аналогичным образом. Результаты расчётов соотнесены с данными прямого численного моделирования РККИ-взаимодействия в графене, функционализированном атомами фтора и водорода [2]. При функционализации углеродной подложки водородом доминирует положительное обменное взаимодействие, и система всегда является парамагнетиком. Однако при осаждении на поверхность фтора энергия взаимодействия ближайших ионов согласно данным моделирования оказывается отрицательной, что определяет возможность реализации немагнитного состояния.

Работа выполнена при поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации, проект № МК-1422.2020.2.

1. S.F. Edwards, P.W. Anderson, J. Phys. F Met. Phys. **5**, 965 (1975).
2. A.N. Rudenko, F.J. Keil, M.I. Katsnelson *et al.*, Phys Rev B **88**, 081405(R) (2013).

ОСОБЕННОСТИ ИЗМЕРЕНИЯ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ПОСТОЯННЫХ МАГНИТОВ В ЗАМКНУТОЙ МАГНИТНОЙ ЦЕПИ

А.С. Черепанова*, А.С. Волегов

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: A.S.Cherepanova@inbox.ru

Магнитные свойства постоянных магнитов принято измерять в замкнутой магнитной цепи. Ввиду зазоров в резьбовых соединениях магнитной системы и закона Гука включение магнитного поля приводит к притяжению полюсных наконечников друг к другу с силой, составляющей несколько килоньютонов. Столь значительные усилия приводят к возникновению сколов вследствие высокой хрупкости постоянных магнитов. В некоторых случаях перед началом измерений оставляют небольшой зазор между магнитом и верхним полюсом, что приводит к частичному замыканию магнитного потока магнита в измерительной катушке и эффективному уменьшению намагниченности магнита. Цель настоящей работы заключается в оценке величины погрешности, обусловленной воздушным зазором между полюсом и постоянным магнитом методами натурного и компьютерного экспериментов с целью введения соответствующих поправок и устранения этой методической погрешности.

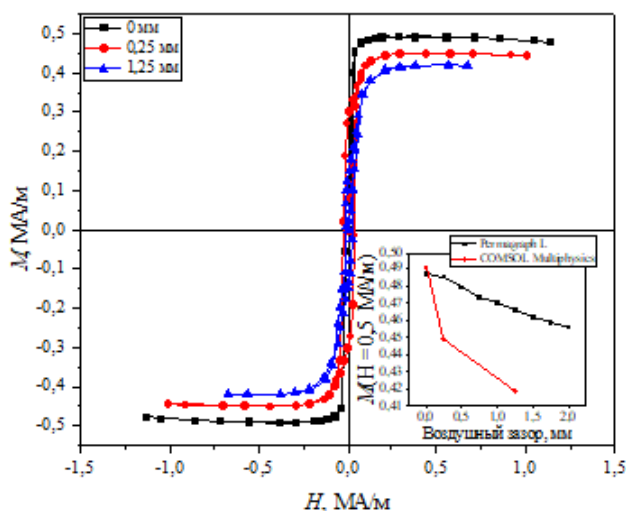


Рис. 1. Предельные петли магнитного гистерезиса, полученные в результате расчета методом конечных элементов при различных величинах воздушного зазора. На вставке — зависимость намагниченности образца с увеличением воздушного зазора при величине напряженности магнитного поля 0.5 МА/м.

Permagraph L, в отличие от COMSOL Multiphysics, возникают силы притяжения между полюсами и изменяется величина воздушного зазора между верхним полюсом электромагнита и магнитом.

По результатам работы установлена величина погрешности, достигающая 15% при зазоре 1.25 мм. Полученные результаты могут быть использованы для введения поправок и устранения методической погрешности.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ МК-1746.2020.2.

В ходе работы были проведены натурные эксперименты для образца никеля с применением магнитоизмерительной установки Permagraph L и компьютерные эксперименты с использованием модели, разработанной на основе геометрических размеров ярма и измерительных катушек Permagraph L в среде COMSOL Multiphysics.

В ходе натурного и компьютерного экспериментов, получены зависимости, представленные на рис. 1. При их сравнении установлено, что с увеличением воздушного зазора изменяется угол наклона участка петли гистерезиса вблизи нулевой напряженности магнитного поля.

Из графиков, представленных на вставке рис. 1 видно, что значение намагниченности насыщения уменьшается с увеличением величины зазора между образцом и верхним полюсом электромагнита. Стоит отметить, что графики, полученные различными методами не идентичны. Это связано с тем, что в измерительной установке

ДИНАМИКА КИРАЛЬНЫХ МАГНИТНЫХ СКЕРМИОНОВ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ,
ИНДУЦИРОВАННАЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ТОКОМК.А. Чичай^{1*}, В.М. Кучкин², Ф.Н. Рыбаков³, Ш. Блюгель², Н.С. Киселёв²¹Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия²Институт Питера Грюнберга и Институт Передовых Симуляций, Юлихский исследовательский центр, Юлих, Германия³Департамент физики, Королевский технологический институт, Стокгольм, Швеция*e-mail: ks.chichay@gmail.com

Магнитные скирмионы представляют собой вихревые спиновые конфигурации, способные проявлять свойства обычных частиц — могут взаимодействовать друг с другом и перемещаться под действием внешних сил. Значительное внимание к таким объектам обусловлено сочетанием интересной фундаментальной физики и возможности прикладного использования скирмионов, например, в качестве носителей информации. Подавляющее большинство исследований, опубликованных на данный момент, посвящено π -скирмионам с топологическим зарядом $|Q| = 1$, когда намагниченность от центра к периферии поворачивается на угол π . π -скирмионы являются частным случаем более общего типа решений, называемых $k\pi$ -скирмионами, топологический заряд которых принимает два дискретных значения: $|Q| = 1$ и $Q = 0$ для нечетных и четных k соответственно. До недавнего времени считалось, что конфигурации скирмионов с $|Q| > 1$ не могут быть стабильными. Однако, в прошлом году было показано, что в киральных магнетиках, строго говоря, могут существовать скирмионные конфигурации с любым целочисленным Q [1]. В литературе за такого рода решениями закрепилось название «скирмионные мешки» [2]. Важной особенностью таких решений является отсутствие аксиальной симметрии.

В данной работе мы исследовали динамику таких скирмионов, возбуждаемую взаимодействием с электрическим током, протекающим через тонкую пленку кирального магнетика. Динамика скирмионов изучалась как с помощью микромагнитных симуляций, так и аналитически на основе подхода Тиля [3]. Динамические свойства, а именно скорость скирмиона и угол отклонения, а также их зависимости от внутренних и внешних параметров системы были проанализированы для скирмионов с различным порядком вращательной симметрии. Полученные результаты свидетельствуют о том, что симметрия скирмионов, наряду с топологическим зарядом, играет решающую роль в их динамике и позволяют выделить скирмионные конфигурации наиболее перспективные с точки зрения возможных практических приложений магнитной памяти.

Работа выполнена в рамках Программы повышения конкурентоспособности 5-100 на 2016-2020 годы.

1. F.N. Rybakov and N.S. Kiselev, Phys. Rev. B **99**, 064437 (2019).
2. D.Foster *et al.*, Nat. Phys. **15**, 655 (2019).
3. A.A. Thiele, Phys. Rev. Lett. **30**, 230 (1973).

ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ПЛЕНОЧНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ С ГИГАНТСКИМ МАГНИТНЫМ ИМПЕДАНСОМ

А.А. Членова^{1,2*}, Г.В. Курляндская¹

¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

²Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: Chlenova.anna@gmail.com

Функциональные пленочные структуры активно используются в качестве сред для сенсорных устройств [1]. Тонкопленочные сенсорные элементы хорошо совместимы с существующей полупроводниковой технологией электронных схем и методами интеграции. К наиболее востребованным функциональным материалам следует отнести среды для специализированных детекторов малых магнитных полей, в основе действия которых могут лежать различные эффекты, в том числе обладающий высокой чувствительностью по отношению к внешнему магнитному полю гигантский магнитоимпедансный эффект (ГМИ), заключающийся в изменении полного сопротивления ферромагнетика при протекании по нему тока высокой частоты и приложении внешнего магнитного поля [2]. В рамках данной работы исследовались многослойные пленочные структуры типа $[\text{FeNi}/\text{Ti}]_x/\text{Cu}/[\text{Ti}/\text{FeNi}]_y$ с особенностями геометрии, сравнительно проанализирована связь между структурой, статическими и динамическими магнитными свойствами, а также проведены модельные эксперименты с ГМИ-элементами.

Пленочные образцы как для исследований методом ферромагнитного резонанса (ФМР, на спектрометре электронного парамагнитного резонанса X-диапазона Elexsys II E500, Bruker), так и импедансной спектроскопии (измерительный комплекс на основе e4991, Agilent) были получены методом магнетронного распыления в рамках одной серии напылений, варьировался состав пермаллоя $\text{Fe}_x\text{Ni}_{100-x}$ ($x = 11-19\%$). Сравнение концентрационных зависимостей для статических $4\pi M_s$ (полученных из данных вибрационной магнитометрии) и динамических значений намагниченности $4\pi M_{\text{эфф}}$ (Рис. 1) позволило выбрать узкий интервал около состава $\text{Fe}_{15}\text{Ni}_{85}$, что представляется интересным для разработки специализированных датчиков давления. Самые высокие значения ГМИ соответствовали многослойной структуре с близкой к нулю магнитострикцией слоев FeNi , однако даже для структуры на основе сплава $\text{Fe}_{11}\text{Ni}_{89}$ чувствительность магнитоимпедансного составила $2\%/Э$, величина, которая вполне приемлема для многих технических приложений [3].

Работа выполнена при частичной поддержке проекта РНФ № 18-19-00090.

1. G.V. Kurllyandskaya, L. Elbaile, F. Alves, B. Ahamada, R. Barrue, A. V. Svalov, V. O. Vas'kovskiy, J. Phys. Condens. Matter **16**, 6561 (2004).
2. M. Knobel, M. Vazquez, L. Kraus, Handbook of Magnetic Materials. — Amsterdam: Elsevier (2003).
3. B. Li, M. N. Kavaldzhiev, J. Kosel, JMMM **378**, 499 (2015).

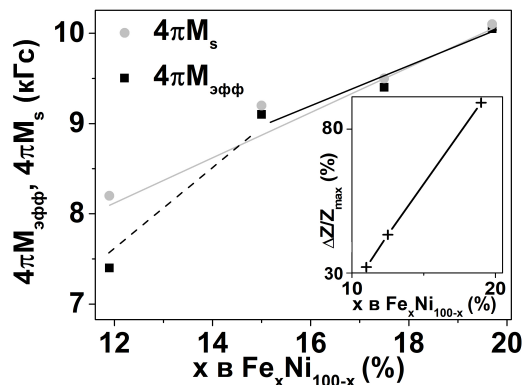


Рис. 1. Сравнение концентрационных зависимостей статических $4\pi M_s$ и динамических $4\pi M$ значений намагниченности.

МОДУЛЯЦИОННЫЙ МЕТОД ИЗМЕРЕНИЯ НАМАГНИЧЕННОСТИ

Д.М. Юсупов^{1,2*}, А.А. Амиров^{1,2}, А.М. Алиев^{1,2}¹Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия²Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия*e-mail: dibir.usupov@mail.ru

Магнитокалорические материалы по-прежнему остаются в фокусе внимания как рабочие материалы для перспективной технологии магнитного охлаждения. В настоящее время известны десятки различных материалов с гигантскими значениями магнитокалорического эффекта (МКЭ). Недавние исследования в циклических магнитных полях показывают, что не все из них являются перспективными с точки зрения стабильности магнитокалорических свойств, а также зависимости этих свойств от частоты магнитного поля. Большинство исследованных в циклических магнитных полях материалы показывают сильную зависимость от частоты магнитного поля, но установить природу этого явления только по данным адиабатического изменения температуры сложно. Поэтому важной задачей является исследование связанных с МКЭ параметров, таких как намагниченность и магнитострикция (последняя в случае фазовых переходов первого рода) в циклических магнитных полях.

В настоящей работе предложен метод исследования намагниченности в циклических магнитных полях высокой амплитуды, основанный на модуляционных методах исследования магнитных свойств. Калибровка магнитного момента образца, анализ и интерпретация полученных результатов были выполнены с использованием классического метода измерения намагниченности — вибрационной магнитометрии.

Теория предлагаемого метода основана на известном законе электромагнитной индукции, который заключается в измерении изменения ЭДС в катушке, которая охватывает образец, находящийся в переменном магнитном поле.

В катушке, помещенной в переменное магнитное поле, наводится ЭДС. При помещении магнитного материала в центр катушки наводимый ЭДС изменится из-за магнитного поля, создаваемого образцом. Разница в ЭДС в катушке в переменном магнитном поле с образцом и без образца будет пропорциональна его намагниченности. Чтобы свести к минимуму ЭДС, наводимый в катушке без образца, применяется система из двух противоположно намотанных катушек.

Для тестирования и калибровки был выбран эталонный магнитокалорический материал гадолиний Gd. Был также исследован сплав Гейслера $\text{Ni}_{43}\text{Mn}_{46}\text{In}_{11}$ с известными магнитными свойствами. Эксперимент проводился в области температур 150 – 350 К, при постоянном (вибрационная магнитометрия) и переменном (модуляционный метод) магнитных полях частотой 0.3 Гц.

Проведенные измерения температурных зависимостей намагниченности для Gd и сплава $\text{Ni}_{43}\text{Mn}_{46}\text{In}_{11}$ показали наличие магнитного перехода (Gd), и магнитоструктурного перехода ($\text{Ni}_{43}\text{Mn}_{46}\text{In}_{11}$) в области температур 270 – 330 К и согласуются с результатами, проведенными методом вибрационной магнитометрии. В области магнитоструктурного перехода имеются небольшие различия в поведении намагниченности.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и БРФФИ в рамках научного проекта № 20-52-00047, а также при финансовой поддержке гранта РНФ № 18-12-00415.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ УРОВНЕЙ ЛАНДАУ И g -ФАКТОРОВ ДВУМЕРНОЙ СУРЬМЫ В РАМКАХ МОДЕЛИ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

И.А. Яковлев^{1*}, Г.В. Пушкарев¹, Е.А. Степанов^{2,1}, В.В. Мазуренко¹, А.Н. Руденко^{3,1}

¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

²Университет Гамбурга, Гамбург, Германия

³Университет Уханя, Ухань, Хубей, Китай

*e-mail: iakovlev.ilia@mail.ru

Изучение двумерных и квази-двумерных систем, яркими представителями которых являются графен, фосфорен и двумерная сурьма, вызывает большой интерес для физики конденсированных состояний. По большей части это обусловлено их уникальными свойствами, к примеру, высокой подвижностью носителей заряда, что делает перспективным их использование для изготовления полупроводниковых элементов. Так как сурьма также обладает сильным спин-орбитальным взаимодействием, отдельного внимания заслуживает выявление особенностей квантования её электронного спектра в сильных магнитных полях.

Для того чтобы построить уровни Ландау и оценить значения g -фактора, мы использовали модель сильной связи, предложенную в работе [1]. Учет внешнего магнитного поля в рамках данного подхода проводился путем добавления фазовых множителей к интегралам перескока — так называемых, фаз Пайерлса [2]:

$$t_{ij} \rightarrow t_{ij} e^{\gamma_{ij}}, \quad (1)$$

$$\gamma_{ij} = -2\pi i \frac{e}{\hbar} \int_{r_i}^{r_j} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}, \quad (2)$$

где \mathbf{A} — векторный потенциал электромагнитного поля. Было обнаружено существенное различие в поведении уровней Ландау для электронов и дырок, особенно заметное при добавлении напряжения смещения V_{bias} . Аналогичная ситуация наблюдалась при рассмотрении g -факторов: даже при $V_{\text{bias}} = 0$ мы получили значения $g_e \approx 2.33$ и $g_h \approx 6.48$, соответственно. Как видно из рис. 1, увеличение напряжения смещения приводит к уменьшению значений g -факторов, а также к образованию щели в нулевом магнитном поле для электронных уровней Ландау. Подобная картина наблюдается и при константах спин-орбитального взаимодействия, соответствующих двумерному мышьяку и фосфору, соединениям, которые имеют аналогичную сурьме электронную и кристаллическую структуры.

Рис. 1. Зависимость уровней Ландау и g -факторов двумерной сурьмы от напряжения смещения V_{bias} .

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 21-12-00338.

1. A. N. Rudenko, M. I. Katsnelson, R. Roldán, Phys. Rev. B **95**, 8 (2017).
2. R. Peierls, Z. Phys. **80**, 763 (1933).

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И КРИТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ

ПЛАВЛЕНИЕ И КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ ПЛЕНОК НИТРИДА БОРА В МОДЕЛИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ФАЗОВОГО ПОЛЯ

В.Е. Анкудинов

Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Троицк, Россия
Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия

e-mail: vladimir@ankudinov.org

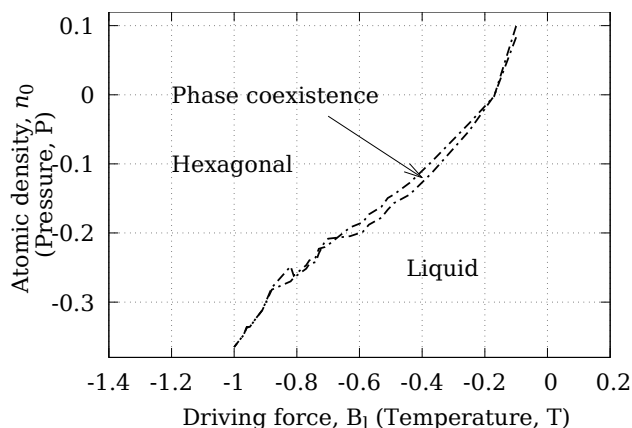


Рис. 1. Расчитанная по модели МКФП структурная диаграмма «атомная плотность (давление)-движущая сила (температура)», показывающая область вблизи раздела фаз между гексагональной и жидкой фазами (см. правый нижний угол структурной диаграммы BN [5]). Диаграмма построена в безразмерных координатах, совпадает по направлению осей с рисунком из [5].

при изготовлении покрытий режущего инструмента. С помощью модели МКФП для эквиатомной решетки нитрида бора было выполнено построение функционала свободной энергии и расчет структурной диаграммы областей существования гексагональной фазы для безразмерных параметров модели МКФП (рис. 1). Построенная модельная диаграмма границ сосуществования фаз показывает нетривиальное поведение в области малых давлений и температур, что следует из неравновесного размера решетки, выбранного на основе соотношения решеточных чисел a/c из экспериментальных данных [6].

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 19-79-20012.

1. K.R. Elder, M. Katakowski, M. Haataja, M. Grant, Phys. Rev. Lett. **88**, 245701 (2002).
2. N. Provatas, K. Elder, Phase-Field Methods in Mat. Science and Eng. — Wiley-VCH (2010).
3. P.K. Galenko, D.A. Danilov, V.G. Lebedev, Phys. Rev. E **79**, 051110 (2009).
4. P. Galenko, V. Ankudinov, I. Starodumov, Phase Field Crystals: Fast Interface Dynamics. — Berlin: De Gruyter (2018).
5. Properties of group III nitrides / edited by J.H. Edgar **11**. — London: INSPEC (1994).
6. G. Cassabois, P. Valvin, B. Gil, Nature Photonics **10**, 4, 262 (2016).

Гиперболическая (модифицированная) модель кристаллического фазового поля (МКФП, modified phase field crystal) [1-3] сформулирована для описания скоростных переходов из однородного состояния в периодическое кристаллическое (аналогично переходам Ландау-Бразовского), а также между различными периодическими состояниями на временах, сопоставимых с диффузионными [4]. Модель КФП — континуальная атомистическая модель, основанная на описании свободной энергии в виде функционала поля атомной плотности периодического в твердой фазе и однородного в жидкой.

Получение гексагональной модификации нитрида бора [5,6] возможно в процессе высокоэнергетической обработки лазерным лучом, например в составе различных упрочняющих смесей

РАСЧЕТ ОТНОСИТЕЛЬНЫХ ДИСПЕРСИЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ, ВОСПРИИМЧИВОСТИ И ТЕПЛОЕМКОСТИ В СЛАБО РАЗБАВЛЕННОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА НА ОСНОВЕ МЕТОДОВ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ.

А.К. Муртазаев^{1,2}, А.Б. Бабаев^{1,3}, Г.Я. Атаева^{1*}, А.А. Муртазаева^{1,2}

¹Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

²Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

³Дагестанский государственный педагогический университет, Махачкала, Россия.

*e-mail: ataeva20102014@mail.ru

Исследования реальных магнитных систем показали, что редко встречаются системы в чистом однородном состоянии, всегда в твердых материалах присутствуют неоднородности в виде примесей и дефектов структуры, которые оказывают влияние на магнитные и тепловые свойства спиновых структур [1-2].

В рассматриваемой работе исследуется проблема самоусреднения термодинамических критических параметров в двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ при наличии немагнитных примесей, на основе методов Монте-Карло. Немагнитные примеси распределены каноническим способом (фиксацией доли магнитных узлов). При этом:

1. В узлах квадратной 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.

2. Энергия связи между двумя соседними узлами равна нулю, если хотя бы в одном узле находится немагнитный атом, и равна $|J|$, если оба узла заняты магнитными атомами. Гамильтониан подобной системы имеет вид [3].

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

$\theta_{i,j}$ — угол между взаимодействующими спинами S_i, S_j , где J — параметр обменного ферромагнитного взаимодействия ближайших соседей, $\rho_i=1$, если узел i занят магнитным атомом, и $\rho_i=0$, если в i узле немагнитная примесь. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями при концентрациях спинов $p = 1.0, 0.90$. Исследовались системы с линейными размерами $L \times L = N$, $L = 20 - 120$.

В результате расчета получены среднеквадратичные значения намагниченности R_m , восприимчивости R_χ и теплоемкости R_c в зависимости от линейных размеров L при концентрации спинов $p = 0.90$, которые равны $L = 20/120$, $R_\chi = 0.019/0.021$, $R_m = 0.011/0.010$, $R_c = 0.009/0.012$. Как видно из этих данных внесение слабого беспорядка в модель Поттса с $q = 4$ приводит к отличным от нуля значениям для R_m , R_χ и R_c . Эти данные позволяют судить об ошибках, связанных с размерами изучаемых систем.

Таким образом, показано, что внесение замороженного беспорядка в виде немагнитных примесей в чистую модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на квадратной решетке приводит к отличным от нуля значениям для R_m , R_χ и R_c , что видимо, связано с плохим самоусреднением термодинамических параметров в рассматриваемой неупорядоченной модели.

1. Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский, Успехи физических наук **173**, 175 (2003).

2. А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Письма в ЖЭТФ **99**, 9 618 (2014).

3. F.Y. Wu, Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics. World Scientific, London (2009).

4. P. Peczac, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau, Phys. Rev. **43**, 6087 (1991).

КРИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОДЕЛИ ИЗИНГА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

А.К. Муртазаев², М.К. Рамазанов¹, М.А. Магомедов¹, М.К. Бадиев^{1*}¹Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия²ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*e-mail: m_zagir@mail.ru

Исследование фазовых переходов (ФП) и критических свойств соединений, имеющих треугольную решетку, является актуальной задачей в физике конденсированного состояния [1-3]. При изучении ФП и критических явлений в фрустрированных спиновых системах накоплен огромный опытный материал и уже построен прочный теоретический фундамент, тем не менее, до сих пор остается интенсивно развивающейся областью физики конденсированного состояния, в которой буквально ежедневно появляются новые, интересные, ранее совсем неизвестные результаты. Многие физические свойства фрустрированных систем могут зависеть от внешних факторов, например, от магнитного поля. Поэтому исследование антиферромагнетиков на треугольной решетке в магнитном поле на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с влиянием магнитного поля на природу ФП слоистых фрустрированных спиновых систем.

В связи с этим, в данной работе нами предпринята попытка, на основе метода Монте-Карло исследовать магнитную структуру основного состояния и природу ФП этой модели в магнитном поле.

Антиферромагнитная модель Изинга на слоистой треугольной решетке описывается гамильтонианом:

$$H = -J \sum_{i,j} (S_i \cdot S_j) - h \sum_i S_i, \quad (1)$$

где $S_{i,j} = \pm 1$ — изинговский спин, $J < 0$ — константа антиферромагнитного обменного взаимодействия. Решетка состоит из двумерных треугольных слоев, сложенных по ортогональной оси z , h — внешнее магнитное поле. Все параметры приводятся в безразмерных величинах (за единицу взята $k_B J$).

Исследование фазовых переходов и термодинамических свойств трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке в магнитном поле выполнено с использованием высокоэффективного репличного алгоритма метода Монте-Карло. На основе гистограммного метода анализа данных проведен анализ характера фазовых переходов. Установлено, что в исследуемой модели в интервале $0 \leq h \leq 6$ реализуется фазовый переход второго рода. Показано, что дальнейшее увеличение величины магнитного поля снимает вырождение основного состояния и размывает фазовый переход в системе. Обнаружено, что в зависимости от величины магнитного поля в системе наблюдаются неупорядоченная, частично упорядоченная и полностью упорядоченная фазы. В первой области, где поле меняется в интервале $0 \leq h \leq 2$, энергия системы не зависит от величины поля и в системе наблюдается неупорядоченное состояние. В второй области в интервале $2 \leq h \leq 8$ происходит частичное упорядочение системы. В третьей области в интервале $8 \leq h \leq 14$ наблюдается полностью упорядоченная система.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 18-32-20098, № 19-02-00153.

1. P.C. Гехт, УФН **159**, 262 (1989).2. E. Ising Z. Phys. **31**, 253 (1924).3. A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, M. K. Badiiev, Physica A **507**, 210 (2018).

НЕСТАБИЛЬНОСТЬ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ В СПЛАВАХ Ni – Mn – Ga

Д.Р. Байгутлин^{1*}, В.В. Соколовский^{1,2}, О.Н. Мирошкина¹, М.А. Загребин^{1,3},
В.Д. Бучельников^{1,2}

¹Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

²Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия

³Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия

*e-mail: d0nik1996@mail.ru

Наличие мартенситного перехода в немодулированную фазу для сплава Ni₂MnGa хорошо объясняется эффектом Яна–Теллера [1]. Однако происхождение предмартенситной фазы 3М и мартенситных модулированных фаз 5М и 7М еще полностью не объяснено. Образование этих фаз связывают с аномалией поперечно-акустической фононной моды TA₂, происхождение которой, возможно, связано с сильным нестингом поверхности Ферми.

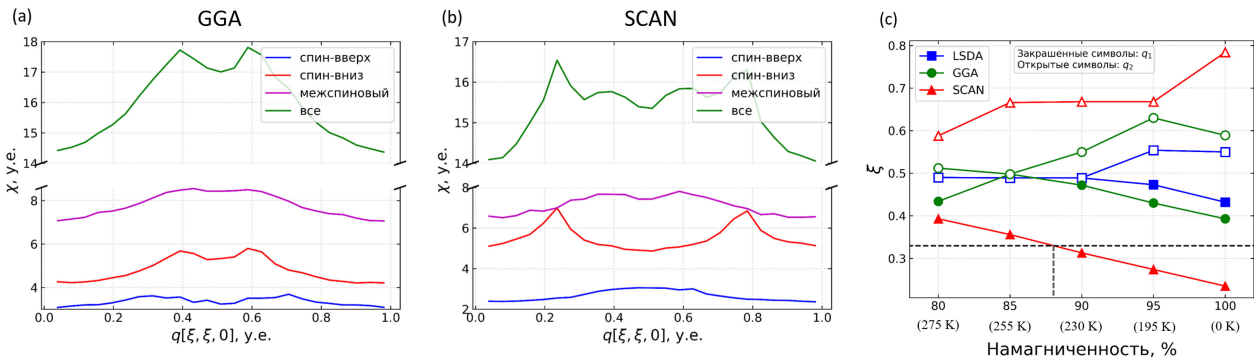


Рис. 1. Поперечные сечения обобщенной электронной восприимчивости вдоль направления [110] для функционалов (a) GGA и (b) SCAN; (c) — положение пика q_1 (закрашенные символы) и пика q_2 (открытые символы) в зависимости от намагниченности.

На рис. 1 (a,b) показаны сечения обобщенной электронной восприимчивости $\chi(q)$ для аустенитной фазы Ni₂MnGa вдоль направления [110]. Из соответствующих профилей видно, что длина вектора нестинга $|\mathbf{q}_1| \approx 0.39$ для GGA, что согласуется с Bungaro *и др.* [2]. Значение $|\mathbf{q}_1| \approx 0.20$ для функционала SCAN, что отражает значительные различия в свойствах нестинга поверхности Ферми. Данные вектора не соответствуют вектору, при котором наблюдается фононная аномалия ($|\mathbf{q}_1| \approx 0.33$ [3]). Однако предмартенситный переход происходит при ненулевой температуре ($T_M \approx 220$ K [3]), и следовательно, необходимо рассмотреть влияние конечной температуры на вектора нестинга.

Положение основных пиков q_1 и q_2 показано на рис. 1 (c). Видно, что для всех исследуемых обменно-корреляционных функционалов пики приближаются друг к другу. Для SCAN при $\approx 88\%$ намагниченности волновой вектор совпадает с волновым вектором, при котором происходит смягчение фононной ветви TA₂. В случае других функционалов пик обобщенной восприимчивости не совпадает с экспериментальным значением.

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

1. S. Fujii, S. Ishida, and S. Asano, J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 3657 (1989).
2. C. Bungaro, K.M. Rabe, A.D. Corso, Phys. Rev. B. **68**(13), 134104 (2003).
3. A. Zheludev, S.M. Shapiro, P. Wochner, L.E. Tanner, Phys. Rev. B. **54**, 15045 (1996).

СИСТЕМА Mn – Mg – В – О: КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Н.А. Бельская^{1,2*}, Н.В. Казак¹, Е.М. Мошкина¹, А.Д. Васильев¹, Л.Н. Безматерных¹,
Е.В. Еремин^{1,3}, С.Ю. Гаврилкин⁴, С.Г. Овчинников^{1,3}

¹Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия

²Сибирский государственный университет науки и технологий им. М.Ф. Решетнева, Красноярск, Россия

³Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия

⁴Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

*e-mail: xelviya@gmail.com

Вопрос о фазовых отношениях в системе $\text{MgO} - \text{Mn}_2\text{O}_3 - \text{V}_2\text{O}_3$ интенсивно обсуждается в литературе с 1950-х годов [1,2]. В зависимости от соотношения $\text{MgO} - \text{Mn}_2\text{O}_3$ может быть реализован ряд структурных типов: варвикит (W) \rightarrow ортопинакиолит (OP) \rightarrow такеучит (T) \rightarrow халсит (H) \rightarrow людвигит (L), различных по магнитным и электронным свойствам. Общая формула данных оксиборатов $\text{M}_n^{2+}\text{M}^{3+}\text{O}_n(\text{BO}_3)$, где $n = 1$ и 2 для конечных членов ряда. Соотношение двух- и трехвалентных ионов на формульную единицу определяет способность системы образовывать зарядово-упорядоченные плоскости.

Два новых оксибората $\text{Mg}_{1.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_2(\text{BO}_3)$ (OP) и $\text{Mg}_{1.8}\text{Mn}_{1.2}\text{O}_2(\text{BO}_3)$ (H) были выращены раствор-расплавным методом. Соединения кристаллизуются в орторомбической и моноклинной симметрии, пространственные группы $Pbam$ и $P2/m$ соответственно. Параметры элементарной ячейки следующие: $a = 18.333(14)\text{Å}$, $b = 12.517(10)\text{Å}$, $c = 3.039(2)\text{Å}$, $V = 697.28(9)\text{Å}^3$ для соединения (OP) и $a = 5.327(4)\text{Å}$, $b = 3.018(2)\text{Å}$, $c = 10.874(7)\text{Å}$, $\beta = 95.27(0)^\circ$ и $V = 174.1(4)\text{Å}^3$ для соединения (H). Кристаллическая структура содержит несколько неэквивалентных кристаллографических позиций ($z = 7$ для (OP) и 5 для (H)). Металлические ионы находятся в октаэдрической координации. Анализ межионных расстояний методом сумм валентных связей (BVS) показал, что данные системы склонны к образованию зарядово-упорядоченных плоскостей, параллельных короткому кристаллографическому направлению ($\sim 3\text{Å}$). Часть металлических узлов, обладающих коротким межионным расстоянием ($\sim 2.6\text{Å}$), подвержено электронному обмену $\text{Mn}^{2+} - \text{Mn}^{3+}$. Таким образом, результаты BVS предполагают наличие переноса заряда внутри октаэдрической плоскости, разбавленной ионами Mg.

Магнитные исследования показали наличие трех аномалий. По аналогии с людвигитами на основе железа [3-5], аномалию при $T_{N1} = 90\text{ K}$ можно связать с антиферромагнитным упорядочением магнитных моментов ионов Mn с наименьшим межионным расстоянием. Можно предположить, что при $T_{N2} = 32$ ($x = 1.6$) и $\sim 44\text{ K}$ ($x = 1.8$) происходит магнитный переход во второй системе ионов Mn, связанных наибольшим расстоянием. Переход в состояние спинового стекла наблюдается при $T_{SG} \sim 8\text{ K}$, ниже которой имеет место незначительный гистерезис. Для образца с $x = 1.6$ были выполнены ориентационные измерения намагниченности, которые обнаружили анизотропию типа « ab -легкая плоскость».

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ № 20-02-00559 и при государственной поддержке молодых российских ученых-кандидатов наук Президента Российской Федерации МК-2339.2020.02.

1. Y. Takéuchi, T. Watanabé and T. Ito, Acta Cryst. **3**, 98 (1950).
2. A. Utzolino and K. Bluhm, Z. fur Naturforschung B **51**, 1433 (1996).
3. P. Bordet and E. Suard, Phys. Rev. B **79**, 144408 (2009).
4. J. Bartolomé, A. Arauzo, N.V. Kazak *et al.*, Phys. Rev. B **83**, 144426 (2011).
5. D.C. Freitas, C.P.C. Medrano, D.R. Sanchez *et al.*, Phys. Rev. B **94**, 174409 (2016).

ИССЛЕДОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ОДНООСНОГО ГЕЛИМАГНЕТИКА МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

В.О. Борзилов^{1*}, П.В. Прудников¹, Д.В. Евсин¹, М.В. Мамонова¹, Е.А. Поспелов¹, Г.Г. Бакшеев²

¹Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

²Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

*e-mail: borzilovvo@omsu.ru

В данной работе проводилось компьютерное моделирование одноосного кирального гелимагнетика CrNb_3S_6 методом Монте-Карло с применением параллельного алгоритма Метрополиса. Гамильтониан исследуемой системы имеет следующий вид:

$$H = -J \sum_{i=1}^N \vec{S}_i (\vec{S}_{i+x} + \vec{S}_{i+y}) - J_{\parallel} \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \vec{S}_{i+z} - D \sum_{i=1}^N [\vec{S}_{i+x} \times \vec{S}_{i+z}] \vec{n}_z - H \vec{S}_i \vec{n}_x, \quad (1)$$

где каждый узел кубической $i_x, i_y, i_{\parallel} \in Z$ решетки задается безразмерным вектором $i = i_x \hat{x} + i_y \hat{y} + i_{\parallel} \hat{z}$, где $i_x, i_y, i_{\parallel} \in Z$. Базисные векторы $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ обозначают единичные векторы в направлениях x, y и z соответственно.

Решетка спинов рассматривается как набор слоев, каждый из которых обозначен символом i_{\parallel} . Вектор $S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ представляет собой классический гейзенберговский спин в i -м узле решетки. Через $J > 0$ обозначается ферромагнитное обменное взаимодействие между соседними спинами в пределах одного слоя, а ферромагнитное обменное взаимодействие между парами спинов в соседних слоях обозначается как $J_{\parallel} > 0$, оно и характеризует взаимодействие Дзялошинского-Мория. Верхние индексы \parallel и \perp указывают параллельное и перпендикулярное направления относительно оси z . $J_{\parallel} = 16$, $J_{\perp} = 154$, $D = 2.9$ K [1].

Проведено численное моделирование термодинамических свойств моноаксиального кирального гелимагнетика CrNb_3S_6 методами Монте-Карло. Наличие пиков намагниченности в зависимости от температуры во внешнем магнитном поле на рис. 1 указывает на то, что система может находиться в состоянии киральной солитонной решетки [2,3].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 19-32-90261, № 20-32-70189 Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ. Для проведения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН», Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН, Суперкомпьютерного центра МГУ им. М.В. Ломоносова.

1. T. Miyadai *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **52**, 1394–1401 (1983).
2. Y. Togawa *et al.*, Phys. Rev. Lett. **108**, 107202 (2012).
3. Y. Togawa *et al.*, Phys. Rev. Lett. **111**, 197204 (2013).

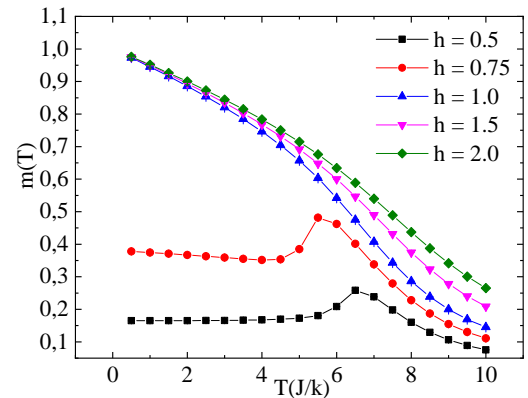


Рис. 1. Температурная зависимость намагниченности при различных значениях внешнего магнитного поля.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ СПИН-ВЕНТИЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ

Е.В. Дроворуб*, В.В. Прудников, П.В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

*e-mail: drovorubev@stud.omsu.ru

В настоящее время интерес к спин-вентильным структурам обусловлен тем, что для достижения в них эффекта гигантского магнитосопротивления (ГМС) требуются напряженности магнитного поля гораздо меньшие, чем значение поля насыщения в трехслойной магнитной структуре. Это свойство делает их применение наиболее предпочтительным [1].

В данной работе нами осуществлено моделирование статистическими численными методами Монте-Карло эффектов гистерезиса в спиновых вентилях для различных температур. Модель структуры состоит из двух ферромагнитных слоев с толщинами N_1 и N_2 в единицах монослоев, разделенных немагнитной прослойкой. При этом направление намагниченности одного из слоев закреплено взаимодействием с антиферромагнитным слоем толщины N_{AF} . Исследовано влияние температуры на ширину и структуру петель гистерезиса.

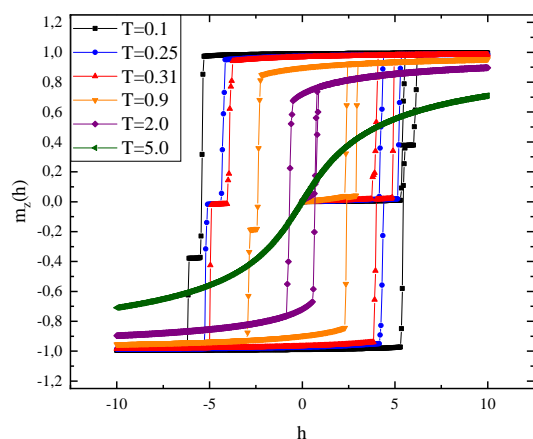


Рис. 1. Влияние различных температур на гистерезисные эффекты.

Для моделирования физических свойств тонких ферромагнитных пленок применялась анизотропная модель Гейзенберга, описываемая гамильтонианом [2]

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \{ (1 - \Delta(N))(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z \}, \quad (1)$$

где S_i — трехмерный единичный вектор спина, фиксированный в i -ом узле ГЦК-решетки. $\Delta(N)$ — параметр учитывающий эффективное влияние анизотропии, создаваемой полем подложки, на магнитные свойства пленки в зависимости от ее толщины N . J — обменный интеграл, характеризующий внутрислойное взаимодействие.

Результаты, представленные на рис. 1, демонстрируют зависимость приведенной на число спинов полной намагниченности структуры от величины и направления приведенного магнитного поля $h = \mu_B H / J$. Графики характеризуют проявление эффектов гистерезиса в широком интервале изменения температуры. Видно, что с повышением температуры ширина петли начинает уменьшаться, а вблизи критической температуры исчезает. Важно отметить, что в низкотемпературной области на петле гистерезиса возникает ступень, обусловленная закреплением направления намагниченности в пленке, спаренной со слоем антиферромагнетика, при полях h , определяемых величиной обменного взаимодействия спинов ферромагнитной пленки со спинами антиферромагнетика.

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

1. V. Dieny, J. Magn. Magn. Mater. **136**, 1297 (1994).

2. П.В. Прудников, В.В. Прудников, М.А. Медведева, Письма в ЖЭТФ **100**, 501 (2014).

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЁТЫ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ОДНООСНОГО ГЕЛИМАГНЕТИКА

Д.В. Евсин*, В.О. Борзилов, В.Е. Ложников, П.В. Прудников, М.В. Мамонова

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

*e-mail: EvsinDV@stud.omsu.ru

В данной работе проводились расчёты магнитных свойств одноосного кирального гелимагнетика CrNb_3S_6 [1] первопринципными методами. Использовался пакет SPR-KKR (Spin-polarized Relativistic Korringa-Kohn-Rostoker), который позволяет выполнять расчёты электронной структуры трёхмерных периодически упорядоченных систем с химическим беспорядком в рамках методов KKR в приближении когерентного потенциала и проводить вычисления в скалярно-релятивистском режиме, что даёт возможность учитывать спин-поляризованные системы, в том числе неколлинеарные спиновые структуры и спиновые спирали. В основе метода KKR лежит формализм функции Грина, который позволяет в рамках теории многочастичного рассеяния выразить значения таких физических величин, как зарядовая и спиновая плотности, спиновый и орбитальный магнитные моменты через функции Грина.

Для подтверждения нахождения системы в гелимагнитном состоянии был проведён расчёт по нахождению самосогласованных функций (Self-Consistent Functions), позволяющих получить значения потенциалов и описать магнитные свойства системы. Кристаллическая структура исследуемой системы CrNb_3S_6 представлена на рис. 1(a), в расчётах использовалась 20-ти атомная суперъчейка. Были вычислены магнитные моменты атомов системы: $m(\text{Nb}_1) = -0.0410\mu_B$, $m(\text{Nb}_2) = -0.0702\mu_B$, $m(\text{Cr}) = 2.4896\mu_B$, $m(\text{S}) = -0.0333\mu_B$. Отрицательное значение магнитного момента указывает на антиферромагнитный характер взаимодействия в структуре. На основании полученных значений потенциалов были рассчитаны следующие значения констант обменного взаимодействия атомов хрома (рис. 1b): для ближайших (на расстоянии $r/a = 1$) соседей $J_1 = 2.794\text{мэВ}$, для следующих за ближайшими (на расстоянии $r/a = 1.202$) $J_2 = -1.127\text{мэВ}$, где постоянная решетки $a = 10.84892\text{ а.е.}$

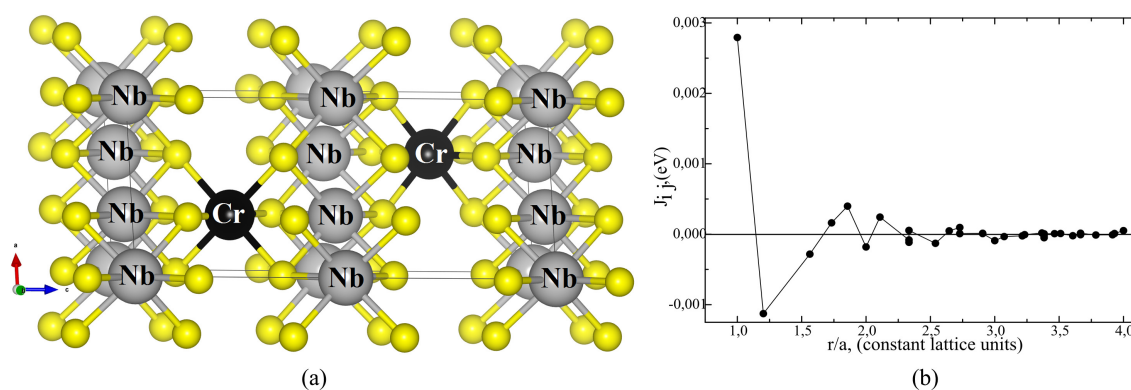


Рис. 1. (a) Кристаллическая структура системы CrNb_3S_6 , (b) зависимость параметров обменного взаимодействия для Cr от расстояния между атомами в единицах постоянной решетки.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ. Для проведения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН», Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН, Суперкомпьютерного центра МГУ им. М.В. Ломоносова.

1. Y. Togawa, Y. Kousaka, K. Inoue, J. Kishine, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 112001 (2016).

РАСЧЕТ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ МУЛЬТИСЛОЙНЫХ МАГНИТНЫХ СТРУКТУР И ЭФФЕКТОВ СТАРЕНИЯ В МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИИ

Ю.К. Евстафьева*, В.В. Прудников, П.В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

*e-mail: evstafievaik@stud.omsu.ru

В последние годы изучение тонких пленок значительно расширило представления о физической природе анизотропии ферромагнетиков, а также позволило выявить и исследовать разнообразные процессы перемагничивания, обнаружить новые физические явления. В работе [1] было выявлено, что мультислойные структуры проявляют свойства старения при медленной эволюции систем из неравновесного начального состояния [2].

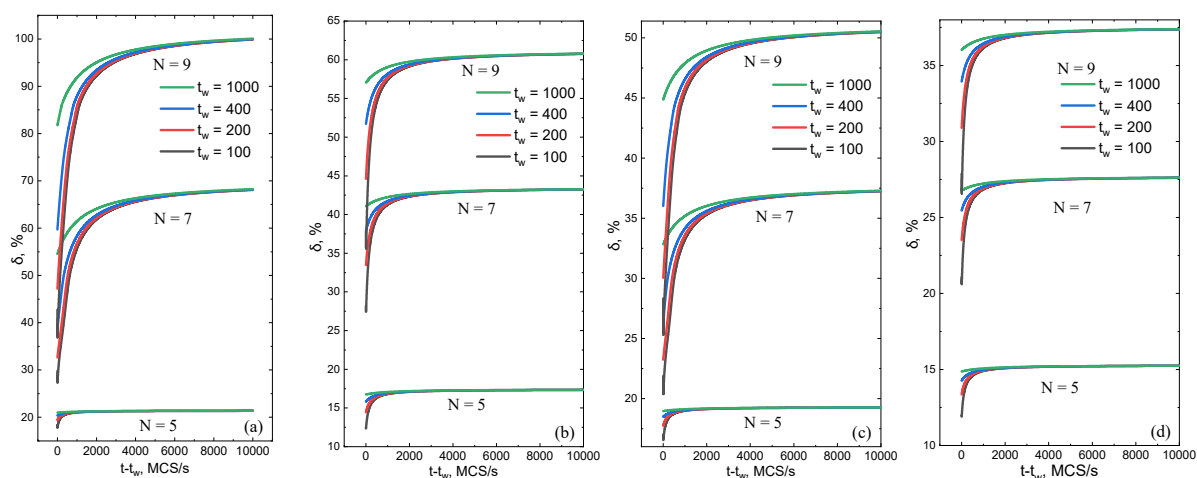


Рис. 1. Двухвременная зависимость магнитосопротивления в структуре с типом анизотропии легкая ось (a, b) и легкая плоскость (c, d): при эволюции из низкотемпературного начального состояния (a, c) и из высокотемпературного начального состояния (b, d) при температурах моделирования $T_c(N)/4$.

В данной работе исследовано влияние начальных состояний на эффекты старения в магнитосопротивлении мультислойных структур с толщинами $N = 5, 7, 9$ МС ферромагнитных ГЦК-пленок. Выявлено также влияние типа магнитной анизотропии на магнитосопротивление (рис. 1): эффекты старения сильнее проявляются в структурах с намагниченностью, перпендикулярной плоскости пленок, чем для структур с намагниченностью в плоскости пленок; значения магнитосопротивления при выходе на плато значительно выше для структур с намагниченностью, перпендикулярной плоскости пленок.

Существование данных неравновесных эффектов нужно учитывать при практическом использовании мультислойных структур в качестве приборов спинтроники с эффектом гигантского магнитосопротивления.

Исследование выполнено 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, А.Н. Пуртов, М.В. Мамонова, Письма в ЖЭТФ **104**, 11, 797 (2016).
2. В.В. Прудников, П.В. Прудников, М.В. Мамонова, УФН **187**, 8, 817 (2017).

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ МУЛЬТИСЛОЙНЫХ И СПИН-ВЕНТИЛЬНЫХ СТРУКТУР, ОПИСЫВАЕМЫХ ИЗОТРОПНОЙ И АНИЗОТРОПНОЙ МОДЕЛЬЮ ГЕЙЗЕНБЕРГА

А.С. Егорина*, П.В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

*e-mail: egorinaas@stud.omsu.ru

Исследование природы магнетизма в ультратонких пленках и мультислойных структурах имеет фундаментальный интерес из-за возникающих в магнитных переходных металлах Fe, Co и Ni размерной зависимости для магнитных характеристик, которые чувствительны к эффектам анизотропии [1].

Было исследовано влияние анизотропии на формы петель гистерезиса в мультислойных структурах (рис. 1), состоящих из двух ферромагнитных пленок, разделенных пленкой немагнитного металла, и в спин-вентильных структурах (рис. 2), состоящих из двух ферромагнитных пленок, разделенных пленкой немагнитного металла, к которым была добавлена еще антиферромагнитная пленка, фиксирующая ориентацию намагниченности в ферромагнитной пленке.

Для описания поведения гейзенберговских ферромагнитных пленок был использован гамильтониан спиновой системы в следующем виде:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \left\{ (1 - \Delta_2(N))(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z \right\} - \mathbf{h} \sum_i \mathbf{S}_i, \quad (1)$$

где $J_{ij} > 0$ — короткодействующее обменное взаимодействие между классическими спинами \mathbf{S}_i ($J_{ij} = J_1 > 0$, если S_i и S_j принадлежат одной пленке. $J_{ij} = J_2 < 0$, если S_i и S_j принадлежат соседним пленкам, $\langle i, j \rangle$ — суммирование только по ближайшим соседям); $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ — трехмерный единичный вектор; \mathbf{h} — внешнее поле, направленное вдоль оси Z; Δ_2 — параметр анизотропии. Зависимость константы анизотропии $\Delta_2(N)$ от толщины пленки $N = 3$ выбиралась в соответствии с работой [2] для CoCu(100).

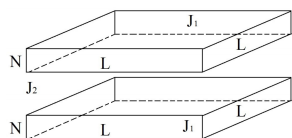


Рис. 1. Модель мультислойной структуры.

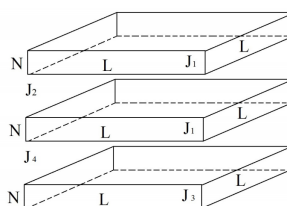


Рис. 2. Модель структуры спинового вентиля.

Результаты исследования указывают на существенное влияние анизотропии на изменение эффектов гистерезиса.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ. Для проведения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН», межведомственного суперкомпьютерного центра РАН и суперкомпьютерного центра МГУ им. М.В. Ломоносова.

1. П.В. Прудников, В.В. Прудников, М.А. Медведева, Письма в ЖЭТФ. – 2014. – Т.100. – С. 501-505.
2. P.V. Prudnikov, V.V. Prudnikov, M.V. Mamonova, N.I. Piskunova, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **482**, 201 (2019).

РАСЧЕТ РАВНОВЕСНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ТОНКИХ ГРАНУЛИРОВАННЫХ ПЛЕНОК МЕТОДАМИ МОНТЕ-КАРЛО

С.Н. Зайчикова*, П.В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

*e-mail: zaichikovas@stud.omsu.ru

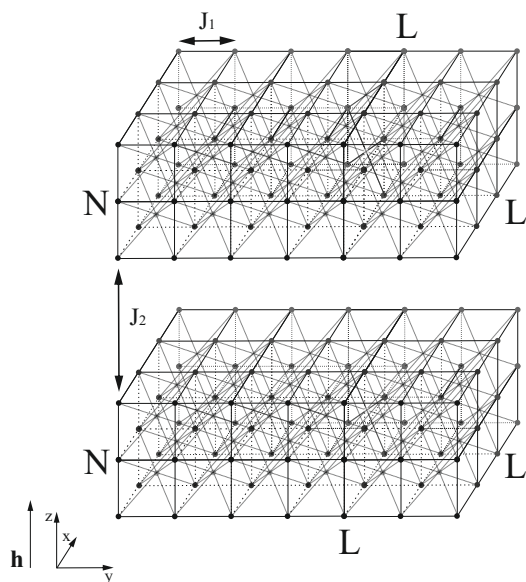


Рис. 1. Мультислойная магнитная структура, состоящая из тонких гранулированных пленок.

Гранулированные пленки — перспективный материал, физические свойства которого могут меняться в широких пределах (в зависимости от материала гранул и подложки, наличия дефектов и примесей) [1]. Исследование критического поведения тонких гранулированных пленок имеет существенное прикладное значение в области разработки материалов, на основе которых возможно создание более эффективных устройств записи, чтения и хранения информации. Одна из наиболее важных характеристик магнитного материала — критическая температура фазового перехода второго рода T_c . Для определения T_c мы исследуем поведение следующих равновесных характеристик: намагниченность, энергия, теплоемкость, магнитная восприимчивость и куммулянт Биндера четвертого порядка.

С точки зрения моделирования, мы рассматриваем гранулированную пленку как двумерную диэлектрическую матрицу с внедрёнными частицами ферромагнитного материала, которой соответствует двумерный массив гранул, представляющих собой трехмерный массив гейзенберговских спинов. Гамильтониан модели задается выражением:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \left[S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + (1 - \Delta) S_i^z S_j^z \right], \quad (1)$$

где $J_{ij} > 0$ — константа обменного взаимодействия между спинами; $\Delta \in [0.0; 1.0]$ — параметр анизотропии (анизотропия типа «легкая плоскость» [2]); S_i^x — проекция спина на соответствующую ось.

Показано, что мультислойные магнитные структуры, состоящие из тонких гранулированных пленок (см. рис. 1), демонстрируют эффекты фазового перехода второго рода. В процессе исследования были получены оценки критической температуры, а также времени релаксации намагниченности и энергии в решетке.

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

1. Н.В. Баранов и др., под редакцией В.О. Васьковского, Магнетизм наносистем на основе редкоземельных и $3d$ -переходных металлов. — Екатеринбург: Изд-во Уральского ун-та (2015).
2. В.В. Прудников, П.В. Прудников, А.С. Лях, Вестн. Ом. ун-та, **24**, 3, 39 (2019).

МЕХАНИЗМЫ НУКЛЕАЦИИ В ОДНОКОМПОНЕНТНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКЛАХ

Е.М. Кирова*, В.В. Писарев

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия

*e-mail: kirova@phystech.edu

В работе исследуется зарождение и рост кристаллических зародышей в пленке молибдена, заключенной между двумя аморфными стенками. Моделирование проводилось при помощи программного пакета для молекулярно-динамических расчетов LAMMPS. Использовался потенциал погруженного атома (EAM) [1]. Была выбрана система из 14000 атомов с использованием периодических граничных условий. Обработка результатов проводилась при помощи программы OVITO [2]. Исследование основано на построении двухпараметрической функции распределения кристаллических зародышей по размеру и параметру асферичности [3]. Продемонстрировано, что как в свободной, так и в ограниченной системах существуют два механизма роста кристаллов: присоединение атомов к самому большому зародышу из аморфной фазы и слияние самого большого кристаллического кластера с малыми кристаллитами (коалесценция). Показано, что мононуклеарный механизм (как в классической теории нуклеации) является доминирующим в расплаве, охлаждаемом с более медленной скоростью охлаждения. При увеличении скорости охлаждения более вероятным становится механизм коалесценции. Мы также наблюдаем образование долгоживущих кристаллических кластеров и демонстрируем, что аморфные стенки не влияют на их геометрические характеристики [4].

Исследование осуществлено в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

1. D.E. Smirnova, A.Yu. Kuksin, S.V. Starikov et al., *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **21**, 035011 (2013).
2. A. Stukowski, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **18**, 015012 (2009).
3. E.M. Kirova, V.V. Pisarev, *J. Cryst. Growth* **528**, 125266 (2019).
4. E.M. Kirova, V.V. Pisarev, *J. Phys.: Condens. Matter* **33**, 034003 (2021).

ВЛИЯНИЕ СТАРЕНИЯ НА СТРУКТУРУ, ФАЗОВЫЙ СОСТАВ, ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ХОЛОДНОКАТАНЫХ БИОСОВМЕСТИМЫХ СПЛАВОВ Ti – 39Nb – 5Zr и Ti – 39Nb – 5Zr – 2Sn

А.А. Корнев*, А.Г. Илларионов, Р.Н. Лиштван

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: alexander.korenev@urfu.ru

Сплавы на базе системы Ti – Nb – Zr на основе метастабильного β -твердого раствора широко используются для разработки медицинских имплантатов благодаря присутствию в этих сплавах только биосовместимых элементов и возможности получения за счет легирования и обработки низких значений модуля упругости (E), сопоставимых с его значениями для кортикальной кости (до 30 ГПа). В качестве дополнительного легирующего элемента в этих сплавах используют также олово, которое может влиять как на величину модуля упругости [1], так и на процессы распада при старении метастабильного β -твердого раствора, получаемого закалкой и часто подвергаемого холодной деформации, но имеющиеся данные о характере влияния олова на процессы распада неоднозначны. В связи с этим в работе изучены эволюция структурно-фазового состояния и изменение физико-механических свойств при старении биосовместимых сплавов титана Ti – 39Nb – 5Zr, Ti – 39Nb – 5Zr – 2Sn (содержание легирующих элементов в мас. %). Горячекатаные прутки из этих сплавов были подвергнуты закалке из β -области с 700°C, холодной прокатке с суммарной степенью деформации 85 % и старению при 400°C в течение 4, 16 и 64 часов. Для определения модуля упругости и микротвердости был использован метод микроиндентирования по методу Оливера и Фарра с помощью оборудования CSM Instruments.

В ходе рентгено-структурного анализа состаренных сплавов Ti – 39Nb – 5Zr, Ti – 39Nb – 5Zr – 2Sn установлено, что холоднодеформированный метастабильный β -твердый раствор распадается с выделением дисперсных частиц вторых фаз — α'' (после выдержки 4 часа), α'' и α (после выдержки 16 часов) и α -фазы (после выдержки 64 часа). Выделение вторых фаз при старении сплавов способствует обогащению β -фазы по ниобию, цирконию (оба сплава) и по олову (сплав Ti – 39Nb – 5Zr – 2Sn), обеспечивая постепенный рост периода решетки β -твердого раствора — a_β — по мере увеличения времени старения. При этом, согласно данным рентгеноструктурного анализа, объемная доля продуктов распада β -фазы при одинаковом времени старения выше в сплаве Ti – 39Nb – 5Zr, по сравнению со сплавом Ti – 39Nb – 5Zr – 2Sn, и соответственно значительно (по абсолютному значению) повышение периода a_β .

Рост объемной доли вторых фаз в исследуемых сплавах по мере увеличения времени старения с 4-х до 64 часов способствует как их дисперсионному упрочнению, так и повышению модуля упругости, обеспечивая возрастание микротвердости / модуля упругости с 250 HV (соответствует холоднокатаному состоянию обоих сплавов) / 56 ГПа и 62 ГПа (Ti – 39Nb – 5Zr и Ti – 39Nb – 5Zr – 2Sn соответственно) до уровня 420 HV / 70 ГПа (Ti – 39Nb – 5Zr) и 415 HV / 64 ГПа (Ti – 39Nb – 5Zr – 2Sn).

Таким образом, присутствие 2% олова в сплаве Ti – 39Nb – 5Zr – 2Sn способствует при температуре старения 400°C замедлению процессов распада β -твердого раствора и приводит к получению более низких значений микротвердости и модуля упругости, по сравнению со сплавом Ti – 39Nb – 5Zr.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-13-00220).

1. M. Geetha A.K. Singh, R. Asokamani, Progress in Materials Science, 398 (2008).

ВЛИЯНИЕ РЕЖИМОВ КРАТКОВРЕМЕННОГО ОТЖИГА НА СТРУКТУРУ И МОДУЛЬ УПРУГОСТИ ХОЛОДНОДЕФОРМИРОВАННОГО БИОСОВМЕСТИМОГО ТИТАНОВОГО СПЛАВА Ti – 39Nb – 5Zr

А.А. Коренев*, А.Г. Илларионов, Н.С. Кочешева

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: alexander.korenev@urfu.ru

При разработке биосовместимых титановых сплавов модуль упругости является одной из важнейших эксплуатационных характеристик, и он должен быть близок к модулю упругости кости для предотвращения «эффекта экранирования напряжений». Достижение оптимального значения модуля упругости зависит кроме химического и фазового состава сплава от способа его обработки и формируемой при этом кристаллографической текстуры [1]. В работе [2] для холоднодеформированного сплава Ti – 24Nb – 3Al в ат. % (Ti – 38, 4Nb – 1, 4Al в мас. %) был опробован кратковременный отжиг, позволяющий получить определенное анизотропное состояние в сплаве с низким модулем упругости за счет формирования в сплаве текстуры рекристаллизации $\langle 110 \rangle \{112\}_\beta$ при частичном сохранении текстуры деформации $\langle 110 \rangle \{001\}_\beta$. В данной работе методами оптической микроскопии, рентгеноструктурного анализа (РСФА), микроиндентирования по методу Оливера и Фарра на оборудовании CSM Instruments было исследовано влияние температурно-временных параметров кратковременного отжига на развитие процессов рекристаллизации и изменение физико-механических свойств в холоднокатаном листе из биосовместимого титанового сплава Ti – 39Nb – 5Zr (мас. %) на основе β -твердого раствора. Отжиг проводили в воздушной атмосфере в β -области при 700, 850, 1000°C с выдержкой 2 минуты и дополнительно в течение 8 и 32 минут при 700°C.

Установлено, что как увеличение температуры отжига с 700 до 1000°C (выдержка 2 минуты), так и времени выдержки с 2-х до 32 минут при 700°C способствует активизации в сплаве процессов рекристаллизации с формированием частично рекристаллизованной β -структуры с равноосными β -зернами с сохранением части деформированных вытянутых β -зерен после выдержки 2 минуты при 700 и 850°C, и полностью рекристаллизованной β -структуры после отжигов 1000°C с выдержкой 2 минуты, 700°C с выдержками 8 и 32 минуты. Повышение температуры и времени выдержки при отжиге способствует увеличению размеров образующихся рекристаллизованных β -зерен. Показано, что более полное развитие рекристаллизационных процессов при повышении температуры отжига с 700 до 1000°C и увеличении времени отжига при 700°C способствует снижению в холоднодеформированном сплаве микротвердости с исходных 250 HV до 225...195 HV и модуля упругости с исходных 56 ГПа до 52...43 ГПа. Получено, что наиболее низкие значения модуля упругости в сплаве формируются после отжига в течение 2 минут при 1000°C (43 ГПа) и 32 минут при 700°C (45 ГПа).

По данным РСФА отмечено, что снижение модуля упругости после отжига коррелирует с уменьшением интенсивности основной текстурной компоненты $\{001\}\langle 110 \rangle$ β -фазы, фиксируемой в холоднодеформированном листе, и повышением интенсивности компоненты $\{112\}\langle 110 \rangle$ по мере увеличения температуры и времени выдержки, что согласуется с данными работы [2].

Таким образом, проведение кратковременного β -отжига холоднодеформированного биосовместимого сплава Ti – 39Nb – 5Zr способствует снижению модуля упругости, что связано с изменением текстурного состояния в сплаве.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-13-00220).

1. M. Geetha A.K. Singh, R. Asokamani, Progress in Materials Science, 398 (2008).
2. H. Hosoda, Y. Kinoshita, Y. Fukui, Materials Science and Engineering A **438-440**, 870 (2006).

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ КОЛИЧЕСТВА НИТРИДОВ ТИТАНА И СУЛЬФИДОВ ТИТАНА И МАРГАНЦА, ОБРАЗУЮЩИХСЯ ПРИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ СТАЛИ

Е.И. Корзунова*, В.В. Попов, И.И. Горбачев

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: korzunova1996@gmail.com

На фоне развития новых отраслей промышленности и индустрии в целом к механическим характеристикам конструкционных материалов, таким как прочность, ударная вязкость, холодостойкость, предъявляются всё более высокие требования. Эти характеристики зависят от ряда факторов, в том числе от частиц, выделяющихся при кристаллизации сталей. В связи с этим при оптимизации составов сталей необходимо уметь прогнозировать выделение вторых фаз на данной стадии термообработки.

Для этих целей в данной работе был реализован алгоритм, предложенный в [1], который основывается на последовательном расчёте псевдоравновесных состояний сплава от температуры начала кристаллизации до полной кристаллизации. На каждом шаге расчёта предполагается, что металлические легирующие элементы и S остаются в выделившихся фазах и твёрдом растворе, а С и N перераспределяются в соответствии с равновесным состоянием для температуры на текущем шаге. Для расчётов в данной работе термодинамические параметры были обновлены с учётом актуальных данных по термодинамике. Алгоритм учитывает возможность выделения TiN, TiS и MnS.

В качестве примера на рис. 1 приведены результаты расчётов для низколегированной стали 10Г2ФБЮ класса прочности К56, производимой на ПАО «ММК». Целью данных расчётов было исследование влияния содержания легирующих элементов — Ti, N и S — в пределах, заданных техническими условиями (ТУ), в стали на количество выделяющихся TiN, TiS и MnS и количество Ti, остающегося в твёрдом растворе после завершения кристаллизации. Средний состав стали, согласно ТУ, был взят следующий (все в масс. %): 0.1% С, 1.5% Mn, 0.4% Si, 0.004% S, 0.03% Ti, 0.008% N.

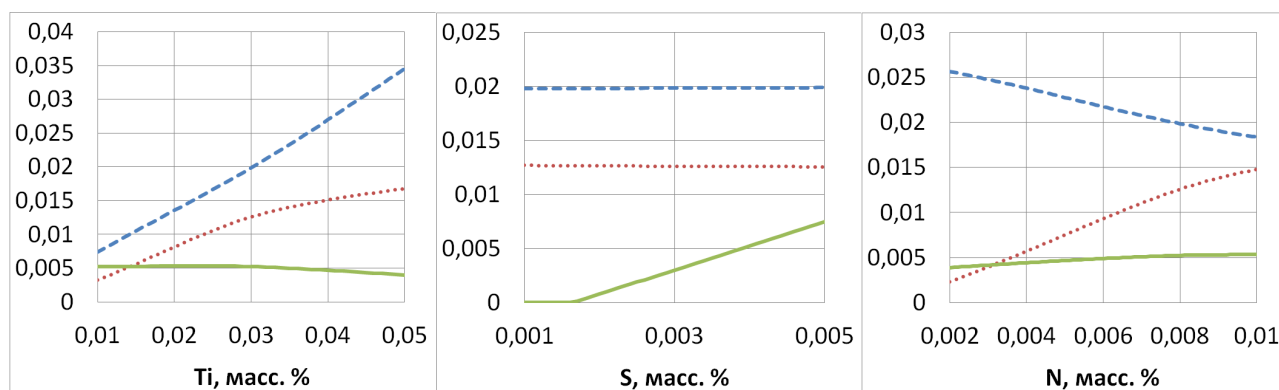


Рис. 1. Изменение фазового состава сплава после завершения кристаллизации в зависимости от количества легирующих элементов в стали. «- -» — количество Ti, оставшегося в твёрдом растворе, «•••» — количество TiN, «—» — количество MnS.

Работа выполнена в рамках государственного задания «Функция».

1. В.В. Попов, Моделирование превращений карбонитридов при термической обработке сталей. – Екатеринбург: УрО РАН (2003).

ИЗУЧЕНИЕ СИСТЕМЫ Ni – TiSe₂ МЕТОДОМ ЭДС НА МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ЯЧЕЙКАХ M|M⁺|Ni_xTiSe₂ (M = Cu, Na)А.Ю. Кузнецова^{1,3*}, Е.А. Суслов^{2,3}, А.Н. Титов^{1,3}¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия²Уральский государственный аграрный университет, Екатеринбург, Россия³Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*e-mail: cuznecova89634485295@mail.ru

Метод ЭДС хорошо показал себя при изучении слоистых интеркалатных соединений вида M_xMeX_2 (где M — интеркалируемый металл, Me — $3d$ -элемент, X — халькоген). Известно, что при интеркаляции в межслоевое пространство возможно возникновение различных фаз, разделение которых методом рентгеновской дифракции достаточно проблематично. Данный метод является простым и удобным инструментом, позволяющим получить информацию о термодинамических функциях различных объектов и систем. Для интеркалированных соединений, обладающих широкими областями растворимости интеркалируемого компонента, метод является незаменимым при исследовании фазовых диаграмм, термодинамических функций, диффузионной подвижности и пр. При изучении систем, где интеркалант обладает низкой подвижностью, например Fe – TiSe₂ или Ni – TiSe₂, метод ЭДС в комплексе со структурными исследованиями позволяет получить информацию об электронной структуре.

Вот почему в работе [1] авторами был предложен и обоснован метод ЭДС с применением модифицированных электрохимических ячеек вида Li|Li⁺|Fe_xTiSe₂. По характеру зависимости $E - f(x)$ для изучаемой системы было определено и подтверждено спектральными методами, что при составе Fe_{0.25}TiSe₂ происходит изменение природы связей. Разрываются связи Ti – Fe – Ti, но при этом происходит образование новой связи Fe – Fe. При таком переходе происходит скачкообразное изменение значений ЭДС при увеличении содержания железа. Это объясняется тем, что железо Fe²⁺, имеет конфигурацию $3d^6$ и заполненные орбитали $3d_{z^2}$, $3d_{x^2-y^2}$ и $3d_{xy}$, которые направлены только на атом титана и другие атомы железа. В системе Ni – TiSe₂ ожидается аналогичный переход, который может вызвать образование связей Ti – Ni – Ti и Ni – Ni при различных концентрациях никеля, с одной стороны. Но Ni²⁺, в отличие от Fe²⁺, имеет конфигурацию $3d^8$ с двумя полузаполненными орбиталями $3d_{xz}$ и $3d_{yz}$, направленными на атомы селена. Это приведет к сильному участию Se $4p$ -орбиталей в формировании новых состояний при упорядочении никеля, с другой [2]. Для изучения этого вопроса синтезированы составы Ni_xTiSe₂. Измерения ЭДС выполнены на модифицированных ячейках $M|M^+|Ni_xTiSe_2$ ($M = Cu, Na$). В качестве электролита использовались безводные растворы CuI в ацетонитриле и NaClO₄ в пропиленкарбонате. В отличие от системы Fe_xTiSe₂ в системе Ni_xTiSe₂ не наблюдается скачка ЭДС в области изменения наклона. Это различие связано с изменением электронной структуры, а также с направленностью связей Ni²⁺ на атомы селена.

Работа выполнена при финансовой поддержке научного проекта РФФИ № 18-32-20141.

1. A.S. Shkvarin *et al.*, RSC advances **6**, 106527 (2016).
2. A.S. Shkvarin *et al.*, Inorganic chemistry **57**, 5544 (2018).

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКОМ СПЛАВЕ NiMnIn

Д.Д. Кузнецов^{1*}, Е.И. Кузнецова², А.В. Маширов¹, А.С. Лошаченко³, Д.В. Данилов³,
Г.А. Шандрюк⁴, В.Г. Шавров¹, В.В. Коледов¹

¹Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия

²Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

³IRC Nanotechnology, Research Park, Sankt-Petersburg, Russia

⁴Институт нефтехимического синтеза имени А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия

*e-mail: kuznetsov.dmitry89@gmail.com

В сплаве номинального состава Ni₄₆Mn₄₁In₁₃ методами ДСК (дифференциальная сканирующая калориметрия), ПЭМ (просвечивающая электронная микроскопия) изучались фазовые превращения (ФП), а также измерялась намагничённость образца в зависимости от температуры при помощи вибрационного магнитометра. Исследовалось влияние толщины пластины на температуру начала мартенситного превращения (МП).

Температуры метамагнитоструктурного фазового перехода определялись по данным зависимости намагничённости от температуры (в диапазоне 50–400 К) в магнитных полях 50 Э, 10, 20, 30 кЭ и с помощью дифференциальной сканирующей калориметрии в температурном интервале 100–313 К (данные в скобках): $M_s = 226$ К (253 К), $M_f = 199$ К (164 К), $A_s = 219$ К (203 К), $A_f = 240$ К (236 К). С помощью метода ДСК была определена точка Кюри $T_c = 323$ К (при охлаждении из аустенитной фазы) и 329 К (при нагреве из мартенситной фазы).

Установлена зависимость температуры начала мартенситного превращения (МП) от толщины образца в виде клинообразной пластины. Обнаружено, что мартенситная фаза при прямом мартенситном превращении, в тонких областях пластины, начинает появляться при 215 К (то есть при более низких температурах, чем в объёмном материале), дальнейшее снижение температуры приводит к расширению мартенситной области, однако, превращение блокируется на расстоянии 600 нм от края образца.

Методом ПЭМ исследовались МП, промежуточные фазовые превращения и модулированные структуры в нестехиометрическом сплаве NiMnIn. Усреднённый локальный состав в исследуемой области по данным EDX Ni_{41.98}Mn_{37.65}In_{13.00}O_{7.37}. Превращение из высокотемпературной аустенитной фазы $L2_1$ в промежуточную (предмартенситную) фазу характеризовалось появлением диффузного рассеяния в виде тяжёлой на дифракционных картинах, сопровождающееся появлением твидового контраста в виде интенсивных тонких полос на микрофотографиях. Периодичность, погасания и усиления наблюдаемого диффузного рассеяния позволяют соотнести его с фононными колебаниями атомов, периодически искажающими исходную кристаллическую решетку. При дальнейшем охлаждении сплава на дифракционной картине присутствуют рефлексы принадлежащие, как аустенитной, так и мартенситной фазам. Ниже температуры M_s происходит сдвиговая перестройка в структуру мартенситной фазы. Таким образом, сплав испытывает при охлаждении ступенчатое превращение $L2_1 \rightarrow$ предмартенситная фаза \rightarrow мартенсит.

Работа выполнена при поддержке IRC Nanotechnology, Research Park, Sant-Petersburg, Russia. Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда (проект №17-19-01748).

ПЛАЗМОНИКА МЕТАПОВЕРХНОСТЕЙ НА ОСНОВЕ 2D МАТЕРИАЛОВ И МАТЕРИАЛОВ С ФАЗОВЫМИ ПЕРЕХОДАМИ

Д.А. Кузьмин^{1*}, И.В. Бычков¹, М.О. Усик¹, О.Г. Харитонова¹, В.А. Толкачев¹, В.Г. Шавров²¹Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия²Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия

*e-mail: kuzminda@csu.ru

В настоящее время огромное внимание исследователей привлекают электродинамические свойства наноструктур на основе двумерных (2D) — материалов. Их использование открывает перспективы для их практического применения в элементах микро и наноэлектроники и устройствах обработки информации [1-3].

Другим, активно развивающимся в настоящее время, направлением являются метаповерхности - 2D аналоги метаматериалов. Метаповерхности позволяют управлять фронтом и фазой электромагнитной волны и могут стать хорошей заменой линзам [4, 5]. Особый интерес вызывают так называемые "гиперболические метаповерхности которые поддерживают направленное распространение плазмон-поляритонов (ПП) [6-8]. Однако, для реализации устройств передачи и обработки информации, основанных на метаповерхностях, необходимо иметь возможность контролировать характеристики поверхностных ПП. Этого можно добиться путем существенного изменения электродинамических свойств структуры. Для этого может оказаться полезным внедрение в метаповерхность материалов с фазовыми переходами (ФП). Известен ряд работ, в которых показана возможность использовать диоксид ванадия для реализации разного рода метаповерхностей [9, 10]. Несмотря на выдающиеся результаты, авторы не исследуют возможности применения таких метаповерхностей для плазмоники.

В настоящей работе получено дисперсионное уравнение поверхностных ПП, распространяющихся в структуре метаповерхность на основе лент графена — диэлектрик — материал с ФП (VO_2). Показана возможность взаимодействия ПП графеновой метаповерхности с ПП VO_2 в проводящей фазе в ТГц диапазоне частот. Изучено влияние VO_2 на изочастотные контуры ПП. Показано, что при определенных параметрах метаповерхности, ФП в VO_2 может привести к изменению изочастотного контура с гиперболического на эллиптический.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (гранты №№ 20-07-00466, 20-37-70038, 19-07-00246), Министерства высшего образования и науки РФ (ГЗ № 075-00250-20-03).

1. F.N. Xia *et al.*, Nat. Photon. **8**, 899 (2014).
2. K.S. Novoselov *et al.*, Science **353**, 9439 (2016).
3. A. Krasnok *et al.*, Opt. Exp. **26**, 15972 (2018).
4. М.А. Ремнев *и др.*, УФН, **2**, 169 (2018).
5. L. Zhang *et al.*, Adv. Optical Mater. **4**, 818 (2016).
6. J.S. Gomez-Diaz *et al.*, Phys Rev Lett. **114**, 233901 (2015).
7. J.S. Gomez-Diaz *et al.*, Opt Mater Expr. **5**, 246047 (2015).
8. A. Nemilentsau *et al.*, Phys. Rev. Lett. **116**, 066804 (2016).
9. F. Ligmajer *et al.*, ACS Photonics, **57**, 2561 (2018).
10. Y. Kim *et al.*, Nano Lett. **19**, 3961 (2019).

ТЕРМОДИНАМИКА ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ.
УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ

Д.А. Мирзиярова*, А.В. Мокшин

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

*e-mail: mirziyarova_diana@mail.ru

Как известно, практически все термодинамические свойства газов воспроизводятся уравнением состояния Ван-дер-Ваальса или же ему подобными уравнениями. На основе этого уравнения можно оценить критическую точку (температуру, давление, плотность) системы, рассчитать термические и калорические коэффициенты, такие как изотермическая сжимаемость, коэффициент объемного расширения и т.д. В случае щелочных металлов в газовой фазе ситуация оказывается нетривиальной. Так, анализ доступных на сегодняшний день экспериментальных данных для давления и плотности при различных температурах этих систем (литий, натрий, калий, рубидий, цезий) обнаруживает несостоятельность в воспроизведении этих данных известными уравнениями состояния [1].

С математической точки зрения, восстановление уравнения состояния по известным экспериментальным данным представляет собой задачу установления взаимосвязи вида $f(p, \rho, T)$ между термодинамическими параметрами: давлением p , плотностью ρ и температурой T . При этом данная взаимосвязь должна выполняться на достаточно широких интервалах значений этих термодинамических параметров [2].

В настоящей работе показано, что уравнение состояния щелочных металлов в газовой фазе может быть представлено в аналитическом виде, который отличен от уравнения состояния Ван-дер-Ваальса, но, тем не менее, представляет собой обобщение уравнения состояния идеального газа. Получено три уравнения состояния, которые воспроизводят экспериментальные данные с высокой точностью. Примечательно, что эти уравнения являются общими для всех рассмотренных систем, что, кроме всего прочего, непосредственно указывает на реализацию концепции термодинамического подобия [3-5]. Полученные уравнения состояния можно использовать в непосредственных теоретических расчетах и в оценке различных физических свойств щелочных металлов: для определения термических коэффициентов, механических констант и т.д., для определения термодинамических свойств в областях экстремально высоких температур.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-02-00407.

1. Н.Б. Варгафтик, Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей, М.: Наука (1972).
2. G. Ihm, Y. Song, E.A. Mason, J. Chem. Phys. **94**, 3839 (1991).
3. И.В. Александров, В.Н. Качинский, И.Н. Макаренко, С.М. Стишов, ЖЭТФ **38**, 336 (1982).
4. F. Yousefia, H. Karimi, Z. Gandomkar, Fluid Phase Eq. **370**, 43 (2014).
5. H. Eslami, High Pres. **33**, 237 (2001).

ЭФФЕКТ ВОЗНИКНОВЕНИЯ АВТОКОЛЕБАНИЙ В СВОБОДНО ПОДВЕШЕННОЙ ЛЕНТЕ СПЛАВА Ti_2NiCu ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА

Е.В. Морозов*, В.В. Коледов, В.Г. Шавров

Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия

*e-mail: evgvmorozov@gmail.com

В последние годы огромный интерес вызывает создание и изучение новых функциональных материалов. Много работ посвящено миниатюрным и быстродействующим актюаторам на основе сплавов с термоупругим мартенситным переходом и эффектом памяти формы (ЭПФ), множество работ посвящено изучению эластокалорического эффекта (ЭКЭ) в этих сплавах, который, по существу, является эффектом, обратным ЭПФ и, как предполагается, может быть основой новой технологии твердотельного охлаждения.

Анализ мировой литературы показывает, что исследования аморфных сплавов и аморфно-кристаллических композитов привлекают большое внимание [1-4]. В работе [1] аморфизация металлов приводит к повышению их прочности. В работе [5] говорится об улучшении коррозионной стойкости при аморфизации металлов.

Авторами работы был замечен неожиданный эффект возникновения автоколебаний в свободно подвешенной ленте сплава Ti_2NiCu под воздействием постоянного электрического тока. При нагрузке до 1.2 МПа и при токе величиной от 0.7 А до 1 А наблюдается эффект возникновения колебаний в аморфной ленте толщиной 40 мкм, шириной 1.5 мм и длиной свыше 25 см. При более высоких значениях силы тока лента начинает отжигаться и переходить в кристаллическую аустенитную фазу сплава Ti_2NiCu . При значениях тока менее 0.7 А колебания не наблюдались. Если нагрузка превышает 1.2 МПа то колебания не наблюдаются.

При проведении аналогичного эксперимента на отожженном образце этого же сплава и тех же геометрических размеров колебания не наблюдаются. Для наглядного подтверждения эффекта были взяты аморфные ленты сплавов Ni – Fe – В, Ni – Fe – Co – Sr – В и $Co_{67}Fe_4B_{12}Si_{13}Cr_4$. В этих сплавах также наблюдался эффект колебаний аморфных быстро-закаленных лент при протекании через них постоянного тока.

При изучении эффекта колебаний быстрозакаленных аморфных лент заметно, что имеют место два типа колебаний. Первый тип колебаний — это колебания маятника. Второй тип — это колебания подобно струне, причем колебания второго типа происходят в плоскости ленты.

Механизм возникновения колебаний заключается в следующем. При достижении силы постоянного тока критической величины, при которой появляются осцилляции, сначала появляются колебания первого типа. При некотором ожидании раскачивающаяся лента начинает дрожать и возникают колебания второго типа. При дальнейшем повышении силы тока лента продолжает поддерживать оба типа колебаний, при понижении же силы тока колебания исчезают. Авторами предложены физические модели, объясняющие эффект.

Работа выполнена при поддержке Гранта РФФИ № 17-19-01748.

1. A. Inoue, *Acta mater.* **48**, 1, 279 (2000).
2. Z. Lu et al., *J. Iron Steel Res. Int.* **23**, 1, 37 (2016).
3. L. Zuo et al., *J. Alloys Compd.* **707**, 148 (2017).
4. K. Ziewiec et al., *Mater. Sci. Technol.* **1** (2019).
5. H. Dai et al., *Appl. Sci.* **8**, 6, 956 (2018).

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА НА ОБЪЕМНО-ЦЕНТРИРОВАННОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

К.Ш. Муртазаев*, А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев, Д.Р. Курбанова

Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

*e-mail: 5kurban@mail.ru

В настоящее время в физике конденсированного состояния повышенный интерес представляют исследования магнитных и термодинамических свойств фрустрированных спиновых систем [1,2]. Это связано с тем, что основное состояние системы сильно вырождено при наличии фрустраций. Строго и последовательно на основе микроскопических гамильтонианов такие системы могут быть изучены методами Монте-Карло (МК) [3,4]. Репличный алгоритм метода МК, безусловно, является мощным аппаратом для решения таких задач. Поэтому в данном исследовании был использован высокоэффективный репличный обменный алгоритм метода МК. 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:

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

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 данной работе рассматривается случай, когда $r = |J_2|/|J_1| = 1.0$.

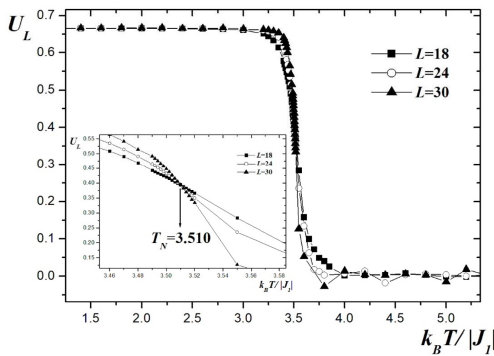


Рис. 1. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T/|J_1|$ для разных L при $H = 6$.

Рассмотрен интервал значений величины магнитного поля $0.0 \leq H \leq 6.0$. Установлено, что для всех значений магнитных полей наблюдается фазовый переход второго рода.

Расчеты проводились для систем с периодически граничными условиями и линейными размерами $2 \times L \times L \times L = N$, $L = 18 \div 90$, где L — размер решетки, N — число спинов в системе. Величина значений внешнего магнитного поля менялась в интервале $0.0 \leq H \leq 6.0$. Для анализа природы и характера ФП использовались гистограммный метод и метод кумулянтов Биндера [5]. При фазовом переходе второго рода кривые для разных L имеют четко выраженную точку пересечения, см. рис.

Выполнено исследование трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей, а также внешнего магнитного поля.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90079-аспиранты, № 19-02-00153-А и № 18-32-00391-мол_а.

1. А.З. Пагашинский, В.Л. Покровский, Флуктуационная теория фазовых переходов, М.: Наука (1982).
2. Ш. Ма, Современная теория критических явлений, М.: Мир (1980).
3. А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Кассан-Оглы, Д.Р. Курбанова, ЖЭТФ **147**, 1 (2015).
4. А.К. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiiev, Physica B: Condensed Matter **476**, 1 (2015).
5. А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, К.Ш. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Бадиев, ФТТ **62**, 2 (2020).

КИНЕТИКА ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В СПЛАВАХ Fe – Ga

О.О. Павлухина*, В.В. Соколовский, В.Д. Бучельников², М.А. Загребин², М.В. Матюнина²,
О.Н. Мирошкина², Д.Р. Байгутлин²

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*e-mail: pavluhinaoo@mail.ru

Сплавы на основе Fe – Ga привлекают внимание ученых по всему миру благодаря своим уникальным магнитным и механическим свойствам [1,2]. В работе [3] исследованы температуры перехода порядок – беспорядок для ОЦК сплавов Cu – Zn – Al, в которых наблюдается эффект памяти формы. В работе данные, полученные методом Монте-Карло, сопоставлены с экспериментальными данными. Авторы работы получили хорошее согласие данных о температурах перехода, полученных в результате моделирования методом Монте-Карло, и экспериментальных данных, что свидетельствует о том, что данный метод может быть использован для моделирования фазовых превращений.

В нашей работе исследованы переходы порядок – беспорядок для сплава Fe – Ga. Также исследовано влияние скорости изменения температуры на фазовые переходы в данном сплаве. Для моделирования переходов порядок – беспорядок в данной работе был выбран метод Монте-Карло с использованием модели Блуме – Эмери – Гриффитса. При расчетах магнитных свойств рассматривалась кристаллическая решетка с периодическими граничными условиями. При моделировании использовалась трехмерная кубическая решетка, состоящая из атомов железа и галлия. Так как для моделирования был выбран процесс охлаждения, то на начальном этапе атомы железа и галлия были распределены в решетке хаотично, что соответствует распределению атомов в высокотемпературной фазе A2, которая наблюдается экспериментально в исследуемом сплаве. Далее задача решалась с помощью стандартного алгоритма Метрополиса. Для вычисления параметров порядка на каждом шаге по температуре на первом этапе производилось формирование начальной конфигурации расположения атомов в решетке, затем выбираем произвольные узлы в решетке и вычисляем энергию для начальной конфигурации и для конфигурации, когда эти атомы поменяются местами. Затем происходит сохранение выгодной конфигурации. Повтор всего процесса выполняется до тех пор, пока не сгенерируется число конфигураций, равное числу всех узлов решетки.

Полученные в ходе моделирования данные показывают, что при высокой скорости охлаждения наблюдаются фазовые переходы $A2 \rightarrow A2 + B2 \rightarrow A2$. При низкой скорости охлаждения наблюдается большее количество фаз, что согласуется с экспериментальными данными.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках проекта № 17-72-20022.

1. A.E. Clark *et al.*, J. of Applied Physics **93**, 8621 (2003).
2. Y. Zhang, R. Wu, IEEE Transactions on Magnetics **47**, 4044 (2011).
3. F. Lanzini *et al.*, Physical Review B **77**, 134207 (2008).

К МОЛЕКУЛЯРНО-СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ФЕРРОМАГНИТНЫХ
ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СУСПЕНЗИЙ

Д.А. Петров

Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Россия
e-mail: petrovda@bk.ru

В 2013 году была опубликована статья [1], в которой сообщалось об успешном получении жидкого ферромагнитного состояния вещества. Этого удалось достичь путём создания суспензии дискообразных гексаферритовых пластинок в нематическом жидком кристалле. Уникальное сочетание ферромагнитных и жидкокристаллических свойств приводит к появлению совершенно нового класса нанокompозитных материалов, которые могут найти многочисленные применения. В настоящее время теоретическое описание ферромагнитных жидкокристаллических суспензий в основном ограничено только макроскопическими подходами [1,2], где рассматриваются индуцированные магнитным полем переходы Фредерикса (см., например, [3]). Однако всё ещё нет чёткого понимания того, какие механизмы приводят к образованию устойчивого ферромагнитного упорядочения дисперсных частиц в жидкокристаллической матрице, как наночастицы воздействуют на ориентационный порядок жидкокристаллической среды и термодинамическую устойчивость упорядоченной фазы. Ответы на эти вопросы может дать только статистическая теория.

Настоящая работа посвящена созданию молекулярно-статистической теории среднего поля суспензии анизометрических магнитных частиц в жидком кристалле, которая дает возможность описать спонтанное ферромагнитное упорядочение примесных частиц даже в отсутствие внешнего магнитного поля. Впервые рассматриваются два механизма, обеспечивающие ориентационную связь молекул жидкого кристалла и примесных частиц. Первый немагнитный механизм был рассмотрен ранее [4] и связан с анизотропией формы частиц. Второй механизм отвечает за возникновение спонтанной макроскопической намагниченности суспензии и рассматривается впервые. Для описания ориентационного упорядочения молекул нематика и дисперсных анизометричных наночастиц используются симметричные бесследовые тензоры второго ранга, построенные на единичных векторах вдоль длинных осей молекул и на векторах нормалей к поверхности нанопластин. Путем статистического усреднения этих тензоров получены макроскопические тензоры ориентации жидкокристаллической и примесной подсистем. Дополнительно учитывается векторный параметр порядка, позволяющий описать спонтанную намагниченность примесных частиц. Наряду с изотропной фазой теория предсказывает существование различных упорядоченных фаз, отличающихся типом магнитного упорядочения феррочастиц: ферромагнитная, антиферромагнитная и суперпарамагнитная нематические фазы [5].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 19-02-00231).

1. A. Mertelj *et al.*, *Nature* **504**, 237 (2013).
2. S.V. Burylov, Yu.L. Raikher, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **258**, 123 (1995).
3. A.N. Zakhlevnykh, D.A. Petrov, *J. Mol. Liq.* **198**, 223 (2014).
4. Yu.L. Raikher *et al.*, *Soft Matter* **9**, 177 (2013).
5. D.A. Petrov, *Phys. Rev. E* **101**, 030701(R) (2020).

МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА ПЕРЕОХЛАЖДЕННЫХ ЖИДКОСТЕЙ И СТЕКОЛ

В.В. Писарев

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия
e-mail: vpisarev@hse.ru

Доклад посвящен особенностям, обнаруженным в динамических свойствах жидкостей при стекловании. Исследования методом молекулярной динамики (МД) показывают резкие изменения ряда свойств в одном и том же температурном интервале, что позволяет говорить о самосогласованном наборе критериев стеклования жидкости. МД моделирование проводилось для пленки со свободной границей, благодаря чему автоматически поддерживается околонулевое давление. Для изучения процесса стеклования пленка охлаждается с постоянной скоростью $q = |dT/dt|$.

Продемонстрировано, что в процессе быстрого охлаждения металлических расплавов при близких температурах происходят изменения удельной теплоемкости, коэффициента теплового расширения и наблюдается излом зависимости высоты первого минимума парной корреляционной функции от температуры [1, 2].

Изучение методом молекулярной динамики автокорреляционных функций (АКФ) сдвигового напряжения [3] и коэффициента корреляции между смещениями двух частиц [4] позволяют напрямую обнаружить в МД расчетах, что аморфное состояние начинает проявлять свойства твердого состояния. На АКФ сдвиговых напряжений выявляется поведение, демонстрирующее появление поперечных звуковых волн в аморфной пленке. Корреляции смещений $CC(R)$ в парах частиц, находящихся на заданном расстоянии R друг от друга, ведут себя качественно различно при температурах выше и ниже температуры стеклования. В жидкости выше температуры плавления степень корреляции смещений монотонно падает в зависимости от расстояния между частицами в паре. В кристалле наблюдаются максимумы и минимумы в этих зависимостях, соответствующие различным координационным сферам. При переохлаждениях, соответствующих полученным в [1-3] интервалам стеклования, происходит качественный переход от типичной для жидкости монотонно спадающей $CC(R)$ к немонотонной зависимости, характерной для кристалла. Таким образом, найден неизвестный ранее критерий стеклования, показывающий переход к твердому аморфному состоянию.

Зависимость $T_g(q)$ возрастающая, что говорит о том, что переход не является фазовым, а представляет неравновесный структурный переход особого рода.

Исследование осуществлено в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

1. L.N. Kolotova, G.E. Norman, V.V. Pisarev, J. Non-Cryst. Solids **429**, 98, (2015).
2. E.M. Kirova, V.V. Pisarev, J. Phys.: Condens. Matter (2020). <https://doi.org/10.1088/1361-648X/abba6b>
3. E.M. Kirova, G.E. Norman, V.V. Pisarev, Comput. Mater. Sci. **172**, 109367 (2020)
4. D.Iu. Fleita, G.E. Norman, V.V. Pisarev, J. Phys.: Condens. Matter **32**, 214009 (2020)

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА
АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$

М.К. Рамазанов^{1,2*}, А.К. Муртазаев^{1,2}, М.А. Магомедов^{1,2}, М.К. Мазагаева¹

¹Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

²ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

*e-mail: sheikh77@mail.ru

Классические антиферромагнитные спиновые системы, имеющие правильную двумерную треугольную решетку, образуют 120-градусную спиновую структуру в нулевом поле. Спиновая структура, природа фазовых переходов, термодинамические и магнитные свойства таких систем зависят от внешнего магнитного поля.

Двумерные антиферромагнетики на треугольной решетке широко изучалась как теоретически [1,2], так и экспериментально [3,4]. $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ является примером квазидвумерного антиферромагнетика на треугольной решетке. Для моделирования этого соединения на основе метода Монте-Карло может быть использована модель Гейзенберга.

В данной работе мы исследуем магнитные и термодинамические свойства квазидвумерного антиферромагнетика $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ в различных магнитных полях методом Монте-Карло. Для описания данного соединения с учетом всех его характеристик нами был использован гамильтониан классической модели Гейзенберга, который можно записать в следующем виде

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) - J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_l) - D \sum_{\langle i \rangle} (S_i^z)^2 - \mathbf{H} \sum_{\langle i \rangle} \mathbf{S}_i, \quad (1)$$

где $\mathbf{S}_i (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ — трехкомпонентный единичный вектор (классический спин), \mathbf{H} — магнитное поле (его величина выражается в единицах $|J_1|$). Угловые скобки $\langle \dots \rangle$ в данной формуле означают суммирование спинов с индексами i, j, l . Первый член в формуле (1) учитывает обменное взаимодействие ближайших соседей внутри слоев ($J_1 < 0$), а второй — ближайших соседей между слоями ($J_2 < 0$). Известно, что для квазидвумерного антиферромагнетика $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ отношение обменного межслойного взаимодействия к внутрислойному $J_2/J_1 = 0.05$. Третий член в формуле (1) учитывает анизотропию типа легкая плоскость ($D = 0.57$ — постоянная анизотропии).

В настоящее время такие системы на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются методом Монте-Карло [5-8].

Нами получены температурные зависимости параметра порядка m и теплоемкости C при разных значениях магнитного поля H . Обнаружено, что параметр порядка и теплоемкость имеют необычное поведение.

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

1. H. Kawamura, S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. **53**, 4138 (1984).
2. S.E. Korshunov, J. Phys. C **19**, 5927 (1986).
3. L.E. Svistov, A.I. Smirnov, L.A. Prozorova, O.A. Petrenko, L.N. Demianets, A.Ya. Shapiro, Phys. Rev. B **74**, 139901 (2006).
4. L.E. Svistov, A.I. Smirnov, L.A. Prozorova, O.A. Petrenko, A. Micheler, N. Büttgen, A.Ya. Shapiro, L.N. Demianets, Phys. Rev. B **74**, 024412 (2006).
5. A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev, Physica A **507**, 210 (2018).
6. M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov, Phys. A **521**, 543 (2019).
7. M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, JETP Lett. **109**, 589 (2019).
8. M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov, M.K. Mazagaeva, Phys. Solid State. **62**, 449 (2020).

ФРУСТРАЦИИ И УПОРЯДОЧЕНИЕ В МОДЕЛИ ПОТТСА С ЧИСЛОМ СОСТОЯНИЙ СПИНА $q = 4$ НА РЕШЕТКЕ КАГОМЕ С УЧЕТОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВТОРЫХ БЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ

Т.Р. Ризванова^{1*}, А.К. Муртазаев^{1,2}, М.К. Рамазанов¹, М.А. Магомедов^{1,2}

¹Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

²Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

*e-mail: rizv@yandex.ru

Исследование фазовых переходов (ФП), критических, магнитных и термодинамических свойств низкоразмерных решеточных моделей имеет большой научный интерес. Это связано с тем, что такие модели описывают большой класс реальных физических систем [1-3].

Нами исследована модель Поттса $q = 4$ на решетке Кагоме с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей Методом Ванга-Ландау, с линейным размером $L \times L = N$, $L = 24$. Получены температурные зависимости теплоемкости C , параметра порядка m , энтропии S , когда величина взаимодействия вторых соседей J_2 меняется в диапазоне от 0 до 1. Построена фазовая диаграмма (см. рис. 1) зависимости критической температуры от величины взаимодействия следующих ближайших соседей, на которой показано, что в промежутке, где J_2 меняется от 0.5 до 0.7, наблюдается беспорядок, а при дальнейшем увеличении значений энергии вторых ближайших соседей до 1 наблюдается порядок. Определены спиновые конфигурации в основном состоянии при различных соотношениях обменных взаимодействий.

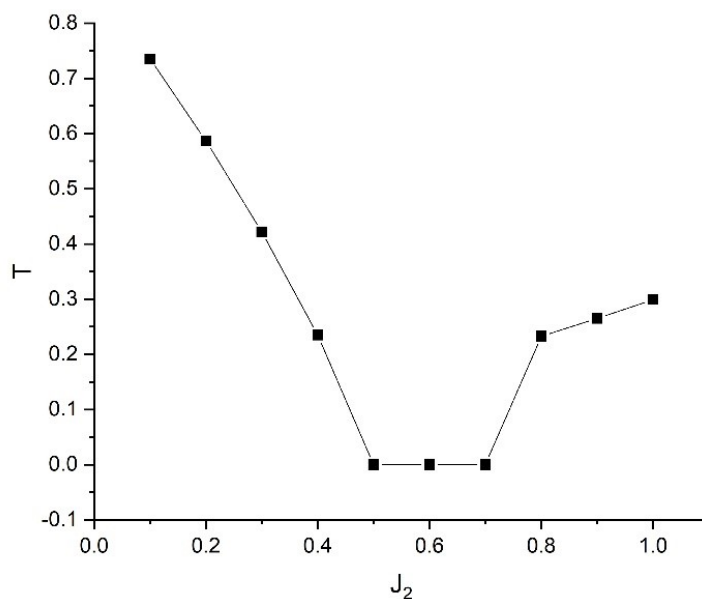


Рис. 1. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей в модели Поттса с числом состояний $q = 4$.

1. Н.Т. Диеп. Frustrated Spin Systems, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, (2004).
2. Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике. — М.: Мир (1985).
3. F.Y. Wu. Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics. World Scientific, New Jersey (2008).

ИССЛЕДОВАНИЕ АКТИВАЦИОННОГО БАРЬЕРА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ
МЕТАСТАБИЛЬНОЙ ЖИДКОСТИ МЕТОДОМ МЕТАДИНАМИКИ

Е.О. Розанов^{1,2*}, С.П. Проценко¹, В.Г. Байдаков¹

¹Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: vvecmel0@gmail.com

Жидкость может конечное время существовать в переохлажденном состоянии до кристаллизации, которая происходит при спонтанном образовании жизнеспособного (критического) кристаллического зародыша. Появление зародыша связывается с преодолением энергетического барьера ΔG , равного работе образования критического зародыша W^* . Обычно эту ключевую величину находят косвенно по данным о частоте зародышеобразования с помощью классической теории нуклеации.

Метод метадинамики [1] позволяет определить W^* напрямую в процессе преодоления активационного барьера нуклеации последовательным добавлением к гамильтониану системы потенциала смещения $V[\mathbf{s}(\mathbf{r}^N, t)]$ — функции коллективных переменных, задаваемых векторной функцией $\mathbf{s}(\mathbf{r}^N)$ положений N частиц системы. В пределе больших времен смещение проталкивает систему над активационным барьером. Величина W^* находится путем измерения глубины потенциальной ямы метастабильного состояния.

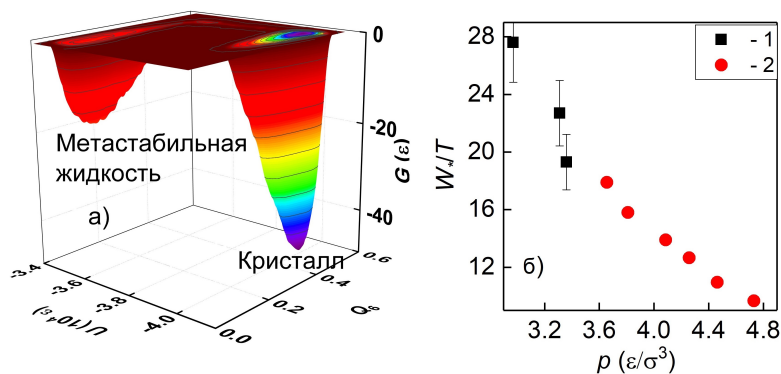


Рис. 1. Ландшафт свободной энергии Гиббса G для $p = -0.995$, $T = 0.469$ (а), барьерная зависимость высоты барьера кристаллизации при $T = 0.7$ (б). 1 — результаты данной работы, 2 — результаты [2], полученные по данным о частоте зародышеобразования.

Исследована леннард-джонсовская (ЛД) система при постоянных давлениях $p = -0.995, 0$ и 6.912 (в единицах ϵ/σ , где ϵ и σ — параметры ЛД потенциала) и температурах $T = 0.55$ и 0.7 (в единицах ϵ/k_B) при различных переохлаждениях и сжатиях. В качестве коллективных переменных метадинамики выбраны параметр Стейнхардта Q_6 для 350 атомов и потенциальная энергия системы U . Моделирование проводилось в LAMMPS с библиотекой PLUMED 2.6.0.

При преодолении барьера кристаллизации сначала совершенствуется порядок в ограниченном объеме (увеличение Q_6), а затем кристаллизуется весь объем жидкости (уменьшение U) (рис. 1а). Результаты расчета W^* представлены на рис. 1б.

Показано, что метадинамика эффективна для нахождения W^* при малых переохлаждениях, где невозможен прямой молекулярно-динамический расчет частоты нуклеации. В работе вычислены высоты барьера для давлений меньше, чем при исследовании методом среднего времени жизни (рис. 1б).

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ № 20-48-660027 р_а. Моделирование проведено с использованием суперкомпьютера «Уран» ИММ УрО РАН.

1. A. Laio, M. Parrinello, Proc. Natl. Acad. USA **99**, 12562 (2002).
2. V.G. Baidakov, K.R. Protsenko, J. Phys. Chem. B **123**, 8103 (2019).

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИСТЕРЕЗИСНЫХ ЯВЛЕНИЙ В СПИН-ВЕНТИЛЬНОЙ СТРУКТУРЕ

Н.С. Симаков*, В.В. Прудников, П.В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

*e-mail: simakovnikita4@gmail.com

Создание спин-вентильных структур стало очередным шагом на пути совершенствования свойств структур с эффектом гигантского магнитосопротивления (ГМС) [1]. Спиновые вентили состоят из двух ферромагнитных слоев, разделенных немагнитной металлической прослойкой. Направление намагниченности одного из слоев закреплено дополнительным антиферромагнитным слоем. Направление намагниченности второго слоя может свободно изменяться под действием внешнего магнитного поля. В результате в спиновых вентилях ГМС возникает при малых напряженностях магнитного поля.

В данной работе осуществлено исследование методами Монте-Карло магнитных свойств спин-вентильных структур с различными толщинами ферромагнитных слоев в циклически меняющемся по величине и направлению внешнем магнитном поле H . К описанию магнитных свойств ферромагнитных слоев в структуре была применена анизотропная модель Гейзенберга [2] с анизотропией типа «легкая ось».

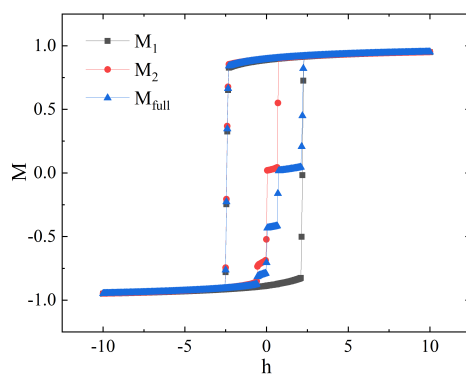


Рис. 1. Петля гистерезиса для спин-вентильной структуры с толщинами $N = 5$ МС ферромагнитных слоев при температуре $T/J_1 = 1.0$.

В качестве примера полученных результатов моделирования гистерезисных явлений на рис. 1 представлены петли гистерезиса отнормированных на 1 намагниченностей первого M_1 и второго M_2 слоя, а также полной намагниченности M_{full} структуры с толщиной слоев $N = 5$ (в единицах монослоев) для температуры $T/J_1 = 1.0$ от величины приведенного магнитного поля $h = \mu_B H/J_1$, где J_1 — величина обменного интеграла внутрислоевого взаимодействия спинов. На зависимости полной намагниченности M_{full} от поля h видны ступенеобразные участки, сменяемые участками резкого изменения намагниченности. Скачки намагниченности обусловлены разной величиной потенциального барьера переворота спинов в каждом монослое ферромагнитного слоя. Так, для малых h сначала происходит переворот намагниченности в монослое, находящемся на границе одного из слоев, а затем с ростом h — переворот намагниченности других монослоев. Так как в исследуемой структуре значение обменного интеграла межслоевого взаимодействия между ферромагнитными слоями $J_2 > 0$, то такое поведение можно объяснить взаимодействием одного из слоев со слоем антиферромагнетика, закрепляющего направление намагниченности ферромагнитного слоя до некоторого значения поля $h \approx J_2$.

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

1. V.J. Dieny, J. Magn. Magn. Mater. **136**, 335 (1994).
2. P.V. Prudnikov, V.V. Prudnikov, M.A. Medvedeva, N.I. Piskunova, J. Magn. Magn. Mater. **387**, 77 (2015).

МОДЕЛЬ СТРУКТУРНОГО ПЕРЕХОДА ЖИДКОСТЬ-ЖИДКОСТЬ ДЛЯ СПЛАВОВ Fe – Mn – C

Н.И. Синицин*, О.А. Чикова, В.В. Вьюхин

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: n.i.sinitin@urfu.ru

В результате анализа опытных данных о кинематической вязкости и удельном электросопротивлении расплавов Fe – Mn – C авторами получены свидетельства структурного перехода жидкость – жидкость при определенных для каждого состава температурах T^* . С целью априорной оценки T^* была разработана модель структурного перехода «гетерогенная система — гомогенный раствор» [1]. Кинематическую вязкость и удельное электросопротивление гетерогенной системы рассчитывали в рамках представлений теории явлений переноса в неоднородных средах [2-4], гомогенного раствора — по аддитивным зависимостям ($\rho_{ад}$). Определяли температуру T^* , при которой значения вязкости (электросопротивления) гетерогенной системы и гомогенного раствора совпадали. Например, рассчитаем удельное электросопротивление расплава Fe – 10% Mn – 1% C как гетерогенной системы методом элементарной ячейки для изолированных включений [3]:

$$\rho_{из} = \rho_1 \left(1 - \frac{m_2}{(1 - \nu)^{-1} + (1 + m_2)(1 - m_2^{2/3})(1 + m_2^{1/3})} \right)^{-1}, \quad \rho_{ад} = \sum X_i \rho_i, \quad (1)$$

где ρ_1 — удельное электросопротивление среды (раствор углерода в железе); $\nu = \frac{\rho_1}{\rho_2}$ — отношение удельного электросопротивления среды к удельному электросопротивлению включения (кластеры атомов марганца) ρ_2 ; m_2 — объемная доля включений; X_i и ρ_i — доля и электросопротивление i -го компонента соответственно. Удельное электросопротивление гомогенного раствора Mn и C в жидком Fe рассчитаем по аддитивной зависимости $\rho_{ад}$. Результаты расчета температурных зависимостей $\rho_{из}$ и $\rho_{ад}$ представлены на рисунке, определена температура структурного перехода жидкость – жидкость $T^* = 1730^\circ\text{C}$ из условия $(\rho_{из} - \rho_{ад}) = 0$.

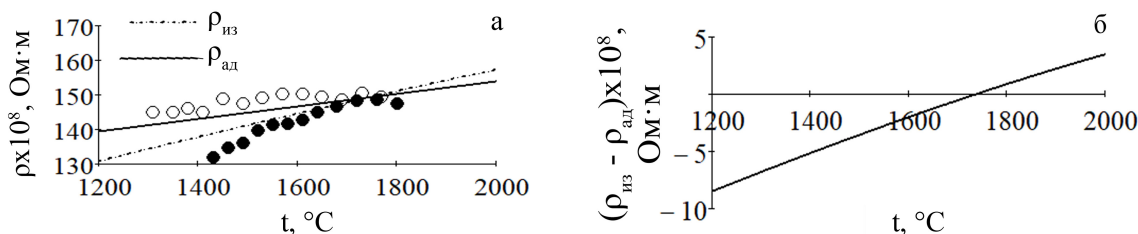


Рис. 1. Температурные зависимости удельного электросопротивления расплава Fe – 10% Mn – 1% C (а). Температурная зависимость величины $(\rho_{из} - \rho_{ад})$ (б). Точками обозначены экспериментальные данные; линии — расчет. Экспериментальные данные получены в режиме: ● — нагрева, ○ — охлаждения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-33-90198.

1. Н.И. Синицин и др., Неорг. Мат. **57**, 1 (2021).
2. Q.-G. Zhao *et al.*, Int. J. Heat Mass Transfer **107**, 484 (2017).
3. Q.-G. Zhao *et al.*, Int. J. Heat Mass Transfer **92**, 639 (2016).
4. Г.Н. Дульнев, В.В. Новиков, Процессы переноса в неоднородных средах. — Л.: Энергоатомиздат (1991).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ И ЭЛЕКТРОИМПУЛЬСНОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ БЫСТРОЗАКАЛЁННЫХ ЛЕНТ $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ С ТОНКИМ ПОВЕРХНОСТНЫМ КРИСТАЛЛИЧЕСКИМ СЛОЕМ

Н.Н. Ситников^{1,2*}, Г.В. Сивцова¹, А.В. Шеляков², С.В. Грешнякова¹, И.А. Залетова¹

¹Исследовательский центр им. М.В. Келдыша, Москва, Россия

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

*e-mail: sitnikov_nikolay@mail.ru

В работе методом сверхбыстрой закалки расплава на вращающемся диске (метод планарного литья) при скоростях охлаждения расплава порядка 10^5 К/с была получена серия образцов быстрозакалённых слоистых аморфно-кристаллических лент сплава $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ с толщиной кристаллического слоя около 2.5 мкм (поперечное сечение ленты, рис. 1а). Полученные ленты были подвергнуты термообработке в калориметре, изотермической обработке (ИТО) в муфельной печи (в течение 300 с) и электроимпульсной обработке (ЭТО) со временем обработки 1 мс (при напряжении 53.5 В), 10 мс (18.4 В), 100 мс (10.8 В), 1 с (6.3 В) и 5 с (4.6 В).

Исследование процессов образования и роста кристаллической фазы из аморфной части ленты проводилось методами дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) со скоростью нагрева $5^\circ\text{C}/\text{мин}$ и растровой электронной микроскопии. Из полученной ДСК кривой была определена температура пика кристаллизации, равная 443.7°C . Отмечено, что передний фронт пика выделения тепла, ответственного за кристаллизационные процессы, более растянут по сравнению с образцами с удалённым кристаллическим слоем. При температуре, меньшей, чем температура кристаллизации аморфной части ленты (около 430°C), поверхностный кристаллический слой испытывает рекристаллизацию и начинает расти вглубь аморфной части ленты. Повышение температуры приводит к началу процессов расстеклования аморфной части ленты. При температуре 445°C стадия расстеклования завершается и начинается интенсивный процесс кристаллизации (рис. 1б), который заканчивается при температуре 470°C . ИТО при температуре 470°C приводит к формированию в лентах биморфной кристаллической структуры (рис. 1в).

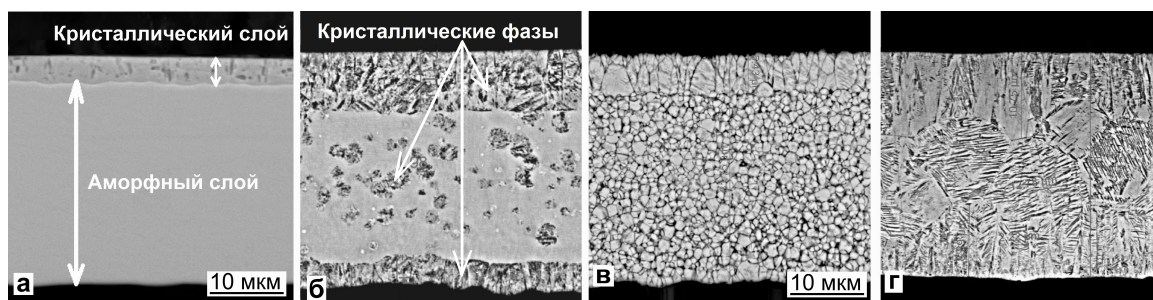


Рис. 1. Поперечное сечение образцов лент в исходном состоянии (а) и после обработки (б) — (г).

Электроимпульсная обработка со временем воздействия менее 1 секунды приводит к значительному изменению формируемой кристаллической структуры по сравнению со структурой, полученной при изотермической обработке [1]. Микроструктура таких образцов в поперечном сечении характеризуется неравномерным распределением кристаллов по толщине ленты: столбчатые кристаллы наблюдаются с контактной и бесконтактной сторон ленты, а крупные кристаллы присутствуют во внутренней части ленты (рис. 1г).

Работа выполнена при поддержке проекта РФФ № 19-72-00145.

1. A. Shelyakov, N. Sitnikov, I. Khabibullina et al., *Materials Letters* **248**, 48 (2019).

СТРУКТУРНЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ХИРАЛЬНОЙ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СУСПЕНЗИИ КВАДРУПОЛЬНЫХ ЧАСТИЦ

Д.П. Сокольчик*, Д.В. Макаров

Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Россия

*e-mail: dsokolchik@rambler.ru

Жидкие кристаллы (ЖК) — это вещества, в которых свойства обычных жидкостей (текучесть) сочетаются с макроскопической анизотропией, присущей твердым кристаллам [1]. Они образованы анизометричными (вытянутыми или сплюснутыми) молекулами, имеющими дальний порядок в ориентации своих осей, но не обладающими порядком в расположении центров масс. В работе теоретически исследовано поведение ориентационной структуры ЖК суспензии квадрупольных (диамагнитных [2]) частиц на основе холестерического жидкого кристалла. Отличительной особенностью холестерического ЖК (ХЖК) является наличие спиральной ориентационной структуры, связанной с закручиванием молекул в направлении, перпендикулярном их длинным осям. Рассматривается суспензия с жестким гомеотропным сцеплением между ХЖК матрицей и примесными частицами, ортогонально спирали которой приложено внешнее магнитное поле.

Предложено континуальное описание рассматриваемой суспензии в рамках модельного функционала свободной энергии ХЖК [3], учитывающего малую долю примеси диамагнитных частиц в образце. Путём минимизации полной свободной энергии получена система уравнений ориентационного равновесия ХЖК-суспензии. Изучено поведение суспензии во внешнем магнитном поле при различных значениях параметра сегрегации, удельных анизотропий диамагнитной восприимчивости подсистем и энергии сцепления ХЖК матрицы с примесными частицами.

В приближении однородного распределения диамагнитных частиц получены аналитические решения для поля перехода в раскрученную фазу и шага спирали суспензии. Показано, что если удельная анизотропия восприимчивости примесных частиц больше анизотропии ХЖК, то в раскрученном состоянии суспензии сонаправленным полем будет директор примесной фазы; в противоположном случае — директор ХЖК. При равенстве удельных анизотропий ХЖК матрицы и примеси спиральная структура суспензии не будет раскручиваться при любом значении внешнего магнитного поля. Получены численно и проанализированы критические поля перехода при наличии сегрегации диамагнитной примеси. Получен ряд аналитических решений для случая слабой сегрегации. В области малых полей методом разложения по малому параметру найдены аналитические зависимости, описывающие поведение векторного поля директора и распределение концентрации примеси вдоль оси спирали суспензии. Выявлено значительное влияние анизотропий восприимчивости подсистем на концентрационные волны диамагнитной примеси в системе.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-02-00231.

1. L.M. Blinov, Structure and properties of liquid crystals. – Dordrecht: Springer (2011).
2. S.P. Yadav, S. Singh, Progress in Material Science **80**, 38 (2016).
3. S.V. Burylov, Yu.L. Raikher, Molecular Crystal and Liquid Crystals **258**, 107 (1995).

ВЫЧИСЛЕНИЕ СРЕДНЕГО ЧИСЛА МОЛЕКУЛ В КАПЛЕ-ЗАРОДЫШЕ ВОДЫ ПРИ ГОМОГЕННОМ ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИИ ИЗ ПАРА

Ю.В. Сыроватко

Государственное учреждение «Институт охраны почв Украины», Днепр, Украина
e-mail: yu.syrovatko@gmail.com

При фазовом переходе первого рода «пар-жидкость», согласно гомогенному сценарию, зародышеобразование жидкой фазы происходит вследствие серии флуктуаций плотности — перегруппировок атомов в небольших объемах внутри системы. В результате таких флуктуаций может быть преодолен энергетический барьер, обусловленный формированием поверхностного (межфазного) слоя, что приведет к образованию зародышей критического размера, способных к стабильному росту [1]. Расчет среднего числа молекул таких зародышей возможен на основе данных моделирования классической молекулярной динамики [1]. Несмотря на высокую точность и гибкость, термодинамическое интегрирование достаточно трудоемкая процедура, требующая проведения серии повторных молекулярно-динамических расчетов. В настоящей работе предлагается иной теоретический метод оценки среднего числа молекул критических зародышей, основанный на статистических расчетах флуктуаций плотности молекул в пространстве.

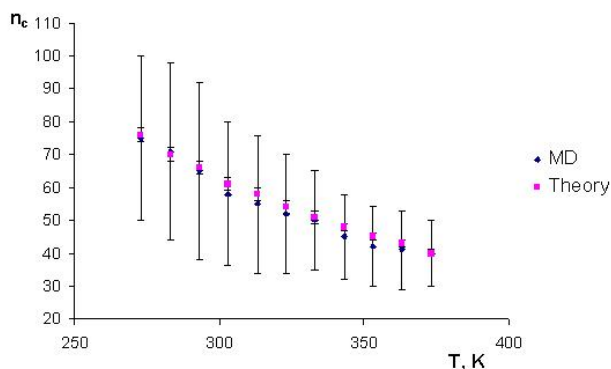


Рис. 1. Критический размер n_c как функция температуры: MD — данные моделирования из работы [1], Theory — теоретические значения.

$$m^2 = \frac{\langle (\Delta N)^2 \rangle}{N} = -k_B T \frac{N}{V^2} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T = \frac{N^2 (k_B T)^2}{V^2 P^2}. \quad (2)$$

Таким образом, количество потенциально возможных очагов жидкой фазы пропорционально $\sim g m^2$. Здесь множитель g определяется временем, необходимым для стабилизации средних по обобщенной выборке. Коэффициент g слабо зависит от температуры системы [2] и определяется на основе данных моделирования [1]. Пусть количество молекул в зародышах критического размера будет составлять некоторую часть f от общего числа молекул. Количество зародышей критического размера будет составлять соответствующую часть f от общего числа очагов зарождения. Тогда среднее число молекул в критическом зародыше:

$$n_c = \frac{f N}{f g m^2} = \frac{N}{g m^2}. \quad (3)$$

Подставим параметры системы в (1), (2), (3), используя данные моделирования [1]. Получим значения n_c зародышей в зависимости от температуры, удовлетворительно совпадающие с результатами моделирования методом молекулярной динамики [1] (рис. 1).

1. Б.Н. Галимзянов, А.В. Мокшин, Коллоидный журнал **79(1)**, 16 (2017).
2. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Статистическая физика. – М.: Наука (1976).

ВЛИЯНИЕ ПОТЕНЦИАЛА ИОНИЗАЦИИ МЕТАЛЛА РЕШЁТКИ-ХОЗЯИНА
НА КООРДИНАЦИЮ ИНТЕРКАЛАНТА В СЛОИСТЫХ ДИХАЛЬКОГЕНИДАХ
СО СТРУКТУРОЙ 1Т

А.Н. Титов

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

e-mail: antitov@mail.ru

Слоистые дихалькогениды переходных металлов (СДПМ) имеют двумерную структуру и легко допускают образование двумерных нанослоёв. При этом в зависимости от природы переходного металла и халькогена они могут иметь металлические, полупроводниковые или диэлектрические свойства. Это делает такие соединения удобными материалами для создания двумерных наногетероструктур.

Дальнейший способ модификации этих материалов состоит во внедрении в межслоевое пространство посторонних атомов. При интеркаляции СДПМ с октаэдрическим окружением переходного металла халькогеном (такую структуру принято обозначать как 1Т) возможно заполнение позиций межслоевого пространства с октаэдрической (окта-) или тетраэдрической (тетра-) координацией халькогеном. Систематическое исследование интеркалатных соединений дихалькогенидов титана показало, что в подавляющем большинстве материалов заполняются окта-позиции. Заполнение же тетра-позиций делает слоистую структуру неустойчивой относительно перехода в структуру шпинели. Однако в изоструктурных материалах на основе дихалькогенидов циркония доминирует заполнение тетра-позиций.

Анализ кристаллической структуры интеркалатных соединений на основе 1Т-СДПМ показал, что фактором, определяющим выбор между окта- и тетра-координацией интеркаланта, является потенциал ионизации переходного металла решётки СДПМ.

Это открывает совершенно новые возможности конструирования двумерных материалов с прогнозируемыми свойствами. В докладе обсуждены возможности конструирования материалов с управляемым коэффициентом диффузии интеркаланта, стабильным сегнетоэлектрическим упорядочением, управления эффективным магнитным моментом интеркалированного металла и пр.

Работа выполнена при финансовой поддержке научного проекта РФФИ № 20-03-00275.

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В ДИСЕЛЕНИДЕ ВАНАДИЯ

Н.М. Топорова^{1*}, Е.М. Шерокалова¹, Н.В. Селезнева¹, В.А. Казанцев², Н.В. Баранов^{1,2}¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия²Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*e-mail: toporova.natalia1402@mail.ru

Слоистые дихалькогениды переходных металлов (СДПМ) уже длительное время являются актуальными объектами исследований благодаря широкому разнообразию транспортных, магнитных, оптических и других физических свойств, а также возможности практического применения [1]. Большое внимание уделяется изучению природы волн зарядовой плотности в СДПМ, обладающих структурными политапами $1T$ и $2H$, в частности, в соединениях $NbSe_2$, $TaSe_2$, TaS_2 , MoS_2 и VSe_2 как на массивных образцах, так и в виде монослоев. В соединении $1T - VSe_2$ основное внимание уделяется изучению фазового перехода в состояние с ВЗП в области температур около 110 К, однако результаты, полученные в разных работах, зачастую противоречат друг другу [2,3], что может быть связано с трудностью получения стехиометрического соединения VSe_2 .

В настоящей работе представлены результаты исследования фазовых переходов в соединении VSe_2 как на поликристаллических, так и монокристаллических образцах в расширенном диапазоне температур. Поликристаллические образцы были получены методом импульсного синтеза, а монокристаллы были выращены методом газотранспортных реакций в градиентной печи. Структурные исследования проводились с помощью рентгеновского дифрактометра Bruker D8 Advance, магнитные измерения выполнены с помощью СКВИД-магнитометра MPMS (Quantum Design). Измерения электрического сопротивления проводились стандартным 4-х контактным способом на постоянном токе в интервале температур 16–300 К. Измерения теплового расширения образцов проводились на dilatометре DL-1500 RHP (Япония) в интервале температур 80 – 800 К.

Анализ температурных зависимостей магнитной восприимчивости показал, что как поли-, так и монокристаллические образцы VSe_2 демонстрируют аномалию при $T \sim 110$ К, что связывается с фазовым переходом в состояние с ВЗП и широко обсуждается в литературе [2]. Кроме этого, нами обнаружено аномальное поведение свойств при повышении температуры до $T \sim 330$ К. В окрестности этой температуры выявлены особенности на температурных зависимостях кристаллографических параметров элементарной ячейки, коэффициента термического линейного расширения и магнитной восприимчивости. Установлено, что изменения восприимчивости в окрестности перехода носят анизотропный характер. Полученные данные позволяют предположить, что в соединении VSe_2 наряду с низкотемпературным переходом в состояние с ВЗП при 110 К имеет место высокотемпературный фазовый переход, природу которого предстоит выяснить. В пользу предположения о существовании высокотемпературного перехода в VSe_2 свидетельствуют результаты недавно опубликованной работы [4], авторы которой с помощью ARPES и сканирующей туннельной микроскопии обнаружили щель в спектре VSe_2 , указывающей на формирование состояния с ВЗП при высокой температуре.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (проект № FEUZ-2020-0054).

1. J.A. Wilson *et al.*, *Advances in Physics* **18**, 193 (1969).
2. A.H. Thompson *et al.*, *Physical Review B* **19**, 3420 (1979).
3. V.N. Strocov *et al.*, *Physical Review Letters* **109**, 086401 (2012).
4. G. Duvjir *et al.*, *Nano Letters* **18**, 5432 (2018).

КВАНТОВАЯ ЗАПУТАННОСТЬ ДВУХ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ СПИНОВ,
РАВНЫХ ЕДИНИЦЕ

И.Г. Бострем, А.С. Овчинников, А.Е. Федоров*

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: universitas.literarum@gmail.com

Явление квантовой запутанности представляет собой чрезвычайно интересное явление как с точки зрения фундаментальных физических исследований [1], так и с точки зрения прикладных исследований квантовой теории информации [2]. В нашей работе было исследовано возникновение и изменение характера запутанности в системе двух взаимодействующих спинов частиц А и В, равных единице, в зависимости от внешней температуры.

Система АВ при нулевой температуре описывается гамильтонианом:

$$\hat{H} = -J \left(\hat{S}_A \cdot \hat{S}_B \right), \quad (1)$$

где J — обменный интеграл, \hat{S}_A — оператор спина частицы А, \hat{S}_B — оператор спина частицы В.

Температурное изменение системы описывается статистическим оператором:

$$\hat{\rho}_{AB}(T) = Z^{-1} \cdot \sum_i e^{\frac{\hat{H}}{kT}} \psi^* \psi, \quad (2)$$

где Z^{-1} — нормировочный коэффициент, ψ — собственная функция гамильтониана \hat{H} , k — постоянная Больцмана, T — температура.

Характер запутанности оценивается согласно критерию Городецких [3]:

$$\hat{\rho}_A \otimes \hat{T}_B^E - \hat{\rho}_{AB} > 0, \quad (3)$$

$$\hat{T}_A^E \otimes \hat{\rho}_B - \hat{\rho}_{AB} > 0, \quad (4)$$

где \hat{T}_B^E — единичный оператор в пространстве состояний частицы В, \hat{T}_A^E — единичный оператор в пространстве состояний частицы А, ρ_A — редуцированный статистический оператор подсистемы А системы АВ, ρ_B — редуцированный статистический оператор подсистемы В системы АВ.

Система, чей статистический оператор нарушает условия (3), (4), является несепарабельной или смешанно запутанной.

В рамках данной работы было выяснено, что для системы АВ существует конечный интервал температур, в котором эта система является несепарабельной. Установлено существование критической точки, в которой происходит мгновенный переход в сепарабельное состояние.

1. A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen, Phys. Rev. **47**, 777 (1935).
2. D. Bouwmester, A. Ekert, A. Zeilinger, The physics of quantum information, quantum cryptography, quantum teleportation, quantum computation. — New-York: Springer (2000).
3. M. Horodecki, P. Horodecki, R. Horodecki, Physics Letters A **223**, 1-8 (1996).

ОСОБЕННОСТЬ КОЛЛЕКТИВНОЙ ДИНАМИКИ В ОКРЕСТНОСТИ ТОЧКИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ФЛЮИДОВ

Д.Ю. Флейта

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия
e-mail: dfleyta@hse.ru

Точка фазового перехода в веществе, несмотря на её исключительное влияние на поведение вещества, не является особенной для его термодинамических функций [1,2]. Любая фаза может существовать, хотя бы как метастабильная, и по другую сторону от точки перехода; термодинамические неравенства в этой точке не нарушаются в пределах времени релаксации.

В данной работе [3] продемонстрировано наличие особенности в области фазовых переходов у двухчастичных корреляторов движения, описывающих коллективную динамику частиц в различных модельных системах флюидов. В частности, временное поведение корреляторов движения, подобных описанным в работе [4], различно в стабильной и метастабильной фазе газа и жидкостей. Представлена физическая интерпретация изменения характера корреляций, связанная с изменением спектра размеров докритических зародышей, а также радиальные зависимости поведения частиц.

$$CC(T, R) = \left\langle \frac{[\mathbf{r}_i(t + \tau) - \mathbf{r}_i(t)] \cdot [\mathbf{r}_k(t + \tau) - \mathbf{r}_k(t)]}{|\mathbf{r}_i(t + \tau) - \mathbf{r}_i(t)| \cdot |\mathbf{r}_k(t + \tau) - \mathbf{r}_k(t)|} \right\rangle_t. \quad (1)$$

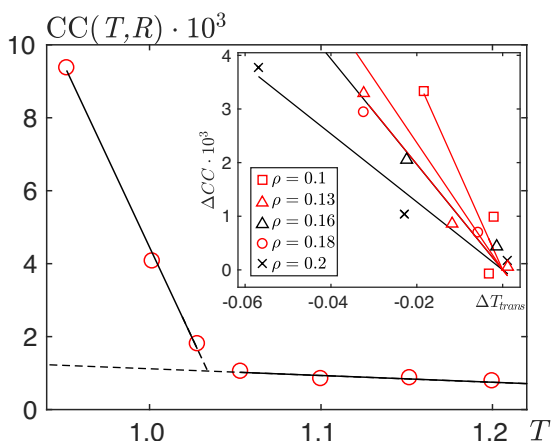


Рис. 1. Температурная зависимость $CC(T, R)$ в окрестности бинодали пара при плотности 0.18, $R = 1.12$.

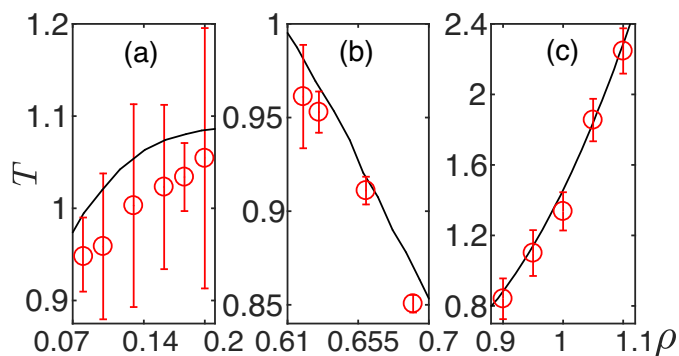


Рис. 2. Кривые фазового равновесия газ-жидкость (а), жидкость-газ (b) и жидкость-кристалл (c) системы частиц Леннарда-Джонса в координатах (ρ, T) [5]. Точки указывают положение температуры сингулярности $CC(T, R)$ при данной плотности.

Работа подготовлена в ходе проведения работы в рамках Программы фундаментальных исследований Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ) с использованием суперкомпьютерного комплекса НИУ ВШЭ в рамках государственной поддержки ведущих университетов Российской Федерации "5-100".

1. А.Ф. Андреев, *ЖЭТФ* **64**(6), 2064 (1964).
2. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Статистическая физика* - М., Наука (1976).
3. Г.Э. Норман, В.В. Писарев, Д.Ю. Флейта, *Письма в ЖЭТФ* **109**(10), 689 (2019).
4. В.П. Волошин, Г.Г. Маленков, И.Ю. Наберухин, *Журн. структ. химии* **54**(8), 239 (2013).
5. V.V. Brazhkin, Yu.D. Fomin, A.G. Lyapun, V.N. Ryzhov, E.N. Tsiok, K. Trachenko, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 145901 (2013).

ТВЕРДОТЕЛЬНОПОДОБНЫЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ
НА ОСНОВЕ НИКЕЛЯ

Р.Р. Хайруллина*, Р.М. Хуснутдинов

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

*e-mail: raniya-art@mail.ru

Металлические сплавы на основе никеля (например, алюминий-никелевые и железоникелевые сплавы) обладают уникальными физико-механическими свойствами, благодаря чему находят широкое применение в промышленности. Так, сплавы Al – Ni обладают свойствами, соотносимыми с микротвердостью и износостойкостью [1], в то время как железоникелевые сплавы обладают повышенной механической прочностью и стойкостью при высокотемпературных воздействиях. Разработка материалов со свойствами, подобными свойствам этих систем, подразумевает детальное исследование структурных особенностей и физико-химических свойств рассматриваемых систем. При этом исследования должны выполняться как для фазы равновесного расплава, так и для переохлажденных фаз вплоть до затвердевания. Ключевой физической характеристикой расплава (жидкости) является вязкость. Данная характеристика для конкретной системы может быть измерена экспериментально, а также рассчитана с помощью моделирования молекулярной динамики [2].

В данной работе мы выполняем молекулярно-динамический расчет температурных и концентрационных зависимостей вязкости никельсодержащих бинарных металлических систем, включая область равновесной жидкости и переохлажденного расплава, и сопоставляем эти результаты с актуальными на сегодняшний день экспериментальными данными. Кроме того, выполняется детальный анализ некоторых упругих и квазитвердотельных свойств высокотемпературных расплавов $Al_{(100-x)}Ni_x$ и $Fe_{(100-x)}Ni_x$.

Обнаружено, что результаты моделирования для концентрационных и температурных зависимостей вязкости для никельсодержащих бинарных систем практически совпадают с экспериментальными данными. Установлено, что максимальные значения вязкости наблюдаются при концентрациях никеля от $x_{Ni} = 60\%$ до 80% и от $x_{Ni} = 30\%$ до 50% для расплавов $Al_{(100-x)}Ni_x$ и $Fe_{(100-x)}Ni_x$ соответственно. Кроме того, в области низких значений концентраций $x_{Ni} \sim 5\%$ наблюдаются выраженные особенности как в сдвиговой, так и кинематической вязкости для железоникелевых расплавов. Детальный анализ упругих свойств был выполнен на основе численных расчетов модулей всестороннего сжатия и сдвига, коэффициента Пуассона и модуля Юнга. Показано, что при изменении концентрации никеля в системах $Fe_{(100-x)}Ni_x$ и $Al_{(100-x)}Ni_x$ модули упругости изменяются в два и три раза соответственно. Рассчитанные значения концентрационных зависимостей скоростей продольного и поперечного звука обнаруживают выраженную корреляцию с концентрационными зависимостями вязкости. Установлено, что при концентрациях $x_{Ni} \leq 60\%$ расплавы $Fe_{(100-x)}Ni_x$ характеризуются более выраженными «твердотельноподобными» свойствами, по сравнению с расплавами $Al_{(100-x)}Ni_x$.

Работа поддержана РФФИ (проект № 18-02-00407).

1. J.S. Faulkner, R.G. Jordan, *Metallic alloys: experimental and theoretical perspectives*, Springer, Dordrecht (1994).
2. D.S. Viswanath, T.K. Ghosh, D.H. Prasad, N.V. Dutt, K.Y. Rani, *Viscosity of Liquids. Theory, Estimation, Experiment, and Data*, Springer, Dordrecht (2007).

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТОВ ГИСТЕРЕЗИСА В МАГНИТНЫХ СТРУКТУРАХ С ДЕФЕКТАМИ

Р.С. Шакиров*, П.В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

*e-mail: red-srar@bk.ru

В последние годы изучение мультислойных структур имеет довольно высокий спрос, из-за возможности значительной модификации известных материалов при переходе в нанокристаллическое состояние. Данные технологии используются для изготовления считывающих головок для хранения данных в связи с возможностью уменьшения плотности тока и промежутка времени. Также наблюдается ряд необычных свойств: эффекты гигантского магнитосопротивления [1], аномальный эффект Холла [2].

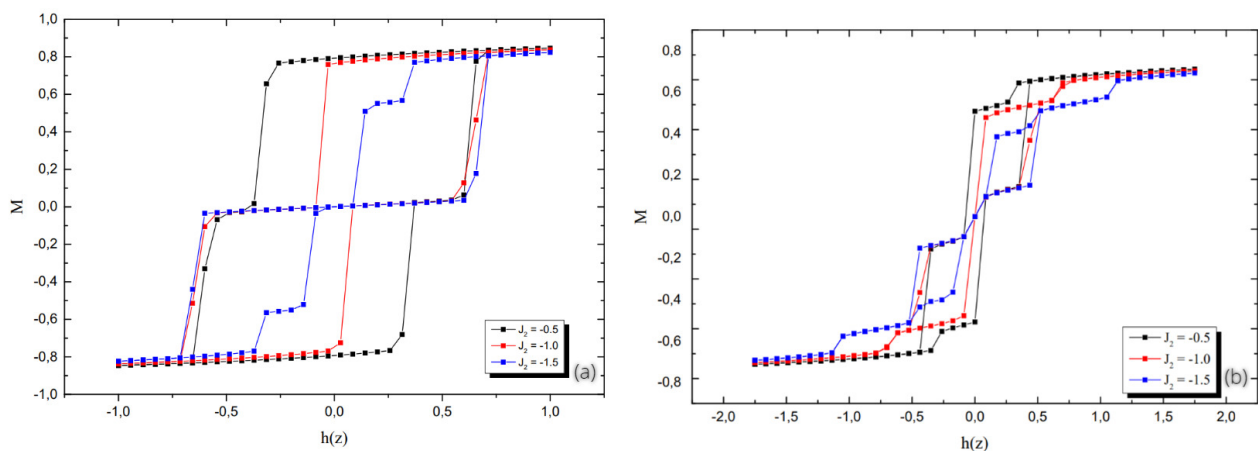


Рис. 1. Результаты моделирования трехмерной пленочной структуры без дефектов (а) и с дефектами (б) в рамках модели Гейзенберга с линейным размером $L = 32$, количеством пленок $N = 3$ при температуре $T = 0.8$ и при константе обменного взаимодействия $J_1 = 1.0$.

В данной работе были исследованы эффекты гистерезиса и обменного сдвига в мультислойных структурах с дефектами, состоящие из двух симметричных ферромагнитных пленок с толщинами $N = 3, 6, 9$ МС (Монослой) ферромагнитных гцк-пленок. Значения обменных интегралов задавались как $J_1/k_B \times T = 1$, а $J_2/J_1 = -0.5, -1.0, -1.5$. Температура системы измеряется при этом в единицах обменного интеграла J_1/k_B и принимает значение $T = 0.8$.

Было показано, что при введении дефектов, петля при аналогичных параметрах изменяет свою форму, но смещение все еще носит симметричный характер. Это связано с тем, что дефекты не изменяют принципиальное поведение модели, а лишь вносят смещение критической температуры.

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

1. M. N. Baibich, Phys. Rev. Lett. **61**, 7 (1988).
2. J.C. Slonczewski, Phys. Rev. B **39**, 10 (1989).

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТРЁХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА ВБЛИЗИ ПОРОГА ПЕРКОЛЯЦИИ

М.А. Шляхтич^{1,2*}, П.В. Прудников²

¹Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия

²Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

*e-mail: mmed@mail.ru

В последние годы изучение различных неупорядоченных моделей вблизи порога перколяции примеси стало актуальной и интересной проблемой [1-3]. При теоретическом описании поведения таких систем концентрация дефектов не может рассматриваться как малая величина. Это делает их теоретическое описание очень сложным.

Критическое замедление релаксационного процесса является аномальным свойством системы при фазовых переходах второго рода. Это проявляется в медленном изменении во времени параметра порядка при приближении к равновесию $\tau_{\text{cor,rel}} \sim |T - T_c|^{-z\nu}$, где $\tau_{\text{cor,rel}}$ — время релаксации. Таким образом, мы можем оценить динамический критический индекс z , используя конечномерный скейлинг для времен релаксации $\tau_{\text{cor,rel}} \sim \xi^z \sim L^z$.

В данной работе мы исследовали критическое поведение трехмерной модели Изинга с точечными дефектами, описываемой гамильтонианом $H = -J \sum_{i,j} p_i p_j S_i(t) S_j(t)$, где $S_i = \pm 1$; $J > 0$ характеризует обменное взаимодействие, носящее ферромагнитный характер; p_i — случайные переменные, характеризующие замороженный структурный беспорядок в системе. Система моделируется численно при температуре, равной критической $T_c = 3.091266(20) J/k_B$, с концентрацией примеси $p = p_c = 0.688313500$, начиная с полностью упорядоченного состояния с начальной намагниченностью $m_0 = 1\mu_B$ как с помощью алгоритма Метрополиса, так и с помощью перколяционного кластерного алгоритма [4], который более эффективен, чем все предыдущие методы вблизи порога перколяции.

Значение показателя $1/\nu$ может быть определено из производной кумулянта $dU_4/dT \sim L^{1/\nu}$. Значения $1/\nu$ были получены для разных температур выше критической и для разных линейных размеров решетки $L = 128, 192, 256, \infty$. Эффективное значение $\nu = 0.958(40)$ может быть получено только в термодинамическом пределе с помощью линейной аппроксимации $L \rightarrow \infty$ и $T = T_c$ [5].

В данной работе получены значения z и $\beta/\nu = 1.650(60)$ из временных зависимостей намагниченности $m(t) \sim t^{-\beta/\nu z}$ и кумулянта Биндера второго порядка $U_2(t) = [m^{(2)}]/[m]^2 - 1 \sim t^{d/z}$ с помощью метода коротковременной динамики. Значение динамического критического показателя $z = 0.732(16)$, полученное с помощью перколяционного кластерного алгоритма, значительно меньше, чем значение $z = 2.534(234)$ для алгоритма Метрополиса. Вот почему перколяционный кластерный алгоритм может быть успешно применен для введения неупорядоченной системы в состояние равновесия.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ. Для проведения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН», Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН, Суперкомпьютерного центра МГУ им. М.В. Ломоносова.

1. I. Balog, K. Uzelac, Phys. Rev. E. **76**, 011103 (2007).
2. E. Faraggi, Phys. Rev. B **78**, 134416 (2008).
3. K. Dixon, D. Venus, Phys. Rev. B. **95**, 245438 (2017).
4. J. Machta, Y.S. Choi, A. Lucke, T. Schweizer, Phys. Rev. Lett. **15**, 2792 (1995).
5. P.V. Prudnikov, M.A. Medvedeva, Progr. Theor. Phys. **127**, 369 (2012).

ПРОВОДИМОСТЬ И ТРАНСПОРТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ГАЛЬВАНОМАГНИТНЫЕ ЭФФЕКТЫ В АНТИФЕРРОМАГНИТНОМ ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ИЗОЛЯТОРЕ MnBi_2Te_4

Н.А. Абдуллаев^{1,2*}, Х.В. Алигулиева^{1,3}, З.С. Алиев^{1,4}, И.Р. Амирасланов^{1,2}, В.Н. Зверев⁵,
А.М. Шикин⁶, Н.Т. Мамедов¹, Е.В. Чулков^{6,7}

¹Институт физики НАН, Баку, Азербайджан

²Бакинский государственный университет, Баку, Азербайджан

³Сумгаитский государственный университет, Сумгаит, Азербайджан

⁴Азерб. государственный университет нефти и промышленности, Баку, Азербайджан

⁵Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия

⁶Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

⁷Donostia International Physics Center (DIPC), Donostia-San Sebastian, Spain

*e-mail: abnadir@mail.ru

Нами были впервые получены монокристаллы нового полупроводникового антиферромагнитного топологического изолятора MnBi_2Te_4 [1]. Линейный характер дисперсии энергии $E(k)$ для поверхностных состояний (т.н. конусы Дирака) подтверждается данными фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) [2]. В настоящей работе представлен транспорт электронов в MnBi_2Te_4 . На рис. 1(a) особенность в зависимости $\rho(T)$ в виде пика обусловлена магнитным фазовым переходом парамагнетик-антиферромагнетик с температурой Нееля $T_N = 25.4$ К.

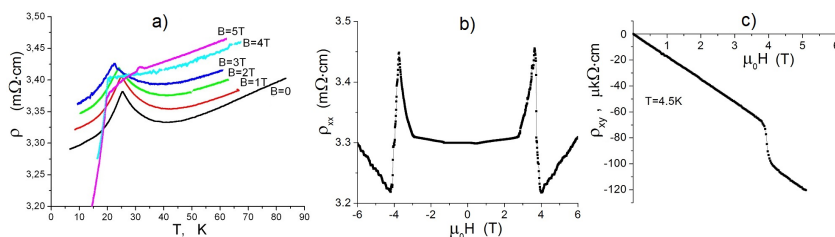


Рис. 1. (a) — температурные зависимости удельного сопротивления $\rho(T)$ соединения MnBi_2Te_4 при различных внешних магнитных полях B ; (b) — полевая зависимость магнитосопротивления; (c) — аномальный эффект Холла при температуре $T = 4.5$ К.

На рисунках 1(b) и (c) на магнитополевых зависимостях магнитосопротивления ρ_{xx} и холловского сопротивления ρ_{xy} наблюдаются характерные особенности в области приложенного внешнего магнитного поля $B \sim 4$ Т. Отрицательный наклон в зависимости $\rho_{xy}(B)$ указывает на то, что основными носителями заряда являются электроны.

В области поля $B \sim 4$ Т происходит «опрокидывание» спиновых подрешёток (т.н. спин-флоп переход) и появляется внутреннее магнитное поле, что в свою очередь приводит к скачкообразному изменению холловского потенциала (и ρ_{xy}).

Данная работа была выполнена при финансовой поддержке Фонда развития науки при Президенте Азербайджанской Республики (гранты № EIF-BGM-4-RFTF-1/2017-21/04/1-M-02 и EIF/MQM/Elm-Tehsil-1-2016-1(26)-71/16/1) и Российского Фонда фундаментальных исследований (грант № 18-52-06009).

1. Z.S. Aliev, I.R. Amiraslanov, N.A. Abdullayev, N.T.Mamedov, M.B. Babanly, E.V. Chulkov *et al.*, Journal of Alloys and Compounds **789**, 443 (2019).
2. M.M. Otrokov, Z.S. Aliev, I.R. Amiraslanov, N.T.Mamedov, N.A. Abdullayev, V.N. Zverev, A.M. Shikin, E.V. Chulkov *et al.*, Nature **576**, 416 (2019).

АНОМАЛЬНЫЙ ФАЗОВЫЙ СДВИГ ОСЦИЛЛЯЦИЙ ШУБНИКОВА - ДЕ ГААЗА В КВАНТОВОЙ ЯМЕ HgTe С ИНВЕРТИРОВАННЫМ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ СПЕКТРОМ

А.С. Боголюбский*, С.В. Гудина, В.Н. Неверов, Н.Г. Шелушнина, М.В. Якунин

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: bogolubskiy@imp.uran.ru

В квантовых ямах HgTe/(Cd,Hg)Te было продемонстрировано существование различных электронных фаз в конденсированном веществе. Варьируя ширину квантовой ямы (КЯ), можно получить гетероструктуры с зонным спектром, аналогичным спектру однослойного графена [1], а также двумерные (2D) топологические изоляторы (ТИ) с краевыми проводящими каналами [2]. Краевые состояния в ТИ могут быть описаны уравнением Дирака с линейным (бесщелевым) законом дисперсии дираковских фермионов. Дираковские фермионы имеют безмассовую природу с нетривиальной фазой (фазой Берри), приобретаемой циклотронной орбитой из-за вырождения в точке Дирака. В транспортных экспериментах на системах с дираковским спектром (монослойный графен, КЯ HgTe с бесщелевым спектром, краевые двумерные состояния ТИ и т.д.) наличие фазы Берри проявляется в фазовом сдвиге на π магнито-осцилляций или в смещенных положениях плато квантового эффекта Холла [3].

В данной работе представлено исследование осцилляций Шубникова-де Гааза (ШДГ) в квантовой яме HgTe шириной 20.3 нм, выращенной на подложке (013) GaAs, симметрично модулированно легированной индием (In) с обеих сторон квантовой ямы. Обнаружен аномальный сдвиг на π в фазе магнито-осцилляций в этой топологически тривиальной 2D системе.

В HgTe соотношение параметров Латтинжера зоны Γ_8 таково, что в подзоне N_1 спиновое расщепление сравнимо с орбитальным, по крайней мере, для малых k_{\parallel} . Ранее [4] мы представили связанные с этим особенности спектра уровней Ландау в режиме квантового эффекта Холла ($\omega_c \tau \gg 1$). Фазовый сдвиг осцилляций ШДГ обусловлен специфическим соотношением параметров Γ_8 -зоны в HgTe, а не топологической нетривиальностью системы. Особенность исследуемой системы состоит в том, что формально подуровень N_1 принадлежит ветви тяжелых дырок зоны Γ_8 с $J_z = \pm 3/2$, где J — оператор полного углового момента, однако в подзоне N_1 реализуется проводимость электронного типа. Именно большое значение z -компоненты полного углового момента, $|J_z| = 3/2$, приводит к необычной ситуации, когда зеемановское расщепление становится больше циклотронной энергии. В схеме уровней Ландау это проявляется в наличии «лишнего», невырожденного по спину, уровня (при $N = 0$) и, как следствие, к сдвигу на π фазы магнито-осцилляций.

Работа поддержана грантом Министерства науки и высшего образования № 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024).

1. B. Büttner, C. X. Liu, G. Tkachov, E. G. Novik, C. Brüne, H. Buhmann, E. M. Hankiewicz, P.Recher, B. Trauzettel, S. C. Zhang, L.W. Molenkamp, Nature Phys. **7**, 418 (2011).
2. M. König, H. Buhmann, L.W. Molenkamp, T. Hughes, C.X. Liu, X.L. Qi, S.C. Zhang, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 031007 (2008).
3. D. Xiao, M.C. Chang, Q.Niu, Rev. Mod. Phys. **82**, 1959 (2010).
4. 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. Dvoretzky, Low Temp. Phys. **43**, 605 (2017).

КВАНТОВЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ HgTe/HgCdTe: ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ И g -ФАКТОРА ЭЛЕКТРОНОВ 2D-СИСТЕМЫ

А.С. Боголюбский*, С.В. Гудина, В.Н. Неверов, Н.Г. Шелушинина, М.В. Якунин

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: bogolubskiy@imp.uran.ru

Исследование магнитоосцилляции сопротивления как в классических сильных магнитных полях (осцилляции Шубникова — де Гааза (ШдГ)) так и в режиме квантового эффекта Холла (КЭХ) является мощным методом для определения параметров зонного спектра носителей заряда, в том числе для восстановления вида спектра уровней Ландау в двумерных (2D) системах.

Проведены измерения и анализ магнитолевых зависимостей продольного и холловского сопротивлений в квантующих магнитных полях при низких температурах. Для квантовой ямы HgTe с инвертированной зонной структурой исследован режим квантового эффекта Холла и осцилляций Шубникова-де Гааза для электронов размерно-квантованной подзоны H_1 (зона проводимости).

Из активационного анализа магнитопроводимости в областях плато КЭХ [1] определены щели подвижности между соседними уровнями Ландау. Для чисел заполнения $\nu = 1, 2$ и 3 они хорошо описываются в рамках k_F модели. Проведены оценки эффективной массы и g -фактора электронов размерно-квантованной подзоны H_1 : $m_c/m_0 = 0.037 \pm 0.005$, где m_0 — масса свободного электрона и $g = 75 \pm 5$, которые хорошо согласуются с теоретическими расчетами [2]. Обнаружено аномальное соотношение циклотронного, $\hbar\omega_c$, и зеemanовского, Δ_z , расщеплений уровней Ландау в исследуемой системе, $\Delta_z > \hbar\omega_c$.

Из стандартного анализа температурной и магнитолевой зависимостей амплитуды осцилляций ШдГ [3] при $T = (2.2 - 10)$ К получены значения эффективной массы и времени жизни электронов проводимости. В магнитных полях, $1.2 < B < 2.5$ Т, в области спин-расщепленных пиков получены значения $m_c/m_0 = (0.034 \pm 0.003)$ в хорошем согласии с активационным анализом в режиме КЭХ и с теоретическими оценками для конечных значений $k_{||}$. Исходя из найденных значений эффективной массы, с помощью соотношения Вимбауэра [4], справедливого для зоны Γ_8 , выполнена оценка g -фактора носителей заряда на уровне Ферми, $g = (76.7 \pm 3.5)$. Отмечено, что большое значение последнего для квантовой ямы HgTe с инвертированной зонной структурой обусловлено p -симметрией состояний в размерно-квантованной подзоне H_1 зоны Γ_8 с полным угловым моментом $J = 3/2$ и его z -проекциями $J_z = \pm 3/2$ [5], в отличие от стандартной ситуации с $S_z = \pm 1/2$.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Электрон», № АААА-А18-118020190098-5)

1. S.V.Gudina et al., Low Temperature Physics **43**, 605 (2017).
2. M.A. Semina, R.A. Suris, Semiconductors **49**, 797 (2015).
3. Lifshits I. M. and Kosevich A. M., J. Phys. Chem. Solids **4**, 1 (1958).
4. T. Wimbauer, K. Oettinger, A.L. Efros, B.K. Meyer, H. Brugger, Phys. Rev. B **50**, 8889 (1994).
5. I.M. Tsidilkovski, «Electron spectrum of gapless semiconductors». — Berlin, Germany: Springer (1997).

ЭЛЕКТРО- И МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ МОНОКРИСТАЛЛОВ MoTe_2 И WTe_2
ДО И ПОСЛЕ ЗАКАЛКИА.Н. Доможирова^{1*}, С.В. Наумов¹, С.М. Подгорных¹, В.В. Чистяков¹, Е.Б. Марченкова¹,
J.C.A. Huang², В.В. Марченков^{1,3}¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия²National Cheng Kung University, Tainan, Taiwan³Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: domozhirova@imp.uran.ru

В последние годы активно исследуются топологические вейлевские полуметаллы на основе слоистых дихалькогенидов переходных металлов. Такие соединения перспективны для приборов спинтроники, микро- и нанoeлектроники благодаря их необычным электронным и магнитным свойствам, обусловленным уникальной электронной структурой, таким как чрезвычайно большое магнитосопротивление, высокая подвижность носителей заряда, спин-поляризованный транспорт. Известно, что MoTe_2 и WTe_2 могут проявлять свойства вейлевских полуметаллов. Однако электронные характеристики таких материалов могут претерпевать изменения в зависимости от типа кристаллической структуры, которой можно управлять с помощью термообработки. Известно, в частности, что закалка приводит к изменению вида температурной зависимости и величины электросопротивления монокристаллов MoTe_2 [1]. Поскольку получение новой информации о взаимосвязи кристаллической структуры и электронных характеристик данных материалов представляет интерес, целью данной работы является экспериментальное исследование изменения кристаллической структуры и, как следствие, электро- и магнитосопротивления монокристаллов MoTe_2 и WTe_2 в результате закалки.

Монокристаллы MoTe_2 и WTe_2 выращены методом химического газового транспорта с использованием Br_2 в качестве транспортного агента. Часть образцов MoTe_2 и WTe_2 были подвергнуты закалке от температуры 910°C. Рентгеноструктурный анализ монокристаллов до закалки показал, что MoTe_2 имеет гексагональную кристаллическую структуру, WTe_2 — орторомбическую. Закалка приводит к структурному фазовому переходу MoTe_2 в моноклинную модификацию, в то время как существенных изменений кристаллической структуры WTe_2 не наблюдается. Исследование микроструктуры поверхности методом СЭМ показало значительное увеличение слоистости MoTe_2 после закалки, при этом толщина слоя составляет ~ 1.5 мкм. Электро- и магнитосопротивление измерены при протекании тока в плоскости (001) образцов в диапазоне температур от 1.8 до 300 К в магнитных полях до 9 Т. Установлены сильные изменения в электросопротивлении MoTe_2 после закалки: вид температурной зависимости электросопротивления $\rho(T)$ меняется от «полупроводникового» к «металлическому», а величина ρ уменьшается на 8 порядков от $\sim 10^5$ Ом·см до $\sim 10^{-3}$ Ом·см при низких температурах. Магнитосопротивление MoTe_2 увеличивается от 7% до 15% при $T = 12$ К в поле 9 Т. В то же время показано, что закалка не приводит к существенным изменениям в электро- и магнитосопротивлении WTe_2 : зависимость $\rho(T)$ имеет «металлический» вид с величиной $\rho(0.02 - 0.86) \cdot 10^{-3}$ Ом·см, магнитосопротивление достигает $\sim 1700\%$ при $T = 2$ К в поле 9 Т.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Спин», №AAAA-A18-118020290104-2) при частичной поддержке РФФИ (проект № 20-32-90069) и Правительства Российской Федерации (постановление №211, контракт № 02.A03.21.0006).

1. V.V. Marchenkov, A.N. Domozhirova, R.A. Parulin *et al.*, Journal of Physics: Conference Series **1482**, 12004 (2020).

ЗАРЯДОВОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В ВАРВИКИТЕ $\text{Fe}_{1.75}\text{V}_{0.25}\text{VO}_4$

Ю.В. Князев^{1*}, Д.В. Балацкий², О.А. Баюков¹, Н.А. Бельская¹, Н.В. Казак¹, В.В. Руденко²,
С.А. Громилов³, С.Г. Овчинников¹

¹Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия

²Институт химии ДО РАН, Владивосток, Россия

³Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия

*e-mail: yuk@iph.krasn.ru

Три известных гомометаллических варвикита Fe_2VO_4 , Mn_2VO_4 и V_2VO_4 обладают совершенно разными магнитными и электронными свойствами [1-3]. Например, только Fe_2VO_4 демонстрирует моноклинный – орторомбический фазовый переход при $T_{\text{CO}}=340$ К, связанный с зарядовым упорядочением ионов Fe^{2+} и Fe^{3+} .

Нами были синтезированы монокристаллы варвикита $\text{Fe}_{1.75}\text{V}_{0.25}\text{VO}_4$ флюсовым методом [4]. Кристаллографическая структура детально разрешена методом дифракции рентгеновских лучей при 390 и 100 К. Образец имеет орторомбическую симметрию ($Pnma$ (62)) с параметрами решетки: $a = 9.2410(11)$ Å, $b = 3.1672(3)$ Å, $c = 9.3833(12)$ Å, $V = 274.63(5)$ Å³.

Измерения мессбауэровской спектроскопии выполнены в интервале температур 4 – 505 К. Ниже 122 К мессбауэровские спектры демонстрируют зеемановское расщепление, указывающее на магнитное упорядочение ионов железа. Температура магнитного упорядочения $T_N = 122$ К ниже, чем в Fe_2VO_4 ($T_N = 155$ К) [1]. Значения сверхтонких полей при 4 К, составляют 50.1 Тл, 47.2 Тл для Fe^{3+} и 36.8 Тл, 13.2 Тл для Fe^{2+} соответственно. Согласно полученным данным, в образце происходит зарядовое упорядочение в интервале 230 – 240 К. Выше этой температуры обнаружено сосуществование локализованных (Fe^{2+} , Fe^{3+}) и делокализованных ($\text{Fe}^{2.5+}$) состояний железа (рис. 1). А именно, пять неэквивалентных состояний железа, связанных с Fe^{2+} , Fe^{3+} и $\text{Fe}^{2.5+}$, наблюдаемые до 505 К. Следовательно, мы предлагаем структурный переход в образце.

Работа выполнена при поддержке Совета по грантам Президента РФ (МК-2339.2020.2).

1. A. P. Douvalis *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **12**, 177 (2000).
2. N.V. Kazak, M.S. Platunov, Y.V. Knyazev *et al.*, J. Magn. Magn Mater. **393**, 316 (2015).
3. E.M. Carnicom, K. Gyrnicka, T. Klimczuk, R.J. Cava, J. Solid State Chem. **265**, 319 (2018).
4. A.D. Balaev, O.A. Bayukov, A.D. Vasil'ev *et al.*, JETP **97**(5), 989 (2003).

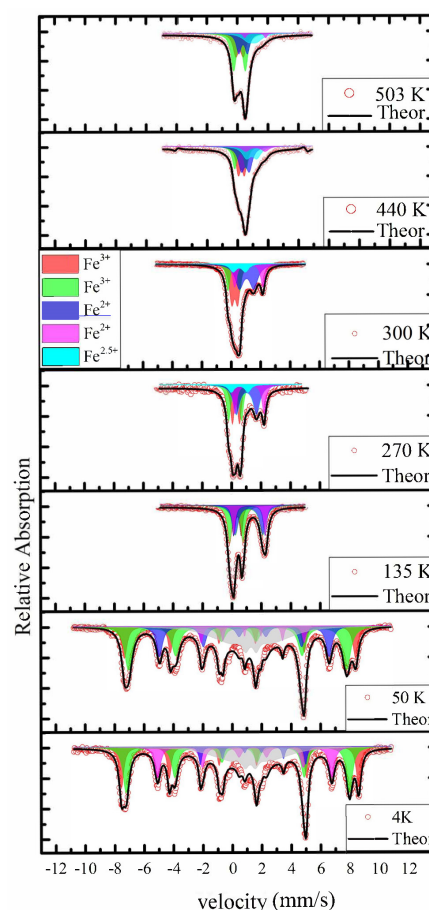


Рис. 1. Мёссбауэровские спектры $\text{Fe}_{2-x}\text{V}_x\text{VO}_4$ ($x = 0.25$) в диапазоне 4 – 505 К.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОЭДС МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ХАЛЬКОГЕНИДОВ ЦИРКОНИЯ И ВАНАДИЯ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ ДО 10 ГПА

И.В. Коробейников^{1*}, Н.В. Морозова¹, С.В. Овсянников², Е.Г. Шкварина¹, А.Н. Титов^{1,3}

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия

³Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: i_korobeynikov@mail.ru

Характер свойств у слоистых халькогенидов переходных металлов варьируется от полупроводникового до металлического, а область их потенциального применения широка и распространяется на оптоэлектронику, термоэлектричество, хемотронику и др. В случае слоистых материалов отдельный интерес представляет модификация их свойств путем интеркаляции различными атомами. Например, недавние экспериментальные исследования выявили, что интеркаляция $ZrTe_{2-y}$ атомами меди может индуцировать сверхпроводимость [1]. Интеркаляция может приводить к расширению ван-дер-ваальсовых щелей и формированию дополнительных химических связей между внедренными атомами и атомами матрицы. Деформация таких кристаллов путем всестороннего сжатия или одноосного растяжения влечет за собой дальнейшую модификацию их электронных свойств.

В рамках данной работы синтезированы и исследованы при высоком давлении до 10 ГПа кристаллы тетрасульфида ванадия (VS_4) (полупроводник) и дителлурида циркония (M_xZrTe_2) (полуметалл). Причем дителлурид циркония исследовался как в чистом виде, так и после интеркаляции атомами меди (Cu) и серебра (Ag) ($0 \leq x \leq 0.5$). Для получения квазигидростатического давления использовалась экспериментальная установка с камерой высокого давления с твердосплавными наковальнями [2].

Для кристаллов на основе $ZrTe_2$ исследовано влияния высокого давления и степени интеркаляции на величину коэффициента Зеебека. Полученные данные о поведении термоЭДС, в частности, показали существенные вариации ее величины и изменение знака под давлением. Данный результат указывает на потенциальную возможность формирования *n-p* переходов в кристалле путем использования механических воздействий.

Тетрасульфид ванадия в нормальных условиях является полупроводником с шириной запрещенной зоны не менее 0.8 эВ и обладает цепной кристаллической структурой [3,4]. В данной работе установлено, что тетрасульфид ванадия сохраняет электронный тип проводимости во всем диапазоне давлений до 10 ГПа. Величины электросопротивления и термоЭДС постепенно падают с ростом давления, причем эти изменения имеют обратимый характер. Это указывает на то, что под воздействием внешнего давления расстояния между одномерными цепочками тетрасульфида ванадия сокращаются, что приводит к уменьшению величины запрещенной зоны E_g . Таким образом для VS_4 параметр E_g можно регулировать путем вариации величины внешнего давления.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 20-02-00695А).

1. A.J.S. Machado, N.P. Baptista, B.S. de Lima, N. Chaia, T.W. Grant, L.E. Corrka, S.T. Renosto, A.C. Scaramussa, R.F. Jardim, M.S. Torikachvili, J.A. Aguiar, O.C. Cigarroa, L.T.F. Eleno, Z. Fisk, Phys. Rev. B **95** (14), 144505 (2017).
2. I.V. Korobeinikov, N.V. Morozova, L.N. Lukyanova, O.A. Usov, V.A. Kulbachinskii, V.V. Shchennikov, S.V. Ovsyannikov, J. Phys. D: Appl. Phys. **51**, 025501 (2018).
3. E. Flores, E. Mucoz-Cortés, J. Bodega, O. Caballero-Calero, M. Martín-González, C. Sánchez, J.R. Ares, and I.J. Ferrer, ACS Appl. Energy Mater. **1**, 2333 (2018).
4. M.N. Kozlova, A. N. Enyashin, and V. E. Fedorov, J. Struct. Chem. **57**, 1505 (2016).

МЕЖСЛОЕВАЯ ПРОВОДИМОСТЬ В УГЛАХ ЯМАДЖИ В СЛОИСТЫХ МЕТАЛЛАХ
В МАГНИТНОМ ПОЛЕТ.И. Могилюк^{1*}, П.Д. Григорьев²¹Российский научный центр «Курчатовский институт», Москва, Россия²Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Черногоровка, Россия

*e-mail: 5taras@mail.ru

Представлен квантово-механический расчет угловой зависимости межслоевой проводимости $\sigma_{zz}(\theta)$ в наклонном магнитном поле в квазидвухмерных слоистых металлах в углах Ямаджи в самосогласованном борновском приближении с помощью выражения из работы [1]. Для квадратичной и изотропной дисперсии электронов $\epsilon(k_x, k_y) = (k_x^2 + k_y^2)/(2m)$, Куни-хико Ямаджи получил [2], что минимумам межслоевой проводимости $\sigma_{zz}(\theta)$ соответствуют нули $J_0(k)$, где J_0 — функция Бесселя нулевого порядка, $k \equiv k_F d \tan \theta$, k_F — импульс Ферми в плоскости, d — межслоевое расстояние и θ — угол между приложенным магнитным полем \mathbf{B} и нормалью к проводящим плоскостям. Сведения об углах Ямаджи позволяют уточнить импульс Ферми. Согласно нашим расчётам, магнетопроводимость в углах Ямаджи, усреднённая по периоду магнитных квантовых осцилляций, обратно пропорциональна компоненте магнитного поля B_z в степени $3/2$ в сильном магнитном поле, в котором расстояние между уровнями Ландау больше ширины уровней. Магнетопроводимость в максимумах магнитных квантовых осцилляций в таком поле обратно пропорциональна B_z в степени 1 и равна 0 в минимумах. В обоих случаях найденные выражения обратно пропорциональны номеру угла Ямаджи. Вкупе рассматривалось влияние на проводимость в углах Ямаджи «резервуарных» электронных состояний, не вносящих вклад в магнитные квантовые осцилляции межслоевой проводимости, создающих дополнительный канал проводимости.

Работа выполнена при частичной поддержке грантов РФФИ № 18-02-00280, 18-02-01022 А, 19-02-01000 А, 21-52-12027.

1. P.D. Grigoriev, T.I. Mogilyuk, Phys. Rev. B **90**, 115138 (2014).
2. K. Yamaji, J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 1520 (1989).

КРУПНОМАСШТАБНЫЙ ПРИМЕСНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ В РЕЖИМЕ КВАНТОВОГО ЭФФЕКТА ХОЛЛА В СТРУКТУРАХ InGaAs/InAlAs

А.П. Савельев*, Ю.Г. Арапов, С.В. Гудина, В.Н. Неверов, Н.Г. Шелушинина
Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e-mail: saveliev@imp.uran.ru

В основе объяснения квантования холловской проводимости лежат представления о появлении делокализованных состояний при движении двумерного электрона в случайном потенциале в сильном магнитном поле. Тогда переходы между плато квантового эффекта Холла (КЭХ) можно рассматривать как квантовые фазовые переходы (ФП) диэлектрик (плато) — металл (переходная область). В соответствии с теорией ФП и гипотезой подобия (скейлинга) изменения физических величин, наблюдаемые в эксперименте, при приближении к критической точке описываются управляющим параметром (магнитное поле или концентрация электронов), изменение которого степенным образом зависит от длины локализации, корреляционной длины, задающей размер области, где локализована волновая функция электрона. Показатель степени, критический индекс, является универсальной величиной. В реальных экспериментах эффективный размер образца задается длиной сбоя фазы электрона, которая стремится к бесконечности при температуре $T \rightarrow 0$, так что можно перейти от размерного скейлинга к скейлингу по температуре [1].

Для наблюдения «универсального» скейлинга необходимо, чтобы рассеивающий потенциал был короткодействующим: характерный масштаб рассеивающего потенциала меньше эффективного размера квазичастицы, определяемого длиной волны де Бройля (без магнитного поля) или магнитной длиной (в сильном магнитном поле). Масштаб потенциала задается параметрами образца, заложенными при росте структуры. В структурах с удаленным легированием через спейсер случайный потенциал является крупномасштабным. Короткодействующий потенциал дает сплавное рассеяние на примесях замещения, рассеяние на точечных дефектах и шероховатостях гетерограниц.

Было продемонстрировано [2], что на гетероструктуре GaAs/AlGaAs, где масштаб случайного потенциала менялся с помощью введения Al в качестве примеси замещения в состав проводящего слоя GaAs, с ростом содержания Al наблюдается переход от «неуниверсального» скейлинга (крупномасштабный потенциал, рассеяние на удаленных примесях) к «универсальному» (короткодействующий потенциал, рассеяние на сплавном потенциале). Причем, для систем с малым содержанием Al переход от «неуниверсального» к «универсальному» скейлингу наблюдается при понижении температуры [3].

В рамках концепции скейлинга проведен анализ температурных зависимостей ширины областей перехода между фазами КЭХ в структурах InGaAs/InAlAs с большим содержанием InAs, масштаб потенциала менялся путем изменения ширины спейсера. Обнаружено скейлинговое поведение с критическим индексом, регулярно наблюдающимся в системах с крупномасштабным примесным потенциалом, с последующим переходом к «универсальному» скейлингу при понижении температуры, причем с ростом ширины спейсера переход происходит при более низкой температуре. Последнее наблюдение подтверждается и данными по температурной зависимости пиковых значений проводимости, полученных при разогреве электронного газа с помощью изменения величины пропускаемого тока через образец. Переход в режим скейлинга происходит при более высокой температуре в образце с меньшей шириной спейсера.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Свердлов. области 20-42-660004.

1. A.M.M. Pruisken. *Int. J. Mod. Phys. B* **24**, 1895 (2010).
2. W. Li *et al.*, *Phys.Rev. Lett.* **94**, 206807 (2005).
3. W. Li *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 216801 (2009).

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА Co_2MnZ ($Z = \text{Si, Al, Ge, Ga}$)

А.А. Семянникова^{1*}, Ю.А. Перевозчикова¹, В.В. Марченков^{1,2}

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: semiannikova@imp.uran.ru

Полуметаллические ферромагнетики (ПМФ) и спиновые бесщелевые полупроводники (СБП) являются перспективными для применения в спинтронике, так как в них наблюдается высокая температура Кюри и может быть реализована близкая к 100% спиновая поляризация носителей заряда. Сходство ПМФ и СБП заключается в том, что на уровне Ферми для электронных состояний со спином «вниз» присутствует широкая ($\Delta E \sim 1$ эВ) щель, однако для противоположной проекции спина в ПМФ щель отсутствует, а в СБП имеется нулевая энергетическая щель [1]. Таким образом, СБП не обладает металлической проводимостью, что позволяет совместить свойства ПМФ с полупроводниковыми характеристиками, то есть с возможностью тонкого регулирования величины энергетической щели и управления электронными свойствами [2].

В сплавах Гейслера на основе Co могут наблюдаться состояния близкие к ПМФ и/или СБП [3]. При изменении числа валентных электронов наблюдаются существенные изменения электронной зонной структуры вблизи уровня Ферми, что находит отражение в изменении и других физических свойств [4]. Таким образом, цель данной работы заключается в исследовании электрических и магнитных свойств системы сплавов Co_2MnZ ($Z = \text{Si, Al, Ge, Ga}$) и установлении возможных закономерностей поведения.

Были измерены полевые $M(H)$ при $T = 5$ и 300 К и в полях до 30 кЭ и температурные зависимости намагниченности и $M(T)$ в интервале от 5 до 400 К сплавов Гейслера Co_2MnZ ($Z = \text{Si, Al, Ge, Ga}$). Измерения намагниченности выполняли на SQUID-магнитометре MPMS-XL-5. Электросопротивление измерялось в интервале температур от 70 до 300 К. Исследования сопротивления были сделаны с использованием стандартной 4-контактной методики на постоянном токе с коммутацией электрического тока через образец. В результате проведенных исследований показано, что с изменением Z -компоненты наблюдаются существенные изменения остаточного сопротивления ρ_0 , намагниченности насыщения M_s , что может быть связано с реализацией ПМФ- и/или СБП-состояния.

Работа частично поддержана государственным заданием Минобрнауки России (темы «Спин» № АААА-А18-118020290104-2 и «Магнит» № АААА-А18-118020290129-5), грантами РФФИ (№ 20-32-90065 и № 18-02-00739), Комплексной программой УрО РАН (проект № 18-10-2-37) и Правительством Российской Федерации (постановление № 211, контракт № 02.А03.21.0006).

1. M.I. Katsnelson, V.Yu. Irkhin, L. Chioncel et al., Rev. Mod. Phys. **80**, 315 (2008).
2. V.V. Marchenkov, V.Yu. Irkhin, Yu.A. Perevozchikova, P.B. Terent'ev, A.A. Semiannikova, E.B. Marchenkova, M. Eisterer, JETP **128**, 919 (2019).
3. Yu.A. Perevozchikova, A.A. Semiannikova, A.N. Domozhirova, P.B. Terentyev, E.B. Marchenkova, E.I. Patrakov, M. Eisterer, P.S. Korenistov, V.V. Marchenkov, Low Temp. Phys. **45**, 789 (2019).
4. V.V. Marchenkov, Yu.A. Perevozchikova, N.I. Kourov *et al.*, J. Magn. Magn. Mat. **459**, 211 (2018).

МАГНИТНЫЙ ПРОБОЙ В ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЕ КВАНТОВОЙ ЯМЫ HgTe/HgCdTe С ИНВЕРТИРОВАННОЙ ЗОННОЙ СТРУКТУРОЙ В ПОЛУМЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗЕ

С.В. Гудина, А.С. Боголюбовский, В.Н. Неверов*, К.В. Туруткин, Н.Г. Шелушина, М.В. Якунин

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: neverov@imp.uran.ru

Уникальной особенностью квантовой ямы HgTe является то, что при достаточно большой ширине ее край зоны проводимости образован состояниями p -типа (полоса Γ_8), а не состояниями s -типа (полоса Γ_6), как в обычных гетеросистемах [1]. Энергетический спектр валентной зоны анизотропен и изоэнергетические контуры вблизи потолка зоны имеют сложный вид (см., пример, работу [2]). При малых энергиях состояниями дырок становятся четыре максимума, смещённые из центра зоны Бриллюэна в направлениях $(\pm 1; \pm 1)$, а в направлениях $(0; \pm 1)$ и $(\pm 1; 0)$ находятся четыре седловые точки.

Вблизи седловых точек в магнитном поле происходит внутризонный магнитный пробой. Как показано в [3] неопределенности импульсов связаны $\Delta p_x \Delta p_y \sim e \hbar B$ или на языке волновых векторов $\Delta k_x \Delta k_y \sim e B / \hbar$. Для внутризонного пробоя положение траекторий зависит от магнитного поля. На рисунке приведены траектории движения внутризонного пробоя вблизи точки перегиба при различных магнитных полях.

В работе [4] показано, что вместо ожидаемой 8 кратной степени вырождения (4-кратное долинное и 2-кратное спиновое), экспериментально наблюдается 2-кратное (отношение холловской концентрации дырок к концентрации полученной из периода осцилляций Шубникова – де Гааза). В работе [4] этот результат связывают с наличием асимметрии инверсии интерфейса квантовой ямы [5]. На наш взгляд другой возможной причиной наблюдаемых в работе [4] особенностей может быть магнитный пробой. Как видно из рис. 1 в магнитном поле порядка 1 Т (магнитное поле начала наблюдения осцилляций Шубникова – де Гааза), квантовый пробой приводит к наличию связи между различными долинами дырок. Такая связь приводит к уменьшению степени вырождения с 8 до 2.

Работа поддержана грантом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации. № 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024).

1. M. Konig, H. Buhmann, L. Molenkamp *et al.*, Phys. Soc. Japan **77**, 031007 (2008).
2. G. Landwehr, J. Gerschutz, S. Oehling, A. Puffer-Jeschke, V. Latussek, C.R. Beeker. Physica E, **6**, 713 (2000).
3. И.М. Лифшиц, М.Я. Азбель, М.И. Каганов электронная теория металлов – «Наука» (1971).
4. G.M. Minkov, V.Ya. Aleshkin, O.E. Rut, A.A. Sherstobitov, A.V. Germanenko, S.A. Dvoretzki, and N.N. Mikhailov. Phys. Rev. B **96**, 035310 (2017).
5. S.A. Tarasenko, M.V. Durnev, M.O. Nestoklon, E.L. Ivchenko, J.-W. Luo, and A. Zunger, Phys. Rev. B **91**, 081302 (2015).

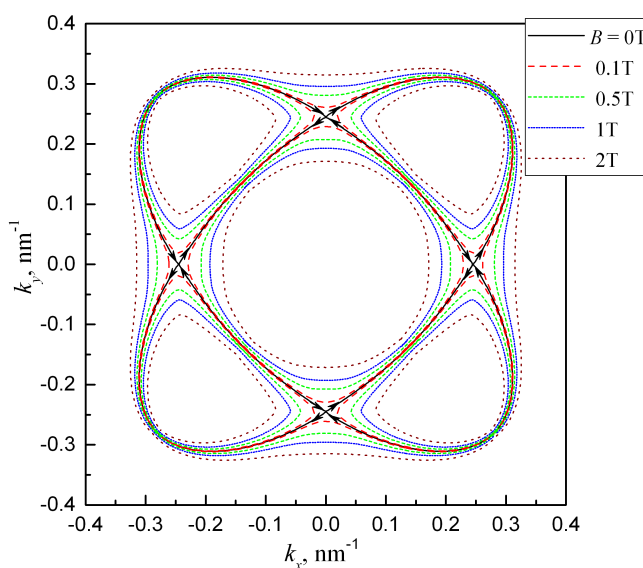


Рис. 1. Картина контуров постоянной энергии с учётом магнитного пробоя при энергии, отвечающей седловым точкам.

РЕЗОНАНСНЫЕ ЯВЛЕНИЯ

ПЛАЗМОННЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В ЭЛЛИПСОИДАЛЬНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ МЕДИ

А.Ш. Вагапов*, А.Н. Киряков, А.Ф. Зацепин

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: Alexander1705q@icloud.com

В настоящее время поиск новых материалов и способов их получения для производства высокоэффективных сенсоров является актуальной задачей. Одним из перспективных направлений в этой области является использование плазмонных материалов и наночастиц. Поверхностный плазмонный резонанс (ППР) возникает при совпадении частот колебаний электронов проводимости металла и падающего на поверхность фотона. В наночастицах металлов ППР характеризуется синфазным возбуждением всех электронов проводимости наночастицы. Положение максимума ППР зависит от таких факторов, как диэлектрическое окружение, и в особенности размер и форма наночастиц [1]. При переходе формы частиц от сферической к эллипсоидальной происходит резкое смещение ППР в длинноволновую часть спектра. То есть изменяя форму наночастиц, можно управлять плазмонными свойствами этих частиц.

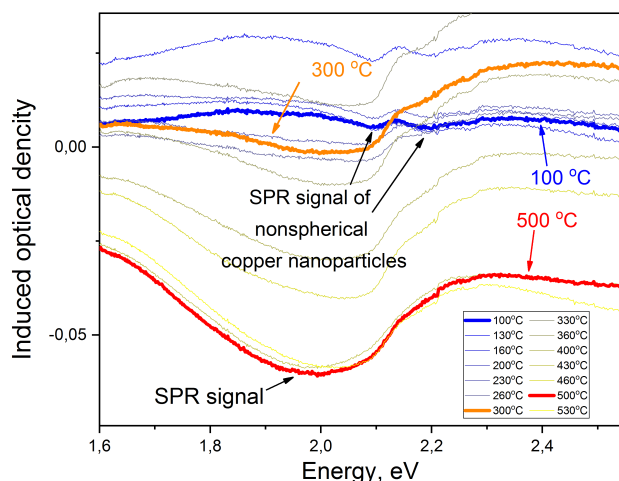


Рис. 1. Спектры наведенного оптического поглощения керамики шпинели в полосе ППР при ступенчатом отжиге.

в 2.1 эВ, характерной для поверхностного плазмонного резонанса наночастиц меди (рис. 1). После отжига производилось запись спектра и нормировка на спектр исходного образца (до отжига). При возрастании температуры происходит увеличение интенсивности, а после температуры 360°C происходит резкое снижение, это можно увидеть по цветовому переходу от темного к светлому (100 – 530°C). При низких температурах отжига в полосе ППР отчетливо видны два максимума, что свидетельствует об эллипсоидальности образуемых наночастиц.

Разработана модель формирования несферических плазмонных наночастиц, учитывающая изменение энергии связи на вытянутых границах эллипсоида.

Работа выполнена при частичной поддержке проекта РФФИ № 20-42-660012.

1. M. Li, S.K. Cushing, N. Wu, *Analyst* **140**, 386 (2015).

Перспективной матрицей для синтеза плазмонных наночастиц являются прозрачные керамики алюмомагниевого шпинели (АМШ) $MgAl_2O_4$, обладающие высокой радиационной стойкостью. Цель работы заключается в изучении плазмонных возбуждений в несферических плазмонных наночастицах меди.

Аттестация образца проводилась методами РФА и Рамановской спектроскопии. Спектры оптического поглощения были сняты на спектрометре Lambda 35 (Perkin Elmer). Ступенчатый отжиг выполнялся в диапазоне температур от 100 до 530°C с шагом в 30°C.

Имплантирование ионов Cu^{2+} с флюенсом $1 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$ керамики АМШ приводит к появлению в спектрах поглощения полосы

МИКРОМАГНИТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АВТОРЕЗОНАНСНОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ КОЛЕБАНИЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ ЖИГА

В.С. Теплов*, В.Д. Бессонов, С.В. Баталов, А.В. Телегин

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: teplov@imp.uran.ru

В настоящее время численное моделирование является мощным теоретическим методом исследования и предсказания свойств физических объектов. Для моделирования сложных магнитных систем с динамически изменяющейся намагниченностью успешно применяется микромагнитный подход [3]. В данной работе объектом микромагнитного моделирования является эффект нелинейного авторезонансного возбуждения магнитной подсистемы в тонких пленках железо–иттриевого граната (ЖИГ). Явление авторезонанса намагниченности (автофазировки) было теоретически предсказано в работах [1,2] и представляет собой управление резонансной частотой колебаний намагниченности с помощью поля накачки за счёт захвата фазы собственных колебаний намагниченности внешним полем. Однако данные аналитические работы не учитывают существенные условия: геометрию образца, диполь–дипольное взаимодействие спинов и т.д., что не позволяет проверить теоретические модели на практике.

Целью данной работы было поставлено определить параметры, необходимые для возникновения и экспериментального наблюдения данного эффекта, используя методы микромагнитного моделирования в программной оболочке MUMAX³ с учетом физических параметров реальных материалов.

В качестве модели для авторезонансного возбуждения намагниченности была выбрана тонкая пленка ЖИГ размером $1600 \times 1600 \times 160$ нм. ЖИГ обладает минимальным уровнем затухания магнитной подсистемы, что обеспечивает устойчивость спин–волновых процессов. В качестве материальных параметров пленки (намагниченность насыщения, энергия обменного взаимодействия, константа магнитной анизотропии, учет влияния диполь–дипольного взаимодействия и т.д.) использовались табличные данные. Согласно методике численного расчета, образец разбивался на отдельные элементы в виде прямоугольных ячеек, взаимодействие между ними учитывалось с помощью уравнения Ландау–Лифшица.

Исходя из теории [1,2], в ходе моделирования намагниченный в поле насыщения вдоль оси легкого намагничивания образец помещался в поперечное переменное поле с амплитудой 1 Э с изменяемой со временем по линейному закону частотой. Далее численно подбирались такие параметры скорости изменения частоты поля накачки (чирп), при которых наблюдался эффект резкого возрастания амплитуды магнитных колебаний до значений, соответствующих нелинейному режиму — эффект авторезонанса. В ходе моделирования была обнаружена пороговая зависимость амплитуды колебаний намагниченности от скорости изменения частоты возбуждающего магнитного поля. Для использованных параметров пленки ЖИГ толщиной 160 нм оптимальная скорость изменения возбуждающего магнитного поля для возбуждения авторезонанса составила $680 \times 10^4 \text{ ГГц/с}$.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Спин» № АААА-А18-118020290104-2, при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-90014.

1. С.В. Баталов, А.Г. Шагалов, ФММ **109**, 1, 3 (2010).
2. С.В. Баталов, А.Г. Шагалов, ФММ **114**, 2, 115 (2013).
3. A. Vansteenkiste, J. Leliaert, M. Dvornik, M. Helsen, F. Garcia-Sanchez, AIP Advances **4**, 107133 (2014).

СТРУКТУРНЫЕ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
ТВЁРДЫХ ТЕЛ

СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ФАЗЫ НА ОСНОВЕ AgNbO_3

П.А. Безбородова*, Ю.А. Лупицкая

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*e-mail: ibragimova-polin@mail.ru

Оксидную сегнетокерамику со структурой типа перовскита относят к классу бессвинцовых пьезоэлектрических материалов. Высокие диэлектрические и относительно хорошие пьезоэлектрические характеристики соединений и твердых растворов на основе ниобатов одно- и двухвалентных металлов привели к многочисленным исследованиям их синтеза, структуры и электромеханических свойств.

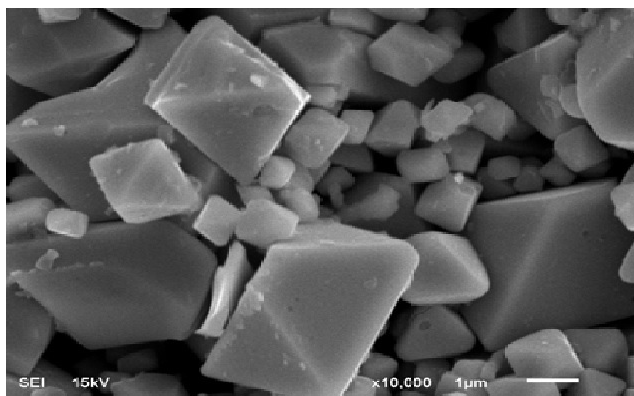


Рис. 1. Микрофотография образца состава $\text{Ag}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{W}_{0.8}\text{O}_6$, спеченного при 1373 К.

Однако на сегодняшний день остается открытым вопрос синтеза наиболее перспективных фаз на основе AgNbO_3 , которые могут быть использованы для разработки новых бессвинцовых сегнетокерамических материалов, обладающих пьезоэлектрическими свойствами [1].

В настоящей работе изучены особенности кристаллической структуры и электрофизические свойства твердых растворов $\text{Ag}_{1-x}\text{Nb}_{1-x}\text{W}_x\text{O}_6$ ($0.0 \leq x \leq 1.0$) с применением различных режимов термообработки.

Синтез соединений проводили по стандартной керамической технологии, подробно описанной в [2].

Рентгенографические данные получали при комнатной температуре с помощью дифрактометра Bruker D8 ADVANCE (CuK_α -излучение). Уточнение структурных параметров проводили методом Ритвельда с применением программного комплекса GSAS. Морфологию поверхности синтезированных соединений исследовали с помощью сканирующего электронного микроскопа JEOL JSM – 6510.

Установлено, что полученные соединения $\text{Ag}_{1-x}\text{Nb}_{1-x}\text{W}_x\text{O}_6$ кристаллизуются в рамках структуры типа перовскита (тетрагональное искажение). Для керамических образцов исследована морфология поверхности, определены плотность и средний размер частиц (см. рис. 1). Изучены частотно-температурные зависимости диэлектрической проницаемости ϵ и тангенса угла диэлектрических потерь $\text{tg}\delta$ полученных керамик. Следует отметить, что на особенности диэлектрических характеристик исследуемых образцов существенное влияние оказывают режимы высокотемпературной обработки. Показано, что ведение гетероэлемента добавки в исходную смесь в виде поликристаллического оксида WO_3 не только увеличивает дефектность образующихся при твердофазном взаимодействии соединений со структурой типа перовскита, но и существенно расширяет область однофазности образующихся твердых растворов.

1. L. Song, J. Mater. Chem. 7 (2019).
2. П.А. Безбородова, Бутлеровские сообщения **63**, 7 (2020).

**ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РАВНОВЕСИЯ КУБИЧЕСКОГО
И ТЕТРАГОНАЛЬНОГО БЕЙНИТА В СТАЛЯХ ПРИ УСЛОВИИ ЗАПРЕТА
НА ОБРАЗОВАНИЕ КАРБИДОВ**

И.В. Булдашев*, Д.А. Мирзаев

Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия

*e-mail: buldashev.ivan@mail.ru

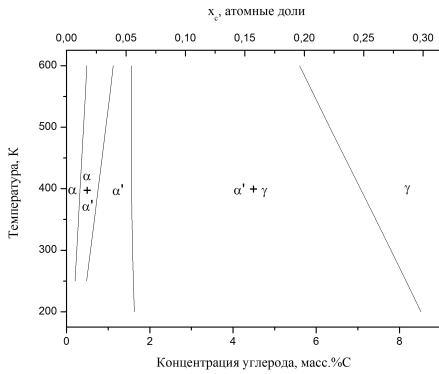


Рис. 1. Низкотемпературная метастабильная диаграмма фазового равновесия Fe-C (при условии подавления карбидных выделений).

Интерес исследователей к новому классу сталей, называемыми «объемно-наноструктурированными», в основе которых лежит структура бескарбидного бейнита, связан с потребностью промышленности в появлении новых сталей с удачным сочетанием высокой пластичности и высокой прочности. Высокое содержание углерода в таких сталях объясняется возникновением тетрагональной кристаллической решетки в бескарбидном бейните. В работе [1], основываясь на теории Зинера-Хачатуряна [2], были рассчитаны химические потенциалы железа и углерода в твердых растворах Fe-C с тетрагональной и кубической решетками. На основе этого анализа получены уравнения равновесия кубического и тетрагонального бейнитного феррита или мартенситных фаз:

$$RT \left(\ln \frac{x_C^T}{3-4x_C^T} - \ln \frac{x_C^\alpha}{3-4x_C^\alpha} \right) - \frac{2}{3} \frac{x_C^T}{1-x_C^T} (N_0 \lambda_0 \eta^2 + \frac{1}{3} {}^0L_{\text{Fe:Va,C}}^{\text{bcc}}) + \frac{2}{9} \frac{x_C^\alpha}{1-x_C^\alpha} {}^0L_{\text{Fe:Va,C}}^{\text{bcc}} + \frac{RT}{3} [2(1-\eta) \ln(1-\eta) + (1+2\eta) \ln(1+2\eta)] = 0, \quad (1)$$

$$3RT \left(\ln \frac{3-4x_C^T}{3(1-x_C^T)} - \ln \frac{3-4x_C^\alpha}{3(1-x_C^\alpha)} \right) + \frac{1}{3} \frac{x_C^T}{1-x_C^T} (N_0 \lambda_0 \eta^2 + \frac{1}{3} {}^0L_{\text{Fe:Va,C}}^{\text{bcc}}) - \frac{1}{9} \left(\frac{x_C^\alpha}{1-x_C^\alpha} \right)^2 {}^0L_{\text{Fe:Va,C}}^{\text{bcc}} = 0, \quad (2)$$

где x_C^α и x_C^T — атомные доли углерода в кубической (α) и тетрагональной (Т) фазах. N_0 — количество атомов железа, λ_0 — параметр деформационного взаимодействия, а η — параметр порядка в теории Хачатуряна. Величина ${}^0L_{\text{Fe:Va,C}}^{\text{bcc}}$ в модели ХиллERTA–Стаффонсона эквивалентна энергии смешения атомов углерода и октаэдрических пор. Критика Агреном значения этой величины у Густафсона и сделанные Маклелланом и Бхадешиа поправки привели в итоге нас к величине ${}^0L_{\text{Fe:Va,C}}^{\text{bcc}}$ равной 1300 кДж/моль, которая использовалась при совместном решении уравнений (1) и (2). Результаты расчета представлены на рис. 1 в виде диаграммы, из которой видно, что при 300 К кубический мартенсит, содержащий 0,24 масс.% С находится в равновесии с тетрагональным мартенситом с концентрацией 0,57 масс.% С. Приблизительно в этом интервале наблюдается нарушение линейности отношения с/а в зависимости от содержания углерода по Г.В. Курдюмову [3].

1. Д.А. Мирзаев, А.А. Мирзоев, И.В. Булдашев, К.Ю. Окишев, ФММ **118**, 6С547 (2017).

2. А.Г. Хачатурян, Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. — М.: Наука (1974).

3. Г.В. Курдюмов, Явления закалки и отпуска. — М.: Металлургиздат (1960).

ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И МИКРОТВЕРДОСТЬ НАПЛАВКИ ХРОМИСТОЙ СТАЛИ

Н.В. Гохфельд^{1*}, М.А. Филипов², Ю.С. Коробов^{1,2}, С.О. Морозов²¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия²Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*e-mail: gokhfeld@imp.uran.ru

Один из возможных способов решения проблемы высокого износа и коррозии деталей это дуговое напыление защитных покрытий из порошковой проволоки на базе системы Fe – Cr – C [1]. Однако, в зависимости от технологии наплавки фазовый состав и механические свойства такого покрытия могут резко отличаться [2,3,4,5]. В данной работе был проведен сравнительный анализ покрытий в зависимости от технологий их нанесения. Используя методы металлографического, рентгеновского и дюрOMETрического анализа, а также испытания на абразивную износостойкость и свариваемость были изучены покрытия из порошковой проволоки системы Fe – Cr – C наплавленные лазерной, дуговой и гибридной технологиями.

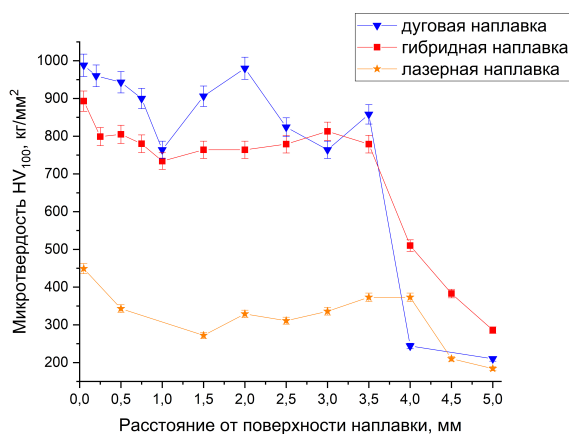


Рис. 1. Микротвердость наплавки

Целью работы являлось показать эффективность технологии лазерной наплавки с точки зрения обеспечения трещиностойкости при сварке с учетом сохранения стойкости к изнашиваемости и кавитационной эрозии.

Если в случае дуговой и гибридной технологии наплавки формируется мартенситная структура, то в результате использования лазера для наплавки получается структура, состоящая из метастабильного аустенита, который в процессе изнашивания превращается в мартенсит, в результате воздействия абразивных частиц. Это подтверждают измерения микротвердости (рис. 1).

Скорее всего, благодаря относительно низкой скорости охлаждения при гибридной и дуговой технологии наплавки происходит частичное выделение карбидов, твердый раствор обедняется хромом и углеродом, и происходит фазовый переход в мартенсит, в отличие от лазерной технологии наплавки, где эти процессы не успевают пройти.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России для ИФМ УрО РАН по теме №АААА-А19-119070490049-8 и поддержана грантом Фонда содействия инновациям (проект IRA-SME №58674).

1. Y. Korobov, M. Filippov, A. Makarov, I. Malygina, N. Soboleva, D. Fantozzi, M. Andrea, H. Koivuluoto, P. Vuoristo, *Coatings* **8**, 2 (2018).
2. Girish R. Desale, C.P. Paul, B.K. Gandhi, S.C. Jain, *Wear* **266**, 9 (2009).
3. M. Aghasibeig, H. Fredriksson, *Surface and Coatings Technology* **209** (2012).
4. L. Meng, W. Zhao, K. Hou, D. Kou, Z. Yuan, X. Zhang, J. Xu, Q. Hu, D. Wang, X. Zeng, *Materials Science and Engineering: A* **748** (2019).
5. C. Brunner-Schwer, T. Petrat, B. Graf, M. Rethmeiern, *Vacuum* **166** (2019).

НАПРЯЖЕНИЯ НЕСООТВЕТСТВИЯ ОТ ДИЛАТАЦИОННОЙ НИТИ В КЛИНЕ
СО СВОБОДНЫМИ ПОВЕРХНОСТЯМИЖ.В. Гудкина^{1,2*}, М.Ю. Гуткин^{2,3,4}, Т.С. Аргунова¹, С.А. Красницкий^{2,3,4}¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия²Санкт-Петербургский политехнический университет им. Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия³Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия⁴Университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия*e-mail: gudkinazhanna@mail.ru

Поиск упругих полей, вызванных дилатационными включениями различных форм в упругом теле со свободными угловыми границами является важной задачей в теории упругости. Такую границу можно рассматривать как клиновидный выступ или вырез с произвольным углом раскрытия. Элементарным включением в этом случае может служить бесконечно тонкая дилатационная нить, обладающая собственной трехмерной дилатацией. А ее упругие модули такие же, как и в окружающей матрице. Имея решение для такой нити, можно простым интегрированием получать аналогичные решения для длинных включений с поперечным сечением произвольной формы.

Известно, что для решения граничных задач эффективно применять метод виртуальных дефектов [1], основанный на методе поверхностных дислокаций [2]. Этот метод оперирует упругими полями распределенных виртуальных источников упругих полей для формирования граничных интегральных уравнений, решение которых является решением граничной упругой задачи. В настоящей работе методом виртуальных поверхностных дислокаций (ВПД) найдено решение задачи для дилатационной нити в упругом теле с угловой границей. Аналогичные задачи решались для краевых дислокаций в однородных [3] и композитных [4] телах клиновидной формы и винтовых дислокаций, расположенных вблизи тройного стыка различных клиновидных фаз [5]. В рамках такого подхода можно представить искомое поле напряжений σ в виде $\sigma = \sigma^\infty + \sigma^v$, где σ^∞ — известное поле напряжений дилатационной нити в бесконечной упругой среде [6], а σ^v — дополнительное поле напряжений ВПД, обеспечивающее выполнение граничных условий на угловой границе тела. В такой постановке задача сводится к отысканию четырех функций распределения ВПД из граничных условий, которые дают систему четырех интегральных уравнений. Интегральным преобразованием Меллина эта система сводится к системе алгебраических уравнений для определения образов Меллина функций распределения ВПД. В результате дополнительное поле σ^v получается в интегральном виде — в форме обратного преобразования Лапласа-Меллина от произведений известных образов Меллина напряжений отдельных ВПД и найденных образов Меллина функций распределения ВПД. Анализ полученного решения проводился численно с использованием карт напряжений дилатационной нити.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований № 19-29-12041.

1. A.L. Kolesnikova, A.E. Romanov, *Journal of Applied Mechanics* **71** (3), 409 (2004).
2. N. Louat, *Nature (London)* **196** (4859), 1081 (1962).
3. M. Hecker, A.E. Romanov, *Phys. Stat. Sol.* **A 130**, 91 (1992).
4. M. Hecker, A.E. Romanov, *Mater. Sci. Eng.* **A 164**, 411-414 (1993).
5. M.Yu. Gutkin, A.E. Romanov, E.C. Aifantis, *Phys. Stat. Sol.* **A 153**, 65-75 (1996).
6. А.Л. Колесникова, Р.М. Сорока, А.Е. Романов, *Mater. Phys. Mech.* **17**, 71-91 (2013).

ВЛИЯНИЕ ТУГОПЛАВКИХ ЭЛЕМЕНТОВ НА СТРУКТУРУ КОБАЛЬТОВЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ СПЛАВОВ

Д.И. Давыдов

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: davidov@imp.uran.ru

После открытия в 2006 году возможности упрочнения жаропрочных сплавов на основе кобальта за счёт выделения в твердом растворе на основе ГЦК кобальта (γ -фаза) упрочняющей интерметаллидной γ' -фазы на основе $\text{Co}_3(\text{Al,W})$ активно ведется поиск новых систем со схожей структурой. При этом в данной системе возможно появление других различных интерметаллидных фаз. В работе проведено исследование сплавов системы Co-Al-Mo-Nb, изучено влияния ниобия и молибдена на структуру и фазовый состав сплавов, а также на область существования γ' -фазы. Химический состав сплавов приведен в таблице 1.

Таблица 1. Химический состав сплавов, ат. %.

Сплав / Элемент	Co	Al	Nb	Mo
1	79.5	10.5	2.8	7.2
2	83.3	10.9	1.6	4.2
3	83.3	10.1	1.0	5.6

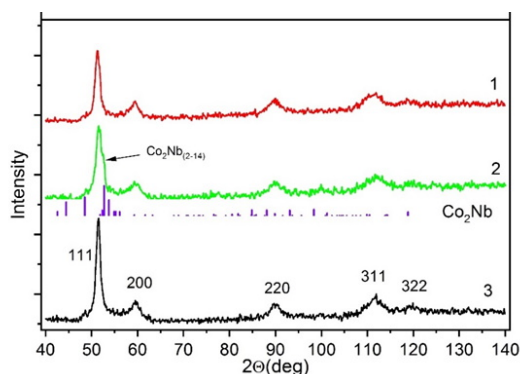


Рис. 1. Дифрактограммы исследованных сплавов системы Co-Al-Mo-Nb.

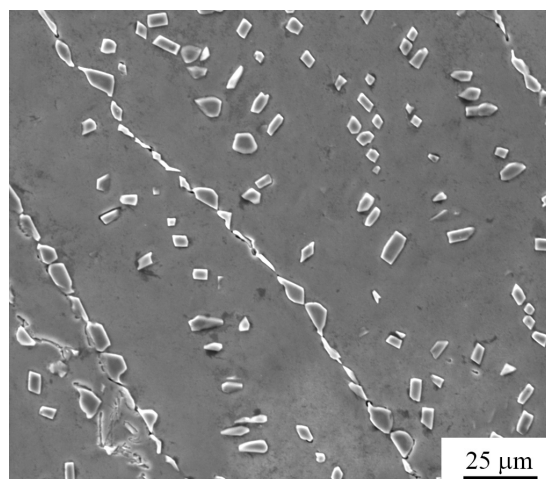


Рис. 2. Структура сплава 2 с выделениями интерметаллида Co_2Nb

Исследование структуры методом растровой электронной микроскопии проводилось на микроскопе Jeol JSM-6490LV. Фазовый состав определялся с помощью рентгеновского дифрактометра ДРОН-3 в излучении меди. На рис. 1 показаны дифрактограммы для сплавов 1 – 3, а также указан рефлекс, соответствующий фазе Co_2Nb .

Во всех сплавах наблюдается кубоидная структура образованная интерметаллидом $\text{Co}_3(\text{Mo,Nb})$. На рис. 2 показана структура сплава 2, в котором обнаружено появление интерметаллидной фазы Co_2Nb — гексагональная фаза Лавеса с параметрами решетки $a = 0.471$, $c = 1.544$ нм.

Работа выполнена при поддержке проекта в рамках бюджетной темы «Давление» АААА-А18-118020190104-3, с частичной поддержкой РФФИ № 20-33-70221.

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ ZnO

В.Н. Джафарова

Институт физики Национальной академии наук Азербайджана, Баку, Азербайджан
e-mail: vcafarova@beu.edu.az

Оксид цинка в своей природной модификации имеет гексагональную кристаллическую структуру типа вюрцита [1]. Обладая широкой запрещенной зоной, ZnO является перспективным прямозонным полупроводником. В настоящей работе представлены результаты теоретических исследований структурных и электронных свойств ZnO из первых принципов.

Основные расчеты выполнены с использованием программного пакета ATK. Для моделирования атомно-структурных и электронных свойств применялись теория функционала электронной плотности (DFT), аппроксимация локальной спиновой плотности (LSDA) и обменно-корреляционный функционал PBE. Для получения значения ширины запрещенной зоны, близкого к экспериментальному, при моделировании «идеального» кристалла ZnO использовалась Хаббард-коррекция. Взаимодействие между атомными остовами и валентными электронами описывалось с помощью псевдопотенциалов FHI, а также базисного набора DZP для программы ATK. Корреляционные эффекты учтены по схеме Ceperley–Alder–Perdew–Zunger. В разложении волновой функции были использованы плоские волны с энергией меньше 75 Ha. В качестве валентных оболочек определены двенадцать электронов Zn ($3d^{10}4s^2$) и шесть электронов кислорода ($2s^22p^4$). Оптимизация геометрии примитивной ячейки ZnO выполнялась до тех пор, пока силы, действующие на каждый атом, не становились менее, чем $0.01 \text{ эВ/\text{Å}}$, а напряжения $0.01 \text{ эВ/\text{Å}^3}$.

Проведен расчет статического самосогласованного потенциала кристаллографической структуры ZnO, на основе которого получено распределение электронной плотности, и получена зонная диаграмма структуры. Для корректного описания систем с локализованными электронами на уровне следует использовать модель Хаббарда с коэффициентами $U = 4.7 (3d); 5(4s) \text{ эВ}$ (для цинка) и $U = 5.1 \text{ эВ} (2p, \text{ для кислорода})$. Этот прием приблизит расчетное значение к экспериментальному.

Таблица. Параметры решетки, рассчитанные ATK и LSDA+ U для ZnO.

Параметр	ATK, LSDA+ U	Теоретические значения		Экспериментальные значения		
		[2]	[3]	[3]	[4]	[5]
$a, \text{Å}$	3.2495	3.280	3.238	3.25	3.281	3.250
$c, \text{Å}$	5.2069	5.282	5.232	5.201	5.256	5.204
c/a	1.60	1.61	1.62	1.60	1.60	1.60

Зонные структуры для подсистем электронов со спинов вверх и со спином вниз имеют одинаковый характер. Ширина запрещенной зоны и постоянные решетки находятся в хорошем согласии с теоретическими и экспериментальными работами (табл.). Рассчитанная зонная энергетическая диаграмма показывает, что ZnO представляет собой прямозонный материал с экстремумами, расположенными в центре зоны Бриллюэна. По результатам моделирования зонных структур и плотности электронных состояний установлено, что значение ширины запрещенной зоны составляет 3.4 эВ (3.35 эВ [6], 3.44 эВ [7]).

1. T. Makino, Y. Segawa, M. Kawasaki *et al.*, Appl. Phys. Lett. **78**, 1237 (2001).
2. S. Ghadah Alghamdi and Z. Ali. Middle-East J. of Scientific Research **13**, 9, 1144 (2013).
3. F. Decremps, F. Datchi *et al.*, Phys. Rev. B **68**, 104101 (2003).
4. A.S. Mohammadi, S.M. Baizae and H. Salehi. World Applied Sciences **10**, 1530 (2011).
5. H. Karzel, W. Potzel *et al.*, Phys. Rev. B **53**, 11425 (1996).
6. K. Lin, H. Cheng *et al.*, Chemical Physics Letters **409**, 208 (2005).
7. D.C. Reynolds, D.C. Look *et al.*, Phys. Rev. B **60**, 4, 2340 (1999).

ГИБРИДНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ МЕХАНОХИМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ И СВС ПРОЦЕССА
СИНТЕЗА УГЛЕКОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ, ЛЕГИРОВАННЫХ ЛИТИЕМ,
ДЛЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ ОПТИКИ

И.С. Жеребцов*, А.С. Нарикович, В.В. Савин, В.А. Чайка, А.А. Баранников

Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия

*e-mail: zheredcov@mail.ru

Нанокремниевые материалы с разнообразными физико-химическими свойствами приобретают все большую популярность [1]. Одним из перспективных направлений их применения является преломляющая рентгеновская оптика для источников нового поколения. Синтез нанокремниевых материалов с повышенной терморadiационной стойкостью и распределением средней электронной плотности, обеспечивающей требуемые параметры рассеяния рентгеновского излучения (рентгенооднородный материал) является весьма актуальной задачей [2, 3]. В связи с этим в работе предложена и апробирована гибридная технология (ГТ) механохимической обработки (МХО) и самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) для получения легированных литием кремниевых композиционных материалов из графита марки МПГ-7.

ГТ включает длительную (более 20 часов) обработку в естественной технологической среде порошковой смеси исходного графита и карбоната лития в шаровой мельнице заданной конструкции (E_{\max} или РМ100) и последующий СВС-процесс МХО-порошка при вскрытии стаканов мельницы на воздухе.

Полученные ГТ-порошки и спрессованные из них образцы исследовали методами цифровой металлографии (SIAMS800), растровой электронной микроскопии (JSM-6390LV) и рентгеноструктурного анализа (ДРОН-3М, Cu-K_α излучения, β -фильтр). Особенности поглощения (пропускания) рентгеновского излучения изготовленными образцами проводили на УНУ Synchrotron LIKE (<http://xoptics.ru/r-and-d/unikalnaya-nauchnaya-ustanovka/>).

После МХО в шаровой мельнице заданного типа на воздухе самопроизвольно инициируется СВС-процесс. Характер его протекания существенно зависит от типа используемой шаровой мельницы. Обработка в E_{\max} обеспечивает более интенсивный СВС процесс, чем обработка в РМ-100. СВС сопровождается тлением и выделением газа CO и CO_2 . После интенсивного СВС-процесса в синтезированном порошке присутствует рентгеноаморфная составляющая, на базе графита, которая тверже других фаз и поэтому влияет на его компактируемость и плотность спрессованного изделия. Обнаружены аномальные рентгенооптические свойства спрессованных образцов: при меньшей пикнометрической плотности они более чем в два раза поглощают характеристическое рентгеновское излучение от УНУ SynchrotronLIKE по сравнению с графитом той же толщины.

Предложенная и апробированная ГТ синтеза углекомпозиционного порошкового материала, легированного литием, рекомендуется для изготовления элементов для рентгеновской оптики, характеризующихся аномальными свойствами поглощения.

Работа выполнена при финансировании РФФИ по гранту № 19-72-30009 от 24.04.2019 г.

1. O.N. Baklanova, V.A. Drozdov, A.V. Lavrenov, Journal of Alloys and Compounds **646**, 145 (2015)
2. V.P. Isupov, N.V. Eremina and N.V. Bulina, Izvestiya Tomsk Polytechnic University **322**, №3, 29 (2013)
3. V.P. Isupov, N.V. Bulina, N.V. Eremina, Inorganic Materials **51**, 345 (2015).

ДИНАМИКА ПЛОТНОСТИ ДИСЛОКАЦИЙ α -ТИТАНА ПРИ ЕГО НАГРЕВЕ: *in-situ* ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

И.В. Иванов

Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия

e-mail: i.ivanov@corp.nstu.ru

В работе был реализован подход, основанный на *in-situ* исследовании дислокационной структуры предварительно деформированного технически чистого α -титана в процессе его индукционного нагрева с использованием метода дифракции синхротронного излучения. Плотность дислокаций рассчитывалась согласно модифицированным моделям Вильямсона–Холла и Уоррена–Авербаха [1,2]. Моделирование процесса нагрева предварительно деформированного материала проводилось методом молекулярной динамики с использованием свободного пакета LAMMPS. В рамках работы использовались модели моно- и поликристалла α -титана ($8 \cdot 10^6$ и $1,031 \cdot 10^6$ атомов, соответственно).

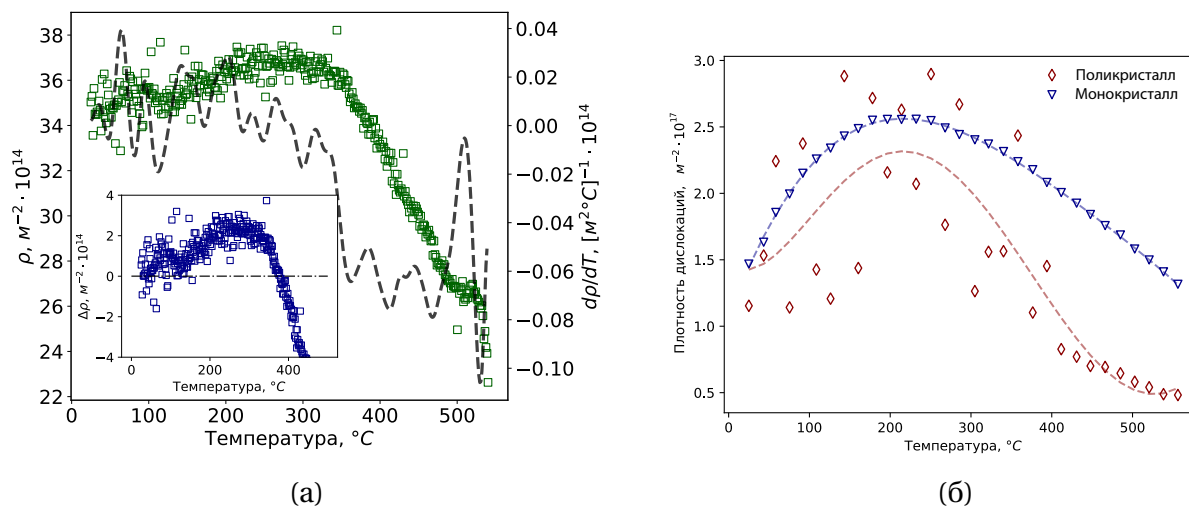


Рис. 1. Изменение плотности дислокаций α -титана в процессе его нагрева согласно экспериментальным данным (а); результатам моделирования (б). Врезка на рисунке (а) показывает изменение плотности дислокаций относительно начального состояния на температурном интервале (25–400°С). Пунктирная линия на рисунке (а) соответствует аппроксимации производной параметра по температуре ($d\rho/dT$). В случае рисунка (б) она обозначает аппроксимацию плотности дислокаций методом наименьших квадратов полиномами второй и четвертой степени (для моно- и поликристалла, соответственно)

Согласно результатам экспериментальных данных, на начальном этапе нагрева (до $\sim 300^\circ\text{C}$) происходит рост плотности дислокаций на $\sim 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ (рис. 1а). Подобная динамика плотности наблюдается и для моделей нагрева моно- и поликристаллов (рис. 1б). Причиной появления данного явления является частичная релаксация напряжений, возникших в результате предварительной пластической деформации.

1. T. Ungar, A. Borbely, Applied Physics Letters **69**, 21 (1996).
2. T. Ungar, Powder Diffraction **23**, 2 (2008).

СТРУКТУРНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ В АМОРФНОЙ ФАЗЕ ТОНКОПЛЕНОЧНОГО
НАНОГРАНУЛИРОВАННОГО КОМПОЗИТА $(x)\text{Ni} - (1 - x)\text{PZT}$

А.В. Калгин

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

e-mail: kalgin_alexandr@mail.ru

Тонкопленочные наногранулированные композиты типа металл-диэлектрик, в которых металлические гранулы с размерами в несколько нанометров случайным образом распределены в диэлектрической матрице, являются весьма перспективными материалами для практического применения. Обусловлено это тем, что такие композиты с составами до порога перколяции, благодаря спин-зависимому туннелированию в них электронов, обладают рядом важных для материаловедения и практического применения физических свойств, существенно отличающихся от физических свойств объемных композитов металл-диэлектрик. Одним из перспективных методов создания тонкопленочных наногранулированных композитов типа металл-диэлектрик является метод ионно-лучевого распыления благодаря возможности получения пленок из различных химических соединений. В то же время пленки сложных оксидов, полученные методом ионно-лучевого распыления мишеней на ситалловые подложки при комнатной температуре, являются аморфными. Аморфные материалы находятся в состоянии метастабильного равновесия, а значит при нагреве и изотермических отжигах ниже температуры кристаллизации в них протекают процессы, обусловленные самопроизвольной перестройкой атомной структуры (процессы структурной релаксации). Переход в состояние нового метастабильного равновесия сопровождается изменением физических свойств аморфных материалов. Эти свойства являются структурно-чувствительными, и структурная релаксация влияет на такие свойства. Поэтому целью настоящей работы являлось установление закономерностей и природы структурной релаксации в тонкопленочном наногранулированном композите $(x)\text{Ni} - (1 - x)[\text{Pb}_{0.81}\text{Sr}_{0.04}(\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5})_{0.15}][(\text{Zr}_{0.575}\text{Ti}_{0.425})]\text{O}_3$ (далее $(x)\text{Ni} - (1 - x)\text{PZT}$), полученном методом ионно-лучевого распыления.

Структурная релаксация в композите с $x = 0; 0.12$ и 0.21 ат.% была изучена по измерениям внутреннего трения Q^{-1} на частоте ~ 11 Гц при температурах $451 - 623$ К изотермического отжига образцов на воздухе ниже температуры кристаллизации. Температура кристаллизации для аморфной фазы композита с $x = 0; 0.12$ и 0.21 ат.% составляла $673, 648$ и 633 К, соответственно. Выявлено уменьшение Q^{-1} со временем, достаточно хорошо аппроксимирующееся растянутой экспоненциальной функцией Кольрауша. Показатель степени β принимал значения от 0.95 до 1.29 . Релаксация происходит в аморфной фазе композита и является структурной, поскольку после изотермического отжига переход аморфного материала на основе PZT в новое метастабильное состояние сопровождается его структурной перестройкой. Эта перестройка является необратимой, так как до и после отжига значения Q^{-1} отличаются, и термически активированной, потому что подчиняется аррениусовской зависимости. Установлено, что для разных составов композита значения энергии активации U лежат в интервале $0.013 - 0.016$ эВ, а предэкспоненциального множителя τ_0 — в диапазоне $17.21 - 17.43$ с. Обнаруженный рост β с увеличением температуры изотермического отжига указывает на переход аморфной фазы в новое метастабильное состояние, характеризующееся большей подвижностью структурных элементов. Зависимости $\beta(T)$, времени релаксации $\tau(T)$ и $\tau(x)$ находятся в качественном согласии с механизмом релаксации напряжений в локальных областях аморфного материала.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФ № 17-72-20105.

ПОЛУЧЕНИЕ, СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ТРОЙНОГО КОМПОЗИТА Al/Cu/Mg

А.А. Калонов*, А.Ю. Волков, И.Г. Бродова

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: kalonov@imp.uran.ru

Исследована эволюция структуры, механических и электрических свойств тройного Al/Cu/Mg-композиата в процессе деформации и последующих термообработок. Изготовление тройного композиата проводили методом гидроэкструзии в лабораторной установке М – 20 [1]. Исходным материалом служил пруток $\varnothing 18$ мм из Al-сплава АМг–2. В торце этого прутка было просверлено 7 отверстий $\varnothing 3$ мм, в которые были вставлены прутки Cu/Mg-композиата [2]. Полученную сборку помещали в рабочий контейнер установки высокого давления и проводили гидроэкструзию при комнатной температуре последовательно через матрицы диаметром 10, 6 и 3 мм. Дальнейшая деформация композиата до получения проволоки $\varnothing 1.5$ мм (из которой вырезались образцы для механических испытаний на растяжение) и тонкой проволоки $\varnothing 0.25$ мм (которая использовалась для резистометрических исследований) проведена методом волочения. Основная цель получения и исследования такого тройного композиата заключалась в выяснении возможности его упрочнения путем формирования высокопрочных эвтектик и интерметаллических фаз на Al/Cu и Cu/Mg интерфейсах.

По результатам измерения микротвердости и рентгеноструктурного анализа установлено, что в процессе деформации на интерфейсах Al/Cu и Cu/Mg идут твердотельные реакции. Согласно элементному анализу, на границе Al-матрицы и меди формируется тонкий (1 – 2 мкм) слой из алюминидов меди AlCu и Al₂Cu. На интерфейсе Cu/Mg интерметаллидных фаз не обнаружено.

Резистометрия тройного композиата показала, что при нагреве до 300°C наблюдается линейный рост электросопротивления, который нарушается при дальнейшем повышении температуры (нагрев производился до 450°C). При охлаждении до 430°C на температурной зависимости электросопротивления зафиксировано плато. Все перечисленные аномалии могут свидетельствовать о возникновении новых фаз на интерфейсах композиата, что может привести к изменению его свойств в результате термообработки. Механические испытания показали, что отжиги экструдированного Al/Cu/Mg-композиата в интервале температур 350 – 450°C приводят к снижению предела текучести от 270 до 100 МПа, однако последующая деформация на 75% восстанавливает прочностные свойства. Предел прочности экструдированного композиата в отожженном состоянии составляет 250 МПа.

Проведенное исследование выявило, что Al/Cu/Mg-композиат имеет низкую термическую устойчивость, а выбранное чередование компонентов не является оптимальным. Поскольку самая легкоплавкая эвтектика в таком композиате образуется на Al/Cu-интерфейсе, нагрев выше 450°C приводит к нарушению целостности образцов. По результатам экспериментов последовательность элементов в тройном композиате была изменена, при этом наружной стала Cu-оболочка. В таком композиате медная матрица будет обеспечивать высокую электропроводность, а образующиеся при нагреве эвтектики и интерметаллиды на основе Cu-Al и Al-Mg, повысят прочностные свойства материала, сохранив при этом целостность образцов. Выбранная методика позволит получить высокопрочный проводник электрического тока на основе алюминия и меди.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-33-90005.

1. A. Kalonov, A. Glukhov, A. Volkov, *Procedia Manufacturing* **50**, 800 (2020).
2. А.Ю.Волков, А.А.Калонов, Д.А.Комкова, А.В.Глухов, *ФММ* **119**, 10 (2018).

СВОЙСТВА КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ КАРБИДА КРЕМНИЯ, ПОЛУЧЕННОЙ МЕТОДОМ ПЛАЗМЕННО-ИСКРОВОГО СПЕКАНИЯ (SPS)

Г.Д. Кардашова^{1*}, С.У. Ризаханова², Д.Ш. Дибиргаджиев²

¹Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

²Дагестанский государственный технический университет, Махачкала, Россия

*e-mail: gulya-kall@yandex.ru

Задачей исследований являлась оптимизация составов смесей исходных компонентов и режимов SPS для достижения комплекса прогнозируемых физико-механических свойств керамики на основе SiC-AlN.

Исследуемые образцы керамики SiC-AlN были получены при различных режимах SPS-спекания, с введением в исходные смеси порошков дополнительно спекающей добавки оксид иттрия (Y_2O_3), являющейся промоутером процесса спекания. Температура спекания, °C — 1400, 1500, 1600, 1700, 1800; давление прессования — 50 МПа; длительность спекания при рабочей температуре, мин. — 3, 6, 9, 12, 15. Оксид иттрия вводили первоначально в порошок AlN (3 и 7% по отношению к AlN), а затем готовили смеси с SiC.

В ходе эксперимента выявлено, что при спекании образцов с добавкой 7% оксида иттрия при 1800°C в пресс-форме наблюдается формирование жидкой фазы, которая заполняет пространство между частицами карбида кремния до образования плотного материала. Увеличение концентрации активирующей добавки Y_2O_3 приводит к росту испарения оксидов и возрастанию их взаимодействия с карбидом кремния, что уменьшает плотность SiC-материала. Таким образом, оптимальной является добавка Y_2O_3 — 7 мас. %.

Установлено, что введение Y_2O_3 в смесь порошков SiC-AlN оказывает заметное влияние на плотность керамики в диапазоне температур (1400-1800)°C, увеличивая плотность до 3.25 г/см³ (98.5% от теоретической плотности), что превышает значения плотности для керамики, полученной горячим прессованием.

Изучение кинетики спекания показало, что процесс уплотнения керамики SiC-AlN без Y_2O_3 значительно зависит от времени выдержки на режиме, в то время, как для состава SiC(75%)–AlN(22%)– Y_2O_3 (3%) плотность образцов меняется незначительно.

Изучена температуропроводность образцов керамики различного состава, полученных при температуре спекания 1800°C и времени на режиме 6 мин. Установлено, что добавление оксида иттрия увеличивает температуропроводность керамики на основе SiC-AlN.

Установленные оптимальные режимы SPS для спекания многокомпонентной керамики состава SiC(75%)–AlN(22%)– Y_2O_3 (3%) (1800°C/50МПа/15 мин на режиме) обеспечивают формирование 100%-плотного композита, значение микротвердости которого составило 26.7 ГПа, что позволяет рекомендовать эти режимы для изготовления легкого и высокоплотного керамического материала заданного состава с прогнозируемыми свойствами.

Представленные результаты показывают, что спарк-плазменным методом из порошка микронной фракции могут быть получены высокоплотные образцы керамики на основе карбида кремния с высокой (до 100%) плотностью, что открывает перспективы широкого применения метода SPS для экономичного производства высококачественных керамических изделий из карбида кремния заданного состава с прогнозируемыми свойствами. Исследования этих перспективных результатов продолжаются, и ведутся эксперименты с более мелкодисперсным сырьем.

СТРУКТУРА И ТРАНСПОРТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МОНОКРИСТАЛЛОВ
(ZrO₂)_{0.91-x}(Sc₂O₃)_{0.09}(Yb₂O₃)_x В ЗАВИСИМОСТИ ОТ КОНЦЕНТРАЦИИ ОКСИДА
ИТТЕРБИЯ

М.А. Борик¹, Г.М. Кораблёва^{1,2}, А.В. Кулебякин^{1*}, И.Е. Курицына^{1,2}, Е.Е. Ломонова¹,
М.Н. Маякова¹, В.А. Мызина¹, Н.Ю. Табачкова^{1,3}, А.С. Числов^{1,3}

¹Институт общей физики им. А.М. Прохорова, Москва, Россия

²Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия

³Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия

*e-mail: kulebyakin@lst.gpi.ru

Использование в твердых электролитах на основе диоксида циркония в качестве стабилизирующей примеси оксида скандия приводит к получению материала с повышенной ионной проводимостью. Электролитические мембраны из такого материала позволяют существенно понизить рабочую температуру электрохимического устройства при сохранении высокой проводимости, что весьма важно с точки зрения увеличения ресурса эксплуатации и надежности электрохимических реакторов, твердооксидных топливных элементов, электролизеров и сенсоров.

При стабилизации диоксида циркония оксидом скандия границы существования фаз определены только приблизительно, что связано с существованием метастабильных фаз в этой системе и, соответственно, зависимостью фазового состава от метода и условий синтеза материала. Дополнительное легирование твердых растворов ZrO₂ — Sc₂O₃ оксидами редкоземельных элементов позволяет получать стабильные кубические твердые растворы с высокой проводимостью.

Цель настоящей работы — оценить влияние на фазовый состав, структуру и электрофизические свойства введения в твердые растворы ZrO₂ — 9 мол.% Sc₂O₃ дополнительного легирующего оксида иттербия в количестве от 0.5 до 2 мол.%.

Монокристаллы твердых растворов были выращены направленной кристаллизацией расплава в холодном контейнере. Фазовый состав образцов контролировали методами спектроскопии комбинационного рассеяния света и рентгеновской дифрактометрии. Структуру кристаллов исследовали методом просвечивающей электронной микроскопии. Исследования транспортных характеристик кристаллов проводили методом импедансной спектроскопии в температурном интервале 450 — 900°С в частотном диапазоне 1 Гц— 5 МГц.

Показано, что стабилизация ZrO₂ совместно 9 мол.% Sc₂O₃ и 1 мол.% Yb₂O₃ позволяет получить прозрачные однородные кристаллы с псевдокубической структурой, которые обладают высокой фазовой устойчивостью. Удельная проводимость кристаллов в зависимости от концентрации Yb₂O₃ носит немонотонный характер. Максимальной проводимостью во всем температурном интервале обладали кристаллы (ZrO₂)_{0.9}(Sc₂O₃)_{0.09}(Yb₂O₃)_{0.01}. Увеличение в составе твердого электролита содержания Yb₂O₃ до 2 мол.% приводило к снижению проводимости кристаллов вследствие образования кислород-ионных кластеров.

Работа подготовлена при поддержке гранта РФФИ № 19-72-10113.

КОРРОЗИОННАЯ СТОЙКОСТЬ ДЕТОНАЦИОННЫХ ПОКРЫТИЙ $\text{Fe}_{66}\text{Cr}_{10}\text{Nb}_5\text{V}_{19}$ И.Д. Кучумова^{1,2*}, И.С. Батраев², Н.Ю. Черкасова¹¹Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия²Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения РАН, Новосибирск, Россия*e-mail: ivannakz@mail.ru

Металлические стекла вызывают интерес благодаря высоким показателям механической прочности, износостойкости и коррозионной стойкости, а также способности к формованию в области переохлажденной жидкости. Порошки многокомпонентных сплавов с высокой стеклообразующей способностью используют для получения объемных материалов и покрытий. Металлические стекла могут выступать в качестве армирующих компонентов композиционных материалов с металлическими матрицами или в качестве матричной компоненты газотермических покрытий с керамическими/твердосплавными/карбидными армирующими частицами [1].

Целью данной работы является определение коррозионной стойкости детонационных покрытий из многокомпонентного сплава на основе железа в условиях воздействия нейтрального соляного тумана (5–% NaCl) в течение 600 часов и исследование электрохимического поведения покрытий в различных электролитах (3.5% NaCl + HCl при pH 3.0 и pH 5.5 и 3.5% NaCl + NaOH при pH 10.0).

Напыление покрытий проводили с использованием детонационного комплекса Computer-controlled detonation spraying CCDS2000, разработанного в ИГиЛ СО РАН [2]. Для напыления использовали взрывчатую смесь $\text{O}_2 + \text{C}_2\text{H}_2$ при молярном соотношении $\text{O}/\text{C} \approx 1$. Объем взрывчатой смеси варьировали в диапазоне 40 – 60% от объема ствола установки. Проведены расчеты скоростей и температур частиц на выходе из ствола детонационной установки.

Результаты исследований фазового состава, микроструктуры и свойств полученных покрытий показывают, что выбранные параметры напыления позволяют формировать покрытия с малой остаточной пористостью, высоким содержанием аморфной фазы и твердостью, соизмеримой с твердостью аморфных лент из сплавов на основе железа, полученных закалкой из расплава. Результаты исследования фазового состава и морфологии поверхности покрытий после испытаний в камере соляного тумана свидетельствуют об их высокой коррозионной стойкости в нейтральном соляном тумане, содержащем большое количество анионов хлора. На поперечных сечениях покрытий после испытаний отсутствуют следы распространения коррозии, что подтверждает эффективность применения детонационных покрытий со структурой металлического стекла из сплава $\text{Fe}_{66}\text{Cr}_{10}\text{Nb}_5\text{V}_{19}$ для защиты изделий, работающих в условиях повышенной влажности, без дополнительной герметизации поверхности. Полученная серия покрытий также обладает достаточно высокой коррозионной стойкостью в исследованных электролитах. Потенциалы коррозии составляют от –280 до –490, плотности токов коррозии составляют от 0.6 до $6.1 \cdot 10^{-6} \text{ A} \times \text{cm}^{-2}$ и практически не изменяются при варьировании pH электролита. Для всех покрытий характерно наличие широкой области пассивности.

Исследование выполняется при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Новосибирской области в рамках проекта № 19-43-543034.

1. C. Zhang *et al.*, Acta Mater. **72**, 239251 (2014).

2. V. Ulianitsky *et al.*, J. Therm. Spray. Technol. **20**, 791801 (2011).

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ИЗНАШИВАНИЯ $\text{Fe}_{66}\text{Cr}_{10}\text{Nb}_5\text{V}_{19}$ ДЕТОНАЦИОННЫХ ПОКРЫТИЙ В УСЛОВИЯХ ТРЕНИЯ О НЕЖЕСТКО ЗАКРЕПЛЕННЫЕ ЧАСТИЦЫ АБРАЗИВА

И.Д. Кучумова^{1,2*}, Д.К. Рыбин², Н.Ю. Черкасова¹

¹Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия

²Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск

*e-mail: ivannakz@mail.ru

Формирование функциональных газотермических покрытий позволяет улучшить эксплуатационные характеристики деталей при незначительном повышении их стоимости. Группа сплавов на основе железа, химический состав которых соответствует правилам формирования металлического стекла [1], являются перспективными материалами для применения их в качестве защитных покрытий, полученных методами газотермического напыления. Благодаря низкой стоимости, по сравнению с другими металлическими сплавами с высокой стеклообразующей способностью, металлические аморфные сплавы на основе железа представляют особый интерес.

Целью данной работы является исследование механизмов изнашивания детонационных покрытий из многокомпонентного сплава на основе железа в условиях трения о нежестко закрепленные абразивные частицы согласно стандарту ASTM G65D.

Напыление покрытий проводили с использованием детонационного комплекса Computer-controlled detonation spraying CCDS2000, разработанного в ИГиЛ СО РАН [2]. Для напыления использовали взрывчатую смесь $\text{O}_2 + \text{C}_2\text{H}_2$ при эквимолярном соотношении. Объем взрывчатой смеси варьировали в диапазоне 40–60 % от объема ствола установки. Перед испытаниями на трение образцы покрытий подвергались шлифованию на абразивных бумагах. Трибологические испытания проводились на установке, спроектированной и изготовленной в ИГиЛ СО РАН, обеспечивающей параметры испытаний в соответствии со стандартом ASTM G65D (испытания на трение о нежестко закрепленные абразивные частицы). В качестве абразива использовался порошок электрокорунда, ГОСТ 28818–19, марка 13А. Захватываемые диском абразивные частицы перемещались по поверхности тестируемого образца, что приводило к износу поверхности материалов.

Показатели относительной износостойкости детонационных покрытий на основе железа на 40% выше износостойкости образца-эталоны, в качестве которого была выбрана нержавеющая сталь 12X18H10T в состоянии поставки. Наилучшими трибологическими свойствами в условиях трения о нежестко закрепленные частицы абразива показывает покрытие, полученное при заряде ацетилено-кислородной взрывчатой смеси равной 50%.

Исследования коррозионной стойкости детонационных покрытий $\text{Fe}_{66}\text{Cr}_{10}\text{Nb}_5\text{V}_{19}$ в условиях атмосферной коррозии (условия были смоделированы в камере соляного тумана Ascott Analytical Equipment Ltd S120 в распыляемом 5%-м растворе NaCl согласно стандарту ISO 9227) в течение 600 часов показали, что покрытия с аморфной структурой имеют большую стойкость к коррозии, по сравнению с нержавеющей сталью 12X18H10T [3]. На поверхности образцов нержавеющей стали появились следы коррозии спустя 300 часов, что не наблюдалось на образцах покрытий с аморфной структурой спустя 600 часов.

Исследование выполняется при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Новосибирской области в рамках проекта № 19-43-543034.

1. C. Suryanarayana *et al.*, *Int. Mater. Rev.* **58**, 131166 (2013).
2. V. Ulianitsky *et al.*, *J. Therm. Spray. Technol.* **20**, 791801 (2011).
3. I. Kuchumova *et al.*, *Metal Working and Material Science* **22**, 95105 (2020).

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ ОТЖИГ ТОНКИХ ПЛЕНОК НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКОГО $a - SiO_x$

Н.А. Лунев^{1,2*}, И.Е. Меркулова¹, Е.А. Баранов¹, А.О. Замчий¹

¹Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск, Россия

²Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

*e-mail: nanochirik9@gmail.com

Тонкие пленки диоксида кремния с нанокристаллическими включениями Si (nc-Si/SiO₂) вызывают большой интерес в исследованиях ввиду фотолюминесценции в видимом диапазоне спектра nc-Si и высокой химической стабильности и прозрачности SiO₂ [1].

Высокотемпературный отжиг (ВТО) аморфного нестехиометрического оксида кремния ($a-SiO_x$, $0 < x < 2$) при 800 – 1000°C является основным методом получения nc-Si/SiO₂ [2]. Существенное влияние на структуру и свойства получаемого материала, помимо температуры и времени процесса, оказывает состав исходных пленок $a-SiO_x$. В данной работе было изучено влияние стехиометрического коэффициента $a-SiO_x$ на структурные свойства и морфологию тонких пленок nc-Si/SiO₂.

В ходе работы методом газоструйного химического осаждения с активацией электронно-пучковой плазмой из смеси SiH₄ и Ar, H₂, O₂ на подложках из кварца и монокристаллического кремния были синтезированы тонкие пленки $a-SiO_x$ с x от 0.47 до 1.63. Различная стехиометрия была получена варьированием расхода смеси аргона и моносилана в пределах от 18 до 89 см³/мин при нормальных условиях, а расходы кислорода и водорода были постоянны и равны, соответственно, 3 и 386 н.см³/мин.

Концентрация кислорода была установлена методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии. Аморфная структура синтезированных пленок была подтверждена методом комбинационного рассеяния света (КРС). ВТО пленок в течение 2 часов при 950°C в аргоновой атмосфере привел к формированию nc-Si в материале. На рис. 1 представлены спектры КРС пленок $a-SiO_x$ с $x = 0.47, 1.63$. Они содержат характерные пики с центрами на 140 см⁻¹, 320 см⁻¹, 420 см⁻¹, 480 см⁻¹, соответствующие поперечным, продольным акустическим и оптическим (TA, LA и TO, LO) колебаниям фононов. Наличие nc-Si в пленке подтверждается выраженным пиком с центром на 515 см⁻¹. Исследования методом КРС показали, что средний размер кристаллита вырос с 4.42 до 5.84 нм, а степень кристалличности пленки уменьшилась с 69% до 42% с ростом стехиометрии в исходных пленках $a-SiO_x$.

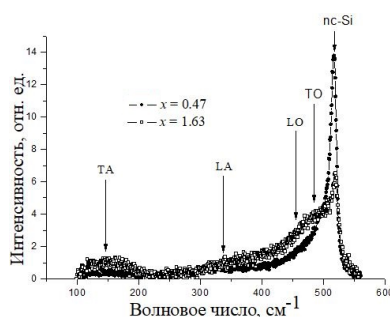


Рис. 1. Спектр КРС пленок $a-SiO_x$ с $x = 0.47$ и 1.63 .

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ (проект № 19-79-10143).

1. S. Janz, P. Löper, M. Schnabel, *Materials Science and Engineering: B* **178**, 542 (2013).
2. A. Sarikov, *Physica Status Solidi (a)* **217**, 1900513 (2020).

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ОТЖИГА НА ЗОЛОТО-ИНДУЦИРОВАННУЮ КРИСТАЛЛИЗАЦИЮ ТОНКИХ ПЛЕНОК $a-SiO_{0.2}$

Н.А. Лунев^{1,2*}, И.Е. Меркулова¹, Е.А. Баранов¹, А.О. Замчий¹

¹Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск, Россия

²Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

*e-mail: nanochirik9@gmail.com

Одним из перспективных методов получения тонких пленок поликристаллического кремния (poly-Si) на дешевых нетугоплавких подложках является метод металл-индуцированной кристаллизации (МИК) [1]. Золото широко используется в процессе МИК [1], не образуя силицидов, при этом точка эвтектики системы Au-Si существенно ниже, чем температура твердотельной кристаллизации аморфного кремния (363°C и 650°C соответственно). Тонкие пленки аморфного нестехиометрического оксида кремния ($a-SiO_x$, $0 < x < 2$) успешно используются в процессе МИК с Al [2] и In [3] катализаторами. В данной работе было исследовано влияние температуры отжига на структуру и морфологию тонких пленок poly-Si, полученных в результате золото-индуцированной кристаллизации $a-SiO_{0.2}$.

Исходные образцы были получены в компоновке «подложка/Au/ $a-SiO_{0.2}$ ». Сначала на подложки из кварца методом термовакуумного напыления были нанесены тонкие пленки золота толщиной около 30 нм. Далее на полученных структурах методом газофазного плазмохимического осаждения были синтезированы слои $a-SiO_{0.2}$ толщиной 150 нм. Полученный материал был подвергнут отжигу в диапазоне от 250 до 700°C в течение 10 часов в высоком (10^{-5} Па) вакууме. Структурные характеристики, морфология и элементный состав отожженных пленок были изучены методами комбинационного рассеяния света, энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ).

Метод ПЭМ показал, что в результате обмена слоями [2] на подложке формируется тонкая пленка poly-Si. При этом верхний слой представляет собой смесь Au и $a-SiO_x$ с включениями нанокристаллического кремния. Установлено, что с увеличением температуры отжига доля аморфного кремния в верхнем слое снижается (рис. 1), о чем свидетельствует уменьшение интенсивности широкого пика на 480 см^{-1} , соответствующего данной фазе Si.

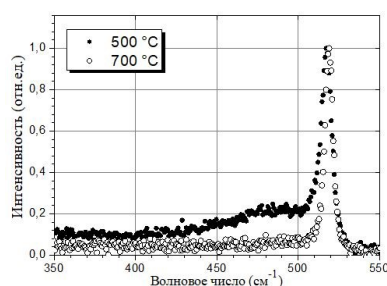


Рис. 1. Спектр комбинационного рассеяния света пленок $a-SiO_{0.2}$ после отжига при температуре 500 и 700°C.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ (проект № 19-79-10143).

1. K. Toko, T. Suemasu, *Journal of Physics D: Applied Physics*, **53**, 373002 (2020).
2. A.O. Zamchiy *et al.*, *Applied Physics A*, **124**, 646 (2018).
3. A.O. Zamchiy *et al.*, *Technical Physics Letters*, **46**, 583 (2020).

СИНТЕЗ МАТЕРИАЛОВ ИЗ ПРЕКЕРАМИЧЕСКОЙ БУМАГИ НА ОСНОВЕ Ti_3SiC_2
МЕТОДОМ ИСКРОВОГО ПЛАЗМЕННОГО СПЕКАНИЯ

Ю.Р. Мингазова, Е.П. Седанова, М.С. Сыртанов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия
*e-mail: yula.mingazova@mail.ru

Карбосилицид титана (Ti_3SiC_2) — это хорошо изученное соединение среди наноламинированных тройных соединений $M_{n+1}AX_n$, где М — переходный металл, А — элемент III-IV группы Периодической таблицы и Х — углерод или азот. Соединения на основе МАХ-фаз демонстрируют уникальное сочетание свойств керамики и металлов, среди которых высокая механическая прочность, хорошая термическая стойкость, высокая тепловая и электрическая проводимость, высокая стойкость к окислению, химическая инертность.

Существует большое множество методов получения керамики на основе Ti_3SiC_2 , однако в данной работе для получения образцов используется метод искрового плазменного спекания (ИПС) [1] прекерамических бумаг, позволяющий получать плотный материал за относительно короткий промежуток времени. Прекерамическая бумага [2] представляет собой композитный материал с матрицей из органических волокон целлюлозы и неорганического порошкового наполнителя.

Целью настоящей работы является синтез керамических материалов из прекерамической бумаги на основе Ti_3SiC_2 методом ИПС и анализ влияния параметров спекания на микроструктуру и фазовый состав полученных образцов.

Образцы керамики, синтезированные методом ИПС при температурах 1100 – 1200°C и в диапазоне давлений 20 – 50 МПа, времени выдержки 10 минут, были исследованы методами сканирующей электронной микроскопии и рентгеноструктурного анализа.

В результате проведенных исследований были синтезированы образцы керамики Ti_3SiC_2 методом ИПС прекерамических бумаг при температурах 1100 и 1200°C и в диапазоне давлений 20–50 МПа в течение 10 минут. Рентгеноструктурный анализ показал, что синтезированный материал состоит из трех кристаллических фаз Ti_3SiC_2 , TiC и $TiSi_2$, содержание которых существенно зависит от параметров спекания. Содержание фазы Ti_3SiC_2 уменьшается с 65 до 54.5 об.% при увеличении температуры спекания с 1100 до 1200°C, соответственно. Повышение температуры и давления спекания приводит к уплотнению композитов на основе Ti_3SiC_2 . Вытянутые поры не были обнаружены в образцах, полученных при давлении 50 МПа. Значение прочности на изгиб достигало максимума (300 МПа) в композитах, синтезированных при температуре 1200°C и давлении 50 МПа. На основании приведенных результатов можно сделать вывод, что ИПС может быть успешно использовано для синтеза керамики из прекерамической бумаги на основе МАХ-фазы Ti_3SiC_2 .

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 19-19-00192.

1. G. Ying, X. He, M. Li, S. Du, W. Han, F. He, Mater. Sci. Eng: A **528**, 2635 (2011).
2. N. Travitzky, H. Windsheimer, T. Fey, P. Greil, Journal of the American Ceramic Society **91**, 3477 (2008).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ

Р.М. Мосина*, И.М. Кузьмин

Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия

*e-mail: rinetta.mosina@bk.ru

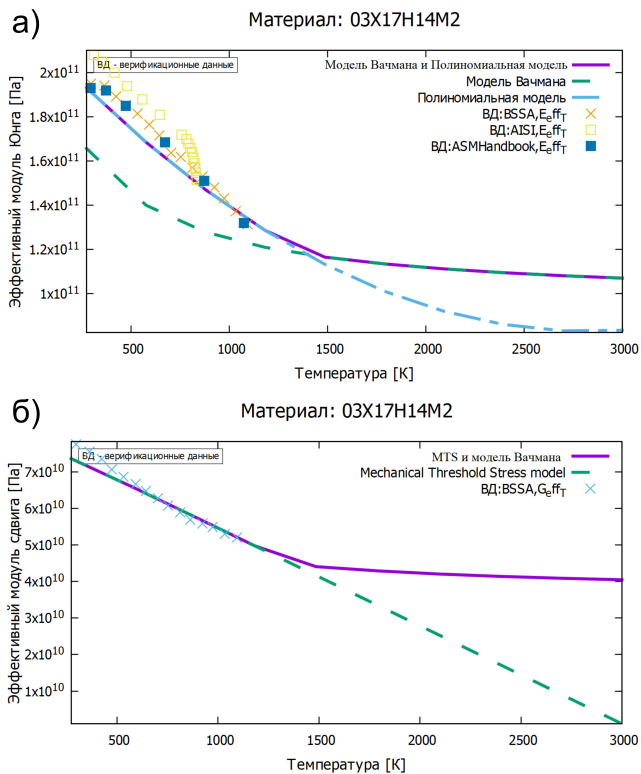


Рис. 1. Результаты расчета эффективных механических свойств а) модуль Юнга, б) модуль сдвига

исследования пластичности) [3,4], модели Вачмана и их комбинации в зависимости от значения температуры. Данные модели применимы для различных металлов и сплавов. Результаты расчета для нержавеющей стали марки 03X17H14M2 представлены на рис. 1. Для верификации рассмотренных моделей на график нанесены данные экспериментов по определению модуля Юнга и модуля сдвига, представленные в работах [2,5].

Результаты расчета показали, что комбинированная модель наиболее эффективно описывают верификационные данные. Для модуля Юнга наилучшее соответствие показала комбинированная модель на основе модель Вачмана и полиномиальной модель, а для модуля сдвига на основе модели MTS и модель Вачмана.

1. J. B. Wachtman, W.E. Tefft, D. Lam, C. Apstein, Phys Rev. **122**, 1754 (1961).
2. British Stainless Steel Association: Elevated temperature physical properties of stainless steels. (2018)
3. S.R. Chen, G.T. Gray, Metall. Mater. Trans. **27**, 2994 (1996).
4. D.M. Goto, J.F. Bingert, W.R. Reed, R.K. Garrett, Steel. Scripta Mater. **42** (2000).
5. ASM Specialty Handbook. Stainless Steel (1997-2012)

В представленной работе рассматриваются модели расчета эффективного модуля Юнга и модуля сдвига в зависимости от температурных изменений. Применение различных моделей при расчете зависимости модуля Юнга и модуля сдвига от температуры позволяет быстро оценить их величины, не прибегая к экспериментам. В работе расчет эффективного значения модуля Юнга производился по нескольким моделям: модели Вачмана [1], предполагающей учет начальной относительной температуры и применяющейся при моделировании на высоких температурах; полиномиальной модели, построенной с применением регрессионного анализа на основе экспериментальных данных опубликованных в работе [2], а также их комбинации. В последней модели, в зависимости от значения температуры, выбирается либо полиномиальная модель ($T < 1373$ K), либо модель Вачмана ($T \geq 1373$ K). Расчет эффективного модуля сдвига осуществлялся с использованием модели модуля сдвига MTS (Mechanical Threshold Stress), разработанной в рамках

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ СОСТАВА СПЛАВА НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА СПЛАВОВ СИСТЕМ Cu – Sn и Cu – Ni НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МЕТОДОМ КВД

С.А. Мурзинова¹, А.В. Столбовский^{1,2*}, Р.М. Фалахутдинов¹, В.В. Попов¹, Н.С. Чикунова²

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: stolbovsky@imp.uran.ru

В современных условиях использование чистой меди в качестве конструкционного материала крайне ограничено из-за ее высокой пластичности в сочетании с относительно невысокой температурой плавления. Примеси и легирующие элементы повышают температуру начала рекристаллизации меди даже при крайне низкой концентрации легирующего элемента. В то же время ультрамелкозернистые материалы имеют значительно более высокие прочностные характеристики в сравнении с крупнозернистыми поликристаллами. Основными методами, позволяющими получать ультрамелкую зёрненную структуру, являются методы интенсивной пластической деформации (ИПД). Формирующиеся при ИПД границы зерен в значительной степени определяют результирующие механические характеристики материала.

Система Cu–Ni характеризуется отсутствием изменения кристаллической структуры во всём диапазоне концентраций. Система Cu–Sn имеет относительно большую область растворимости олова в меди, что и даёт возможность проводить сравнение данных систем. Это может позволить оценить влияние состава твердого раствора на формирующуюся при ИПД структуру и механические свойства сплавов разных систем и выявить особенности, характерные для системы с неограниченной растворимостью элементов и системы, характеризующейся ограниченной растворимостью.

В рамках работы было произведено исследование структуры и свойств сплавов систем Cu–Ni и Cu–Sn в области преобладания меди при деформации до стадии насыщения на 5 оборотов КВД при комнатной температуре.

Структуру образцов изучали с помощью просвечивающей электронной микроскопии на Philips–CM30 SuperTwin и JEM–200CX. Измерения микротвёрдости проводились на приставке к микроскопу Neophot–21. Обработка зёрненной структуры проводилась с применением программного комплекса SIAMS.

Установлено, что структура образцов системы Cu–Sn показывает более сильную концентрационную зависимость как микротвёрдости, так и среднего размера зерна на стадии насыщения в отличие от системы Cu–Ni, где близкие значения микротвёрдости достигаются при значительно больших концентрациях легирующего элемента. Так, уже при 1% олова достигается измельчение структуры до значений близких к 100 нм, в то время как в системе Cu–Ni достигаются только при 10% содержании Ni. Однако, схожие по параметрам структуры имеют значительную разницу в микротвёрдости и сравниваются, как по среднему размеру зерна, так и по микротвёрдости, только при максимальных концентрациях в исследованных диапазонах — это составы Cu–7,4Sn и Cu–50Ni.

При этом наблюдаемые отличия в поведении системы Cu–Ni невозможно объяснить только различными значениями энергии дефекта упаковки. Очевидно, что для полного описания поведения необходимо учитывать не только различия в энергии дефекта упаковки, но и склонность к релаксации формирующихся структур, которая может иметь гораздо более сложную зависимость от разности в размере атомов матрицы и легирующего элемента, а, соответственно, и состояния формирующихся при ИПД границ зёрен.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России (тема «Функция» номер госрегистрации АААА-А19-119012990095-0).

ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОРИСТОГО АМОРФНОГО НИТИНОЛА

Г.А. Никифоров*, Б.Н. Галимзянов, А.В. Мокшин

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт физики, Казань, Россия

*e-mail: nikiforov121998@mail.ru

На сегодняшний день нитинол ($\text{Ni}_{50}\text{Ti}_{50}$) активно применяется в медицине в качестве имплантатов благодаря уникальным физико-механическим свойствам, приближенным к свойствам костных тканей [1]. Также известно, что костные имплантаты на основе пористых структур лучше интегрируются в организм [2]. Кроме того, нитинол является перспективным материалом для аэрокосмической отрасли [3], где важна легкость материала в сочетании с прочностью, что может быть достигнута применением пористых материалов.

В настоящей работе мы изучаем механические свойства аморфного пористого нитинола, полученного методом быстрого охлаждения расплава [4], подвергая образец деформации сжатия, растяжения и сдвига. Были измерены основные механические характеристики, среди которых модуль упругости, пределы пропорциональности, предел текучести. Также выявлены зависимости исследуемых параметров от пористости образца.

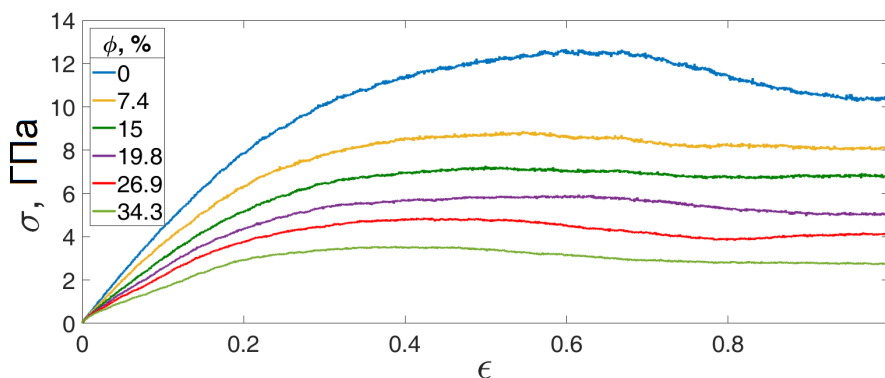


Рис. 1. Зависимость напряжения от деформации сдвига

В качестве примера на рис. 1 представлены рассчитанные зависимости напряжения от деформации при разных значениях пористости аморфной системы. Обнаружено, что относительные деформации для пределов упругости и прочности слабо зависят от пористости.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №19-12-00022).

1. S.A. Shabalovskaya, Bio-Medical Materials and Engineering **12**, 69 (2002).
2. D. Kapoor, Johnson Matthey Technol. Rev. **61**, 66 (2017).
3. D.J. Hartl, D.C. Lagoudas, SAGE journal **221**, 535 (2007).
4. Г.А. Никифоров, Б.Н. Галимзянов, А.В. Мокшин, Учен. зап. физ. фак-та Моск. ун-та **4**, 1940703, 1 (2019).

ЗЕРНОГРАНИЧНАЯ ДИФФУЗИЯ ^{57}Co В НИКЕЛЕ

Е.В. Осинников*, С.А. Мурзинова, В.В. Попов, А.В. Столбовский, Р.М. Фалахутдинов

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: osinnikov@imp.uran.ru

Зернограничные процессы, включая диффузию по границам зерен, играют важную роль в механических и физических свойствах материалов, особенно в материалах с субмикроструктурной структурой, в которых доля границ зерен очень велика. Часто скорость зернограничной диффузии лимитирует эксплуатационные свойства материала в конкретных условиях. В качестве исследуемого образца был взят поликристаллический никель, т.к. в нем практически нет данных по примесной диффузии других элементов.

Исследования проводились на образцах поликристаллического никеля чистотой 99.98%. Средний размер кристаллитов составлял ~ 160 мкм.

Исследования зернограничной диффузии ^{57}Co в Ni проводились в диапазоне температур 623 К – 1073 К. Образцы отжигались с использованием сверхвысоковакуумной печи в динамическом вакууме 10^{-9} Па. Диффузионная зона делилась на слои методом электрополировки.

Контроль толщины снятого слоя производили по изменению веса образца, который измерялся на высокоточных аналитических весах ВЛ–120М с точностью 10^{-5} г. Для измерения активности использовался цифровой гамма-спектрометр. Слоевую активность вычисляли по интегральному остатку γ -линии 122 кэВ по методу Грузина [1].

Измерения зернограничной диффузии проводились в В и С режимах. На основании концентрационных профилей были рассчитаны тройное произведение $P = s\delta D_{gb}$ и коэффициент зернограничной диффузии D_{gb} . Здесь s и δ — коэффициент сегрегации и диффузионная ширина границы зерна.

На основании рассчитанных значений тройного произведения и коэффициента диффузии были получены соответствующие температурные зависимости:

$$P = \left(6.1_{-4.3}^{+14.7}\right) \cdot 10^{-3} \exp\left(-\frac{(166.9 \pm 9.3) \text{ кДж/моль}}{RT}\right), \quad (1)$$

$$D = \left(1.4_{-1.2}^{+5.4}\right) \cdot 10^{-3} \exp\left(-\frac{(167.7 \pm 8.8) \text{ кДж/моль}}{RT}\right). \quad (2)$$

На основании данных зависимостей можно сделать вывод о том, что коэффициенты зернограничной диффузии в Ni номинальной чистоты 99.98% близки к значениям коэффициентов самодиффузии в никеле аналогичной чистоты [2].

Сравнение полученных результатов с данными работы [3], в которой исследовалась зернограничная диффузия Co в никеле чистотой 99.995% показывают, что практически во всем диапазоне температур тройные произведения в никеле 99.995% выше, чем в никеле 99.98%. Таким образом, видно, что примеси значительно влияют на зернограничную диффузию Co в Ni. Подобная картина наблюдалась при исследовании зернограничной самодиффузии с Ni [2].

Работа выполнена в рамках государственного задания «Функция», номер госрегистрации АААА-А19-119012990095-0, при частичной поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90100.

1. П.Л. Грузин, ДАН СССР **86** вып 2, 289 (1952)
2. D. Prokoshkina V.A. Esin, G. Wilde, S.V. Divinski. Acta Mater. **61**, 14 (2013)
3. J. Cermak, Phys. Stat. Sol. (a) **117**, 387 (1990)

СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ПОКРЫТИЯХ НА ОСНОВЕ ХРОМА, ОСАЖДЕННЫХ НА ЦИРКОНИИ, ПРИ АТМОСФЕРНОМ ОКИСЛЕНИИ

А.В. Пирожков*, М.С. Сыртанов, Д.В. Сиделёв

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

*e-mail: pirog@tpu.ru

Функционирование водо-водяных энергетических реакторов в штатном режиме (360°C, 18.6 МПа) не вызывает каких-либо затруднений в эксплуатации. Одной из основных проблем, возникающих в аварийных условиях является потеря теплоносителя, когда температура внутри реактора может превышать 1200°C. Одной из перспективных технологий защиты циркониевых сплавов оболочек ТВЭЛов является нанесение покрытий [1]. Одним из возможных материалов, который соответствует заявленным требованиям является Cr. Однако существует проблема диффузии атомов Cr в матрицу Zr. Взаимная диффузия атомов хрома и циркония приводит к формированию интерметаллидного слоя $ZrCr_2$ и росту микророзёрен ZrO_2 на границах зёрен хрома, что усиливает диффузию кислорода к циркониевому сплаву. В дальнейшем происходит растрескивание хромового покрытия, что приводит к проникновению кислорода к циркониевому сплаву, образованию оксидов и понижению защитных свойств. Целью настоящей работы является выявление закономерностей изменения структурно-фазового состояния однослойных покрытий на основе Cr и многослойных покрытий CrN/Cr на цирконии при атмосферном окислении. Окисление происходило при температуре 1100°C и атмосферном давлении в течение различного времени (10, 20, 30 и 40 минут). Структурно-фазовый состав покрытий до и после окисления анализировался с помощью дифрактометра Shimadzu XRD 7000S.

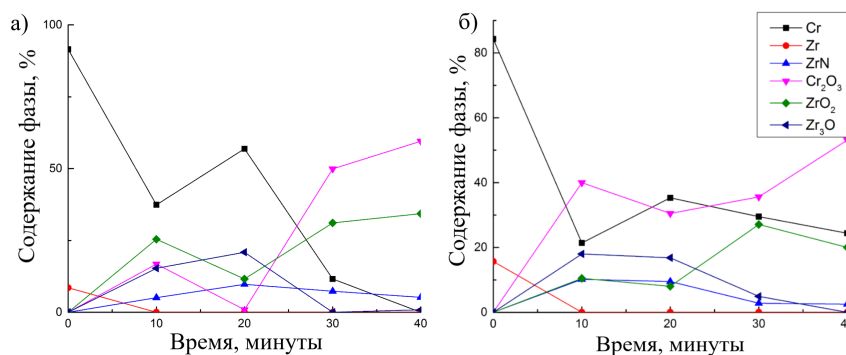


Рис. 1. Содержание фаз в зависимости от времени их окисления для однослойных (а) и многослойных (б) покрытий

Результаты, полученные при различном времени окисления для однослойного покрытия Cr представлены на рис. 1. В образцах до окисления были обнаружены фазы α циркония и хрома. После окисления на воздухе во всех образцах были обнаружены фазы ZrN, Cr_2O_3 , Zr_3O и ZrO_2 . При увеличении времени окисления наблюдается рост содержания фаз оксидов ZrO_2 и Cr_2O_3 . При максимальном времени окисления наблюдается значительное увеличение содержания фаз Cr_2O_3 и ZrO_2 . В случае использования многослойных покрытий содержание фазы ZrO_2 меньше, чем при однослойных покрытиях, что свидетельствует о более эффективной защите циркония от окисления.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Госкорпорации «Росатом» в рамках научного проекта 20-21-00037.

1. J.C. Brachet, M. Le Saux, M. Le Flem, S. Urvoy, E. Rouesne *et al.*, Proceedings of TopFuel **2015**, 13 (2015).

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ И КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУР Cu_xZrSe_2

М.С. Постников^{1*}, А.С. Шкварин¹, А.И. Меренцов¹, Ю.М. Ярмошенко¹, Е.Г. Шкварина¹,
Е.В. Мостовщикова¹, А.А. Титов¹, С.А. Упоров², С.Ю. Мельчаков², А.Н. Титов¹, I. Pis^{3,4},
F. Bondino⁴

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

³Elettra-Sincrotrone Trieste S.C.p.A, Basovizza, Trieste, Italy

⁴IOM-CNR, Laboratorio TASC, Basovizza, Trieste, Italy

*e-mail: mithanya0403@gmail.com

Слоистые дихалькогениды переходных металлов являются объектом изучения уже много лет. Система Cu_xZrSe_2 привлекает интерес как аналог системы Cu_xTiSe_2 , в которой наблюдаются состояние с волной зарядовой плотности и сверхпроводимость.

Целью работы было изучение кристаллической и электронной структур и физических свойств диселенида циркония, интеркалированного медью, с целью понимания, что будет с характером химической связи и структурой.

Синтез образцов Cu_xZrSe_2 (при $0.05 \leq x \leq 0.3$) производился при комнатной температуре твердофазным методом с использованием металлической меди и матрицы ZrSe_2 . Согласно результатам рентгеноструктурного анализа система Cu_xZrSe_2 во всем исследованном интервале индексируется в группе тригональной сингонии. В этом концентрационном интервале в основном заполняются тетраэдрические позиции, что говорит о доминировании связи интеркалант-халькоген, в отличие от соединения с титаном, где доминирует связь интеркалант-переходный металл и заполняются исключительно октаэдрические позиции.

В данной работе для исследования локального окружения атомов меди был использован метод рентгеновской адсорбционной спектроскопии (XAS). $\text{Cu L}_{2,3}$ спектры для составов $\text{Cu}_{0.1}\text{ZrSe}_2$ и $\text{Cu}_{0.3}\text{ZrSe}_2$ имеют одинаковую форму и энергетическое положение. Для состава $\text{Cu}_{0.2}\text{ZrSe}_2$ происходит изменение формы линии, один из пиков уширяется, меняется соотношение интенсивностей этого пика по отношению к остальным, а также меняется его энергетическое положение. Анализ спектров показал, что это обусловлено вкладом двух типов меди — в октаэдрическом и тетраэдрическом окружении, что хорошо согласуется с данными рентгеноструктурного анализа.

Температурная зависимость электропроводности образцов измерена в интервале температур 10–100 К. Вблизи концентрации $x = 0.2$ характер зависимости меняется с активационного на металлический. Это хорошо согласуется с выводом о ковалентном характере химической связи меди с решёткой, сделанном на основе анализа кристаллической структуры.

Температурная зависимость магнитной восприимчивости всех составов Cu_xZrSe_2 описывается как восприимчивость паулевского типа, что позволяет рассчитать плотность состояний на уровне Ферми. Падение плотности состояний при интеркаляции меди может быть обеспечено только выходом уровня Ферми в области щели между $\text{Se } 4p$ -валентной зоной и $\text{Zr } 4d$ -зоной проводимости.

Полученные результаты позволяют сделать вывод, что при интеркаляции ZrSe_2 медью заполнение окта-позиций в области $0 < x < 0.2$ можно связать с термической активацией меди из тетра-позиций, где атом меди участвует в ковалентной связи с селеном, в окта-позиции, где его связь с решёткой имеет ионный характер. Подтверждением этому является практически линейный рост заполнения окта-позиций.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Спин», № АААА-А18-118020290104-2)

ВОЗДЕЙСТВИЕ БОЛЬШИХ ПЛАСТИЧЕСКИХ ДЕФОРМАЦИЙ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА АМОРФНО-КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СПЛАВА Ti_2NiCu

Р.В. Сундеев^{1*}, А.В. Шалимова², Н.Н. Ситников³, О.П. Черногорова⁴, А.М. Глезер²,
М.Ю. Пресняков⁵, И.А. Каратеев⁵, Е.А. Печина⁶

¹МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия

²Центральный научно-исследовательский Институт Черной металлургии им. И.П. Бардина,
Москва, Россия

³Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

⁴Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва, Россия

⁵Российский научный центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

⁶Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия

*e-mail: sundeev55@yandex.ru

Давно уже является аксиомой утверждение о том, что свойства металлических материалов, как правило, определяется их структурным состоянием. Это абсолютно верно и для нанокристаллических и аморфно-нанокристаллических композитов (АНК), созданных деформационным способом из металлических нанокристаллических и аморфных материалов. Как правило, такие композиты обладают довольно сложной структурой, сочетающей структуру металлических материалов — прекурсоров и особенности структуры их композиции.

В качестве материала для исследования был выбран слоистый АНК Ti_2NiCu , который получали методом закалки из жидкого состояния при скорости охлаждения $\approx 10^5$ К/с. Толщина исходной ленты составляла в среднем 46 ± 1 мкм. Толщину аморфного слоя ($33 - 1$ мкм) в исследуемых образцах определяли в ходе последовательного стравливания кристаллического слоя. Образцы деформировали методом кручения под высоким давлением (КВД) до значения деформации, соответствующей $n = 8$ (n — число полных оборотов подвижной наковальни). КВД проводили при комнатной температуре, скорость вращения подвижной наковальни 1 об/мин и квазигидростатическом давлением 6 ГПа. Образцы после деформации имели форму диска диаметром 8 мм и толщиной 43 ± 1 мкм. Подробные исследования структурно-фазовых превращений методами рентгеноструктурного анализа и просвечивающей электронной микроскопии проводили на образцах после КВД при $n = 2$ и 4.

Проведенные исследования структурно-фазовых превращений и механических свойств при КВД слоистого аморфно-кристаллического композита Ti_2NiCu с одинаковым химическим составом фаз, выявило наличие трех областей, различающихся 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 состояние ($n \geq 4$) не зафиксировано заметного вклада переходного слоя в структурные изменения и механические свойства материала в ходе КВД. Слоистый АНК с одинаковым химическим составом прекурсоров после $n \geq 4$ в ходе КВД деформируется в целом как макроскопически однородный материал.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 20-32-70007 и гранта РНФ № 20-72-00001.

МИКРОСТРУКТУРА МАГНИЯ ПОСЛЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

М.А. Токарев*, О.В. Антонова, Д.А. Комкова

¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

²Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: tok222@yandex.ru

Магний и его сплавы являются перспективными материалами для более широкого применения в различных областях промышленности, благодаря хорошему сочетанию малой плотности и высокой удельной прочности. Однако на сегодняшний день применение магниевых сплавов сильно ограничено из-за их плохой обрабатываемости и пластичности при комнатной температуре. Поэтому все работы, связанные с повышением этих свойств, представляют большой научный интерес [1,2].

В работе приведены результаты исследования микроструктуры и механических свойств магния после интенсивной пластической деформации, которую удалось осуществить за счет использования метода обратного выдавливания в специально разработанной оснастке на гидравлическом прессе ДБ-2240 при комнатной температуре за одну операцию.

В качестве исходного материала был использован литой Mg со столбчатой структурой (средний размер зерна 2.7×7.7 мм). В результате деформации были получены стаканчики с разной толщиной стенок. Для подробного изучения структуры стаканчика с толщиной стенки $t = 1$ мм использовались следующие методы: 1) рентгеноструктурный фазовый анализ (X-ray) на дифрактометре DMAX 2000, RIGAKU в монохроматическом излучении CuK_α ; 2) методы сканирующей (СЭМ) и просвечивающей (ПЭМ) электронной микроскопии.

Результаты X-ray. Дифрактограммы с внешней и внутренней сторон стенок практически совпадают по количеству пиков и их интенсивности. Наиболее сильный пик (0002), но его интенсивность ниже, по сравнению с исходным литым образцом, что указывает на изменение исходной текстуры.

Сканирующая электронная микроскопия. Сравнение микроструктуры по картам EBSD в литом и деформированном состояниях показало наличие в структуре двойников, плотность которых после деформации существенно уменьшилась. Это подтверждается полученными гистограммами распределения углов разориентировки между зёрнами. В литом образце наблюдается пик разориентировок в диапазоне $85^\circ - 90^\circ$, что указывает на наличие двойников $\{10\bar{1}2\}$. После деформации этот пик в данном диапазоне небольшой. В соответствии с гистограммами распределения зёрен по размерам, их интервал находится в диапазоне от 100 нм до 5 мкм. То есть наблюдается существенное уменьшение размеров зёрна по сравнению с исходным состоянием, по крайней мере, на три порядка.

Результаты просвечивающей электронной микроскопии. Полученные данные подтверждают высокую плотность двойников в крупнозернистом литом магнии. После деформации наблюдали, главным образом, зёрна размером 1 – 2 мкм, внутри которых была сформирована развитая субструктура.

Основной вывод настоящей работы заключается в том, что предложенная обработка магния способствует резкому уменьшению величины зёрна, и, как следствие, должна способствовать повышению его пластичности.

1. М.Б. Альтман, *Металловедение магния и его сплавов*. — М.: Металлургия (1978).
2. K.U. Kainer, *Magnesium Alloys and Technology* (2003).

СТРУКТУРА ОТОЖЖЕННОЙ ГАФНИЕВОЙ БРОНЗЫ, ДЕФОРМИРОВАННОЙ
ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИЕЙ МЕТОДОМ КРУЧЕНИЕМ
ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

Р.М. Фалахутдинов^{1*}, А.В. Столбовский^{1,2}, В.В. Попов¹, С.А. Мурзинова¹, П.Ю. Ширшова²

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: falahutdinov@imp.uran.ru

В современных условиях использование чистой меди в качестве конструкционного материала крайне ограничено из-за ее высокой пластичности в сочетании с относительно невысокой температурой плавления. Примеси и легирующие элементы повышают температуру начала рекристаллизации меди даже при крайне низкой концентрации легирующего элемента. Однако применение для легирования элементов, образующих твердые растворы с высокой концентрацией, например, олова, не является эффективным в задачах повышения термической стабильности структуры. Поэтому считается, что легирование элементами, имеющими наименьшую растворимость в меди (Zr, Hf и др.), позволяет достигнуть максимально высокой температуры начала рекристаллизации. При этом увеличение их концентрации до более чем 0.05%, уже не всегда приводит к заметному росту температуры начала рекристаллизации. Поэтому ставилась задача провести исследование с минимально возможными концентрациями Hf как легирующего компонента в сочетании и деформацией методом кручения под высоким давлением (КВД).

В рамках работы было произведено исследование формирования структуры и свойств бронзы состава Cu – 0,8 вес. % Hf после гомогенизирующего отжига 800°С с последующим охлаждением с печью, обеспечивающего достаточно полное связывание Hf в выделившиеся частицы крупного размера и деформации на различное количество оборотов КВД.

Деформирование проводилось в открытых наковальнях Бриджмена диаметром 10 мм, при комнатной температуре, на 1, 3 и 5 оборотов, при давлении 4 ГПа, с угловой скоростью 0.3 об/мин. Структуру образцов изучали с помощью просвечивающей электронной микроскопии на Philips-СМ30 SuperTwin и JEM-200СХ и измерения микротвердости на приставке к микроскопу Neophot-21.

Бронза в отожженном состоянии имела поликристаллическую структуру, с размерами кристаллитов 20 – 40 мкм, что значительно меньше, чем в случае чистой меди и оловянистой бронзы [1]. Кроме того, в структуре наблюдались частицы второй фазы размеры которых составляли 1 – 4 мкм, что согласуется с результатами, полученными в работе [2].

Установлено, что структура отожженной бронзы после КВД стабильна при комнатной температуре и не претерпевает никаких изменений после деформации и длительного вылёживания в отличие от чистой меди.

По результатам исследования можно сделать вывод, что поведение гафниевой бронзы связанным в выделения, имеет много общего с поведением чистой меди, а именно, неоднородная структура наблюдается даже после КВД на 5 оборотов. С другой стороны, с точки зрения устойчивости полученных структур при комнатной температуре поведение гафниевой бронзы аналогично поведению низколегированной оловянистой бронзы.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России (тема «Функция» номер госрегистрации АААА-А19-119012990095-0).

1. A. Stolbovsky , V. Popov , E. Popova, *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures* **5**, 118 (2015).
2. A. Stolbovsky , V. Popov , E. Popova, *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures* **1**, 13 (2017).

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА Cr_xZrS_2

Е.Г. Шкварина^{1*}, А.А. Титов¹, М.С. Постников¹, А.И. Меренцов¹, А.С. Шкварин¹,
С.В. Пряничников², А.Н. Титов¹

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: shkvarina@imp.uran.ru

Материалы со спиновой поляризацией рассматриваются как основа для будущих применений в спинтронике. Одними из перспективных стартовых соединений рассматриваются дихалькогениды переходных металлов. Возможность интеркаляции $3d$ металла в межслоевое пространство решетки матрицы позволяет синтезировать материал с различным содержанием спин-поляризованного металла и различной степенью взаимодействия его как с решеткой матрицы, так и между интеркалированными атомами. В данной работе исследована кристаллическая структура нового соединения Cr_xZrS_2 . В качестве решетки матрицы используется ZrS_2 , обладающий щелью величиной примерно в 1.5 эВ на уровне Ферми [1]. Это позволяет избежать смешивания спин-поляризованных состояний атомов хрома с спин-вырожденными состояниями атомов решетки матрицы, при формировании состояний хрома под уровнем Ферми (что является необходимым для успешного применения в устройствах спинтроники). Дополнительным возможным осложнением может быть формирование шпинельной кубической фазы, вместо гексагональной слоистой, как это наблюдается в Cu_xTiS_2 [2] и Cu_xZrTe_2 [3].

Впервые выполнен синтез поликристаллических образцов системы Cr_xZrS_2 . Структуру и фазовый состав образцов исследовали при комнатной температуре с использованием рентгеновской порошковой дифракции на дифрактометре Shimadzu XRD 7000 Maxima ЦКП Урал-М. Уточнение кристаллической структуры выполнено в программе GSAS (General Structure Analysis System) [2].

Установлено, что даже при минимальной исследованной концентрации хрома ($x = 0.1$) наблюдается формирование шпинельной фазы, которая сосуществует с гексагональной фазой до состава $\text{Cr}_{0.3}\text{ZrS}_2$, после которого гексагональная фаза больше не наблюдается. При этом отличительной особенностью является тетраэдрическая координация атомов хрома, как для шпинельной, так и для гексагональной фазы, для которой в TiCh_2 , $Ch = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$, наблюдается только октаэдрическая координация атомов хрома. При этом при максимальной исследованной концентрации хрома наблюдается обеднение шпинельной фазы хромом и выделение хрома в виде CrS .

В дальнейшем планируется провести синтез этой системы при меньших температурах, что возможно, увеличит количество гексагональной фазы и предотвратит появление (или уменьшит количество) шпинельной фазы.

Работа выполнена при финансовой поддержке научного проекта РФФИ № 20-03-00275.

1. M. Moustafa *et al.*, Phys. Rev. B. **80**, 035206 (2009).
2. E.G. Shkvarina *et al.*, J. Chem. Phys. **147**, 044712 (2017).
3. E.G. Shkvarina *et al.*, Acta Crystallogr. Sect. C Struct. Chem. **74**, 1020 (2018).

ВАКАНСИИ КУБИЧЕСКОЙ ФАЗЫ МАГНЕТИТА В РАМКАХ DFT+U

М.И. Шутикова^{1,2*}, В.В. Стегайлов^{1,2}¹Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия²Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*e-mail: shutikova_maria@mail.ru

Широкое использование магнетита в современном мире и перспективы его применения в новых устройствах обуславливают актуальность пересмотра и уточнения модели кубической фазы магнетита. Эта фаза характерна для магнетита при нормальных условиях и называется также высокотемпературной, в отличие от низкотемпературной фазы, наблюдаемой в магнетите ниже температуры перехода Вервея ($T_V \approx 120$ К).

Полагают, что выше температуры Вервея магнетит является полуметаллом, а ниже T_V в плотности его электронных состояний на E_F благодаря некоторому упорядочению носителей заряда появляется запрещенная зона. Существующие интерпретации имеющих экспериментальных данных, основанные на результатах первопринципных расчетов, позволяют говорить о возможности существования запрещенной зоны в магнетите при температурах выше T_V [1].

В докладе будут представлены результаты первопринципных расчетов структурных и электронных свойств кубической фазы магнетита в рамках теории функционала плотности с поправкой, способной учесть сильные корреляции d-электронов в этом оксиде (приближение DFT+U). Обсуждаются результаты для бездефектной кубической фазы и вакансий магнетита, а также набор допущений для наиболее адекватного описания кубической фазы магнетита в рамках данного подхода [2].

Работа выполнена при поддержке РФФИ 20-21-00159.

1. H. Liu, C. Di Valentin, J. Phys. Chem. C (2017).
2. M.I. Shutikova, V.V. Stegailov, J. Phys. Conf. Ser. (2020) (in press)

ДИНАМИКА МАРТЕНСИТНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ ПРИ ФРИКЦИОННОМ НАГРУЖЕНИИ

К.И. Эмурлаев

Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия

e-mail: emurlaev@corp.nstu.ru

В работе представлены результаты анализа эволюции структуры стали 12X18H10T в условиях сухого трения с вольфрамокобальтовым индентором (ВК20). Особенностью фрикционного эксперимента являлась регистрация дифракции синхротронного излучения в области взаимодействия контактной пары непосредственно в ходе испытания. Такой подход позволил отследить фазовые преобразования стали при трении, а также оценить дефектное строение изучаемого материала по изменению формы дифракционных максимумов. Цель эксперимента заключалась в рассмотрении особенностей протекания мартенситного превращения в условиях циклического нагружения. Эксперимент проводился на станции ID13 Европейского центра синхротронного излучения в г. Гренобль, Франция. Детальное описание эксперимента приведено в работах [1,2].

На рис. 1а показана карта изменения фазового состава в области взаимодействия пары трения в виде зависимости циклов фрикционного нагружения от угла рассеяния. Цвет указывает на величину интенсивности при данном угле рассеяния, для расшифровки которого требуется провести сопоставление с цветовой шкалой. В соответствии с результатами фазового анализа можно отметить, что мартенситное $\gamma - \alpha'$ преобразование в условиях фрикционного нагружения начинает протекать уже после 20 циклов взаимодействия. В соответствии с рис. 1б видно, что фрикционное взаимодействие приводит к увеличению полной ширины на половине высоты пиков (FWHM) аустенита и мартенсита. В свою очередь, это свидетельствует об измельчении зерен и развитии дислокационной структуры. Следует отметить, что механически-индуцированный мартенсит имеет относительно высокое значение FWHM, что, вероятно, обусловлено наследованием дефектного строения аустенита.

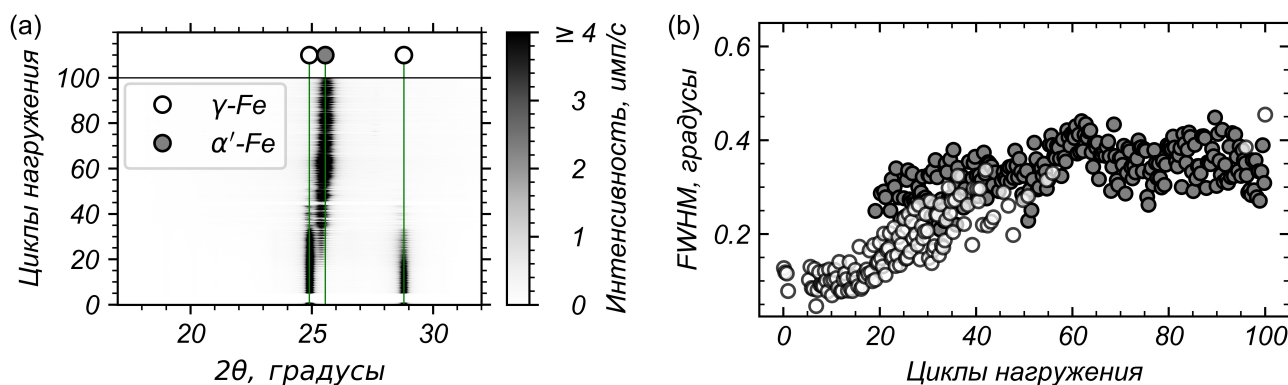


Рис. 1. (а) эволюция фазового состава в контактной области при фрикционном взаимодействии; (б) изменение FWHM рефлексов (111) аустенита и (110) мартенсита.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ для молодых ученых — кандидатов наук МК-2516.2019.8.

1. I.A. Bataev, D.V. Lazurenko, A.A. Bataev *et. al.*, Acta Materialia **196**, (2020).

2. K.I. Emurlaev, I.A. Bataev, V.G. Burov *et. al.*, Journal of Nondestructive Evaluation **39**, 3, (2020).

АНАЛИЗ СТРУКТУРНЫХ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ В УСЛОВИЯХ ТРЕНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ

К.И. Эмурлаев

Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия
e-mail: emurlaev@corp.nstu.ru

В работе представлен метод анализа процессов трения, основанный на использовании дифракции синхротронного излучения (СИ) для точечного сканирования поверхности образца подобно тому, как это делается в растровой электронной микроскопии. Эксперимент проводился в соответствии со схемой, показанной на рис. 1а. С этой целью была разработана специальная машина трения, детально описанная в работе [1]. Установка позволяет проводить как *in situ*, так и *ex situ* наблюдения за процессом трения. Перед началом испытания установку закрепляют на прецизионном трехкоординатном столе, обеспечивающем возможность точного выбора участка исследования. Применение геометрии скользящего пучка обеспечивает проникновение излучения на глубину всего лишь несколько микрон от поверхности образца. Таким образом, исследованию подвергается наиболее нагруженный в процессе трения слой материала. В процессе сканирования установка с образцом перемещается вдоль осей x и z с заданным шагом. Результатом сканирования является массив из десятков и даже сотен тысяч дифракционных картин. Пример описанного подхода представлен в виде распределения полной ширины на половине высоты (FWHM) на рис. 1б,с. Увеличение FWHM свидетельствует о развитии дефектного строения в материале (сталь 40Х, закаленная на мартенсит).

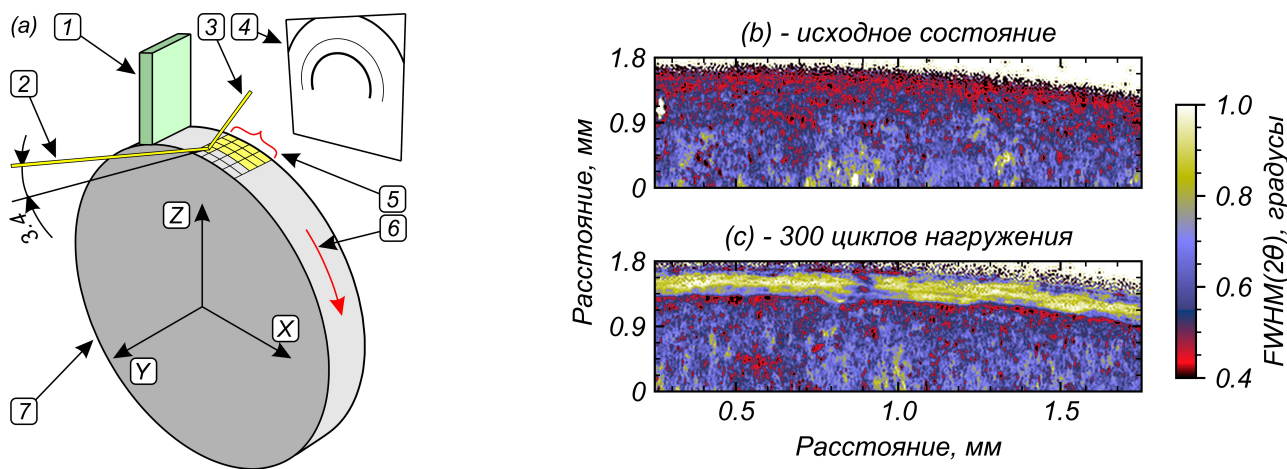


Рис. 1. (а) схема сканирования: 1 — индентор; 2 — падающий пучок СИ; 3 — дифрагированный пучок; 4 — двухкоординатный детектор; 5 — анализируемая область; 6 — направление вращения; 7 — образец. Результаты сканирования (b) в исходном состоянии и (c) после фрикционного нагружения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90119.

1. I.A. Bataev, D.V. Lazurenko, A.A. Bataev *et al.*, *Acta Materialia* **196**, (2020).

ВЛИЯНИЕ БОРА НА СТРУКТУРУ ГРАФИТА, ФОРМИРУЮЩУЮСЯ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

В.П. Филоненко, Р.Х. Баграмов, И.П. Зибров, С.Г. Ляпин, П.В. Энкович*

Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Москва, Россия

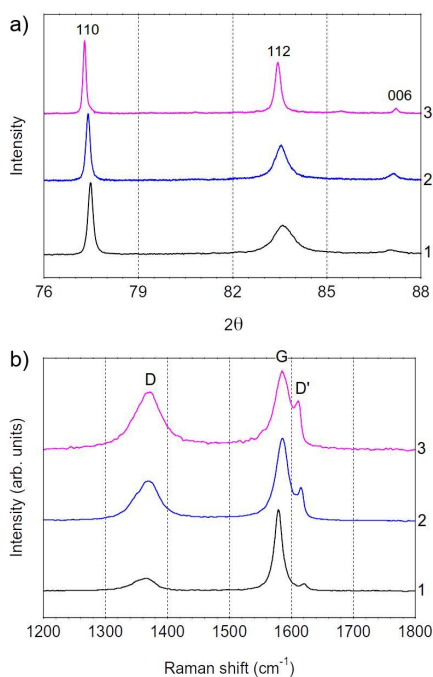
*e-mail: enkovich@hppi.troitsk.ru

Рис. 1. Анализ образцов борированного графита: а — участок дифрактограмм, б — спектры КРС (1 — природный графит при нормальных условиях, 2 — ВС7 при 5 ГПа и 1400°C, 3 — ВС7 при 5 ГПа и 1700°C).

рентгеновскими данными и спектрами КРС связано с тем, что при увеличении количества бора в графеновом слое усиливается рассеяние фононов на примесных атомах, в то время как рентгеновский анализ даёт только общую картину порядка. Уточнение структуры по рентгеновским данным показало, что количество вакансий в графеновом выше, чем количество бора. Тем не менее ответ на вопрос о конфигурациях дефектных комплексов бора с вакансиями требует дальнейшего теоретического анализа.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (№ 19-12-00111).

1. T. Nagio, M. Nakamizo, K. Kobayashi, Carbon **27**, 2 (1989).

Экспериментально установлено, что для прямого перехода графита в алмаз без использования металлов-катализаторов требуются высокие параметры (15 – 21 ГПа, 1800 – 2500°C). Однако, если синтез алмазов осуществляется не из чистого углерода, а, например, из углеводородов, то термобарические условия такого перехода понижаются. Одной из интересных и перспективных легирующих добавок к углероду является бор. Несмотря на большое количество работ по изучению механизмов формирования графитоподобных структур, многие вопросы до сих пор остаются невыясненными. В своем докладе я представлю анализ микрокристаллов борированного графита, полученного в условиях высоких давлений и температур.

Микрокристаллы борированного графита были синтезированы из смеси глобулярного наноразмерного углерода и субмикронного бора в атомном соотношении В/С = 1/7. Эксперименты проводились в аппаратах «торид» при давлениях 5 и 7 ГПа и температурах 1400°C и 1700°C. Полученные образцы затем были исследованы методами рентгеновского анализа, комбинационного рассеяния света (КРС) (см. рис. 1) и электронной микроскопии.

Полученные в эксперименте дифрактограммы допированного бором графита демонстрируют структуру с высокой степенью упорядочения, которая улучшается при повышении концентрации бора. В то же время замещение бором атомов углерода приводит к значительным локальным искажениям в графеновых слоях и на спектрах КРС увеличивается интенсивность *D* и *D'* пиков, что отмечалось ранее в работе [1]. Наблюдаемое противоречие между

НЕРАЗРУШАЮЩИЙ КОНТРОЛЬ

ПРИМЕНЕНИЕ ВЫСОКОРАЗРЕШАЮЩЕЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ МИКРОСКОПИИ В ФИЗИКЕ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ

А.А. Баранников^{1*}, П.А. Ершов¹, Т.М. Федотенко², Е.Г. Коэмец³, М. Ханфланд⁴,
Н.А. Дубровинская², Л.С. Дубровинский³, И.И. Снигирева⁴, А.А. Снигирев¹

¹Балтийский Федеральный Университет им. И. Канта, Калининград, Россия.

²Лаборатория кристаллографии Байройтского Университета, Байройт, Германия.

³Байройтский Геоинститут, Байройт, Германия.

⁴Европейский Центр Синхротронного Излучения, Гренобль, Франция

*e-mail: abarannikov95@gmail.com

Для анализа параметров кристаллической решетки материалов, исследуемых в условиях высокого давления и температуры, традиционно используется рентгеновская дифрактометрия с применением синхротронного излучения. Данный метод требует точного позиционирования фокального пятна на образце для локализации области анализа. При использовании ячеек с алмазными наковальнями, где размер всего образца может составлять не более 20 мкм, размер фокального пятна должен быть несколько квадратных микрометров или меньше.

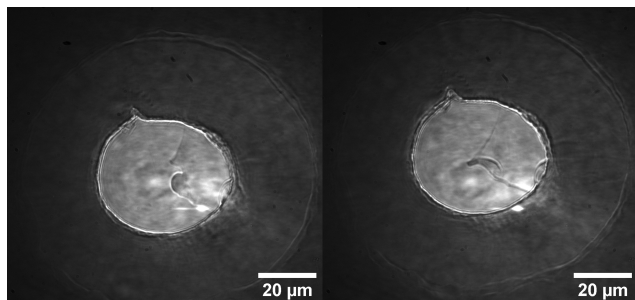


Рис. 1. Изображения платиновой фольги внутри ячейки с алмазными наковальнями, полученные до (слева) и после (справа) плавления с помощью системы лазерного нагрева. Давление в ячейке составляло 23 ± 1 ГПа, а температура в момент плавления 2613 ± 10 К.

метрией было произведено на станции ID15B Европейского Центра Синхротронного Излучения (ESRF) [1,2]. В результате рентгеновская микроскопия позволила с субмикронным разрешением визуально определять начало процесса плавления и перемещения образца в ячейке в режиме реального времени. Благодаря этому интерпретация дифракционных данных, где изменяется интенсивность определенных дифракционных максимумов может производиться более однозначно.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (№ проекта 19-72-30009).

1. A. Snigirev, P. Ershov, I. Snigireva, M. Hanfland, N. Dubrovinskaia, L. Dubrovinsky, *Microscopy and Microanalysis* **24**, S2 (2018).
2. T. Fedotenko, L. Dubrovinsky, G. Aprilis, E. Koemets, A. Snigirev, I. Snigireva, A. Barannikov, P. Ershov, F. Cova, M. Hanfland, N. Dubrovinskaia, *Review of Scientific Instruments* **90**, 10 (2019).

МЕТРОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД НЕРАЗРУШАЮЩЕЙ ДИАГНОСТИКИ РЕНТГЕНОВСКИХ ПРЕЛОМЛЯЮЩИХ ЛИНЗ

А. Нарикович^{1*}, Д. Зверев¹, И. Ляту¹, А. Баранников¹, И. Панормов¹, А. Синицин¹,
И. Снигирева², А. Снигирев¹

¹Балтийский Федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия

²Европейский центр синхротронного излучения, Гренобль, Франция

*e-mail: anarikovich@kantiana.ru

Одной из самых распространённых оптических систем для фокусировки рентгеновских лучей на синхротронах по всему миру является составная преломляющая линза (СПЛ) с параболическим профилем. Основные применения СПЛ — это микро- и нанофокусировка [1] и рентгеновская микроскопия [2]. Технология изготовления, а также структурные характеристики материалов линз существенно влияют на функциональные свойства СПЛ. Для совершенствования технологии изготовления преломляющей рентгеновской оптики необходимо разработать метрологические методы для точной неразрушающей диагностики и оценки геометрических характеристик, качества преломляющей поверхности линз, наличия и размера дефектов макро- и микроструктуры материала.

В данной работе представлены результаты оценки эффективности методов неразрушающего контроля: рентгеновской радиографии и томографии. Разработанный комплексный лабораторный метрологический подход позволяет проводить неразрушающий контроль неоднородностей внутренней структуры линз и одновременно анализировать их геометрические параметры, величина которых должна с хорошей точностью совпадать с соответствующими значениями, заданными при изготовлении линз. Так, например, несоосность параболических преломляющих поверхностей одиночной двояковогнутой линзы, ошибка формы их профиля и расстояние между преломляющими поверхностями должно быть минимальным для обеспечения высокой эффективности использования СПЛ.

Диагностика линз производилась лабораторными методами неразрушающего контроля: рентгенографии, рентгеновской компьютерной томографии. Были исследованы линзы с радиусами кривизны в вершинах парабол: 50, 100, 200 и 500 мкм, изготовленные из различных материалов: алюминий, бериллий, алмаз, кремний. Радиографические изображения линз были получены на лабораторных источниках рентгеновского излучения: научно-образовательный многофункциональный комплекс «Synchrotron Like» и система рентгеновского контроля Yxlon. Данные источники позволяют получать контрастные рентгенографические изображения профилей преломляющих линз с пространственным разрешением порядка 1-2 мкм. Исследование изображений рентгеновских преломляющих линз основано на алгоритме анализирующем изображения преломляющей линзы, выявляющем точки профиля ее сечения, с дальнейшей аппроксимацией полученных данных параболой методом наименьших квадратов с использованием регрессионного анализа. Сопоставление полученных изображений с заданными требованиями к геометрическим характеристикам линз, качеству преломляющей поверхности и внутренним размерам дефектов позволяет существенно оптимизировать процесс изготовления линз.

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ 19-72-30009.

1. I. Snigireva *et al.*, AIP Conf. Proc. **1365**, 188 (2011).
2. T. Roth *et al.*, Opt. Commun. **340**, 33 (2015).

МАГНИТНЫЕ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОБРАЗЦОВ ИЗ СТАЛИ 09Г2С,
ИЗГОТОВЛЕННЫХ МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОГО ЛАЗЕРНОГО СПЛАВЛЕНИЯ

А.Н. Сташков*, Е.А. Щапова, А.П. Ничипурук

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: stashkov@imp.uran.ru

Селективное лазерное сплавление (СЛС) является одной из технологий 3D печати металлами. СЛС используется для получения деталей сложной формы без дальнейшей механической обработки. Исходным сырьем в СЛС является металлический порошок. Большое количество работ посвящено исследованию структуры и механических свойств 3D изделий. Основной проблемой СЛС является то, что в процессе изготовления в силу температурного градиента при нагреве и охлаждении локального участка в детали возникают остаточные механические напряжения. Эти напряжения могут приводить к короблению и разрушению деталей. Уменьшение уровня механических напряжений после 3D печати является важной нерешенной проблемой. В 3D сталях возможно применение для снятия внутренних механических напряжений термообработку. Однако для каждого материала режимы и виды термообработки должны подбираться индивидуально. После термообработки для аттестации качества готовых деталей целесообразно применять физические неразрушающие методы. Для ферромагнитных материалов возможно применение магнитных методов контроля. Целью данной работы являлось экспериментальное изучение магнитных и электрических свойств образцов из 3D стали 09Г2С после различных термообработок и сравнение со свойствами литой стали 09Г2С.

Эксперименты проводились на образцах из конструкционной низколегированной стали 09Г2С (0.1% С, 1.5% Мn, <1% Si). Образцы размерами $100 \times 10 \times 4$ мм³ были получены методом СЛС из исходного порошка с размером фракции 10 – 45 мкм. После изготовления образцы отжигались при 350°С в течение 1 и 3 часов, затем часть образцов подвергалась нормализации с 980°С. Измерения магнитных свойств (коэрцитивной силы, остаточной и максимальной индукции, максимальной магнитной проницаемости) проводили на магнитометрической установке Remagraph С-500. Погрешность измерения напряженности магнитного поля и индукции составляли $\pm 1\%$. Измерения удельного электросопротивления проводили с помощью четырехзондового датчика с погрешностью $\pm 1\%$. Магнитные свойства и удельное электросопротивление образцов из 3D стали 09Г2С сравнивались со свойствами образцов из литой стали 09Г2С.

Установлено, что после изготовления методом СЛС и отжига при 350°С образцов из стали 09Г2С коэрцитивная сила более чем в 4 раза превышает коэрцитивную силу литых образцов из стали 09Г2С. Остаточная индукция 3D образцов больше на 40%, максимальная магнитная проницаемость — почти в 3 раза, удельное электросопротивление — практически на 50%, по сравнению со свойствами литой стали 09Г2С. Длительность отжига (1 и 3 часа) практически не влияет на магнитные и электрические свойства 3D образцов. Нормализация 3D стали с 980°С уменьшает коэрцитивную силу и остаточную индукцию практически до уровня свойств литой стали 09Г2С, что может свидетельствовать об уменьшении уровня внутренних механических напряжений и разупрочнения стали. Удельное электросопротивление после нормализации практически не меняется, что говорит о неизменной пористости 3D стали.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Диагностика», №АААА-А18-118020690196-3) при финансовой поддержке РФФИ (проект №20-58-00015 Бел_а).

МАГНИТНЫЕ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛАСТИЧЕСКИ ДЕФОРМИРОВАННОЙ СТАЛИ У8 С РАЗЛИЧНОЙ МОРФОЛОГИЕЙ ПЕРЛИТА

Е.А. Щапова*, А.Н. Сташков, А.П. Ничипурук, С.В. Афанасьев

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: schapova@imp.uran.ru

Высокоуглеродистые стали с перлитной структурой широко применяются для изготовления проволоки, арматуры, рельсов, железнодорожных колес, инструмента [1]. Уже долгое время эти стали вызывают большой научный интерес, поскольку их потенциал по повышению их физико-механических свойств не исчерпан. Эвтектоидная сталь У8 относится к классу перлитных сталей. Известно, что сталь У8 может иметь структуру как глобулярного, так и пластинчатого перлита, в зависимости от предшествующих технологических операций [1,2]. В зависимости от формы перлита, прочностные и пластические свойства стали У8 разные. Магнитные свойства чувствительны к особенностям структуры. Известны и механизмы пластической деформации стали У8. Однако на сегодняшний день нет данных о поведении магнитных свойств в зависимости от степени пластической деформации стали У8 с перлитной структурой различного вида. Целью данной работы являлось установление взаимосвязи между магнитными и механическими свойствами образцов стали У8 с различной морфологией перлита, подвергнутых пластической деформации растяжением.

Исходные образцы из стали У8 со структурами пластинчатого и глобулярного перлита были подвергнуты многостадийной пластической деформации до разрыва в испытательной машине Instron 5982. Исходные размеры плоских образцов составляли $250 \times 8 \times 2$ мм³. В исходном состоянии и после каждой ступени деформации на исследуемых образцах проводились измерения коэрцитивной силы, максимальной и остаточной индукции, а также максимальной магнитной проницаемости на магнитометрической установке Remagraph С-500.

В результате исследования было установлено, что коэрцитивная сила образцов резко увеличивается, а остаточная намагниченность и максимальная магнитная проницаемость уменьшаются при увеличении относительного удлинения. Причем основные изменения свойств происходят до удлинения 4-5%. При дальнейшем увеличении деформации магнитные свойства изменяются незначительно вплоть до разрыва образцов. Характерно, что остаточная индукция недеформированных образцов с разной формой перлита значительно отличается: 1 и 1.3 Тл для образцов с пластинчатым и глобулярным перлитом, соответственно. После незначительного удлинения остаточная индукция образцов становится практически одинаковой, и зависимости остаточной индукции от относительного удлинения сливаются. Хрупкое разрушение образца с пластинчатой формой перлита наступило при удлинении 8%, в то время как образец с глобулярной формой перлита разрушился при удлинении почти 18% с формированием так называемой «шейки». После разрушения образцов магнитные свойства изменились в сторону исходных значений, что свидетельствует о релаксации остаточных напряжений.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №20-32-90139.

1. В.М. Счастливец, Д.А. Мирзаев, И.Л. Яковлева, К.Ю. Окишев, Т.И. Табатчикова, Ю.В. Хлебникова, Перлит в углеродистых сталях. — Екатеринбург: УрО РАН (2006).
2. M.X. Zhang, P.M. Kelly, *Materials Characterization* **60**, 545 (2009).

ТЕПЛОФИЗИКА

ИЗМЕРЕНИЯ ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ ЖИДКОГО Н-ВОДОРОДА НА ЛИНИИ НАСЫЩЕНИЯ В ИНТЕРВАЛЕ ТЕМПЕРАТУР 17 – 21 К

А.А. Акашев*, А.Л. Гурашкин

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: akashev.anton@gmail.com

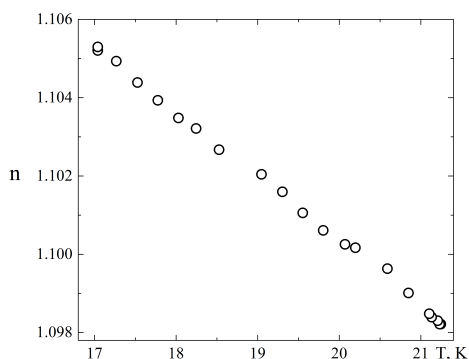


Рис. 1. Температурная зависимость n н-водорода на линии насыщения при $\lambda = 1550$ нм.

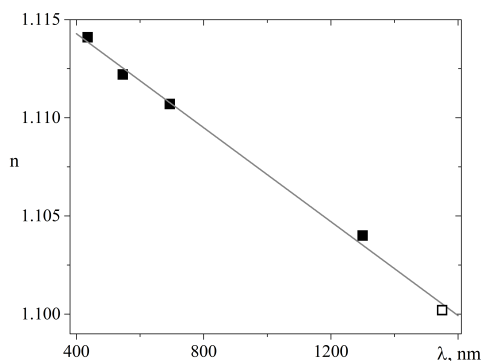


Рис. 2. Зависимость n жидкого водорода на линии насыщения от длины волны при 20 К.

Показатель преломления жидкости n связан с ее плотностью ρ [1]. Значения n могут быть определены по коэффициенту отражения света от торца оптоволоконного датчика, погруженного в изучаемую среду. Малые размеры оптоволоконных датчиков, высокая чувствительность и малая инерционность позволяют использовать их для исследования свойств веществ в быстропротекающих процессах и, в частности, в короткоживущих (метастабильных) системах.

Разработана и создана экспериментальная установка для измерения показателя преломления криогенных жидкостей. Наряду со стабильными, установка позволяет исследовать и метастабильные фазовые состояния.

Проведены измерения показателя преломления нормального водорода на линии насыщения в температурном интервале 17 – 21 К. Использован метод оптоволоконной рефлектометрии [2]. Длина волны светового излучения 1550 нм. Результаты измерений сопоставлены с литературными данными.

Значения показателя преломления в исследуемом температурном интервале на линии насыщения изменяются от 1.105 до 1.098 (рис. 1). Характер полученной температурной зависимости показателя преломления согласуется с литературными данными [3–5], полученными интерферометрическим методом для длин волн от 435.8 до 693.9 нм (рис. 2).

Следующий этап исследований — расширение температурного диапазона установки, проведение измерений в метастабильной области, вычисление плотности вещества на основе измеренного показателя преломления.

1. Б.В. Иоффе, Рефрактометрические методы химии. 3-е изд. — Л.: Химия (1983).
2. K. Obara, H. Ohmura, C. Kato, *et. al.*, J. Low Temp. Phys **175**, 464 (2014).
3. D.E. Diller, J. Chemical Phys **49**, 3096 (1968).
4. C. Yang, S. Chen, G. Yang, Sensors and Actuators A **94**, 69 (2001).
5. H.E. Johns, J.O. Wilhelm, Can. J. Res **15**, 101 (1937).

ВЛИЯНИЕ МАЛЫХ ДОБАВОК ГЕЛИЯ НА ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АЛКАНОВ И ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

В.Н. Андбаева

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: andbaeva@mail.ru

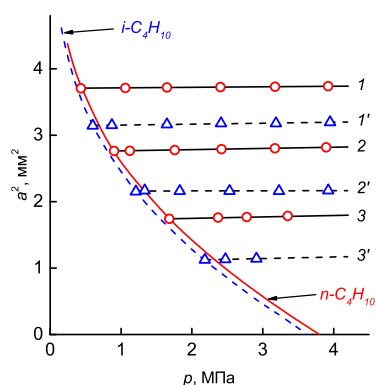


Рис. 1. Барическая зависимость капиллярной постоянной по изотермам: 1, 1' — $T = 318.15$ К, 2, 2' — $T = 348.15$ К, 3, 3' — $T = 378.15$ К. 1, 2, 3 – система $n\text{-C}_4\text{H}_{10}\text{-He}$, 1', 2', 3' – $i\text{-C}_4\text{H}_{10}\text{-He}$.

и $\gamma = \gamma_0 + C_p(p - p_s)$. Здесь $a_0^2(T)$, $\gamma(T)$ — капиллярная постоянная и поверхностное натяжение растворителя.

На рис. 1 представлена барическая зависимость капиллярной постоянной растворов $n\text{-C}_4\text{H}_{10}\text{-He}$ и $i\text{-C}_4\text{H}_{10}\text{-He}$. Как показывают расчеты знак и значение производной $A_p = (\partial a^2 / \partial p)_T$ как функции температуры зависит от природы растворителя. При растворении гелия в аргоне значение производной A_p отрицательно и наклон изотерм a^2 возрастает при приближении к критической точке [2]. В жидких алканах при растворении в них гелия производная A_p положительна. Качественно иной характер наблюдается в системе Xe-He , где $A_p > 0$ [3]. И это значение увеличивается при приближении к критической точке ксенона.

1. В.Г. Байдаков, Межфазная граница простых классических и квантовых жидкостей. Екатеринбург: УИФ «Наука» (1994).
2. А.М. Каверин, В.Н. Андбаева, В.Г. Байдаков, ЖФХ **80**, 3 (2006).
3. V.G. Baidakov, A.M. Kaverin, V.N. Andbaeva, M.N. Khotienkova, J. Chem. Eng. Data **56**, 11 (2011).

Растворимость гелия (He) при давлениях ниже критического давления растворителя не превышает 1-3%. Поэтому гелий можно назвать одним из малорастворимых в жидкости газом. В работе исследуется влияние гелия на капиллярную постоянную, поверхностное натяжение алканов (нормальный бутан ($n\text{-C}_4\text{H}_{10}$), изобутан ($i\text{-C}_4\text{H}_{10}$)) и инертных газов (ксенон (Xe), аргон (Ar)). Экспериментальные данные по капиллярной постоянной и поверхностному натяжению получены дифференциальным методом капиллярного поднятия [1]. Измерения проводились по изотермам при давлении от давления насыщения растворителя p до 4 МПа. В указанном диапазоне параметров состояния зависимости капиллярной постоянной и поверхностного натяжения от давления близки к линейным и в пределах погрешности эксперимента описываются уравнениями вида $a^2 = a_0^2 + A_p(p - p_s)$

КОЭФФИЦИЕНТЫ ТЕМПЕРАТУРОПРОВОДНОСТИ ПОЛИПРОПИЛЕНГЛИКОЛЕЙ
И ИХ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

Н.С. Богатищева

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: bogatishcheva@mail.ru

Полипропиленгликоли $\text{H}[\text{OCH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2]_n\text{OH}$ широко применяются в различных отраслях промышленности: в качестве пластификаторов, гидравлических жидкостей, в производстве растворителей и синтетических смазочных масел. Низкозамерзающие теплоносители на основе водных растворов полипропиленгликолей активно используются в системах отопления, вентиляции, кондиционирования, а также в другом теплообменном оборудовании. Для повышения эффективности работы данных систем требуется знание теплофизических свойств, в частности коэффициентов температуропроводности и теплопроводности теплоносителей в широком интервале температур и концентраций. Достаточно хорошо изучены теплофизические свойства начальных членов ряда полипропиленгликолей (от монопропиленгликоля до трипропиленгликоля) и, в основном, чистых веществ. Коэффициенты температуропроводности полипропиленгликолей с более высокой молекулярной массой и их водных растворов в доступной литературе отсутствуют.

В данной работе были измерены коэффициенты температуропроводности растворов пропиленгликоль + вода, дипропиленгликоль + вода, трипропиленгликоль + вода в интервале температур от 303 К до 353 К и в полном диапазоне концентраций; для растворов ППГ 425 + вода и ППГ 725 + вода (растворы с нижней критической точкой расслаивания) измерения были выполнены до температуры фазового разделения раствора по механизму жидкость-жидкость.

Измерения коэффициента температуропроводности были выполнены методом лазерной вспышки с помощью установки LFA-457 MicroFlash Netzsch. Для работы с жидкими соединениями использовались два контейнера с разной толщиной слоя исследуемого вещества: 0.33 мм и 0.4 мм. Более подробно методика измерения коэффициентов температуропроводности жидкостей изложена в статье [1]. По нашим оценкам погрешность измерений для жидких соединений не превышает 5%.

Полученные результаты измерения для чистых компонентов смесей сравнивались с имеющимися литературными данными: для пропиленгликоля — с результатами прямых измерений температуропроводности [2], для дипропиленгликоля и трипропиленгликоля — с результатами расчета на основе данных по теплопроводности [3], плотности и изобарной теплоемкости [2]. Различия между значениями, полученными в данной работе, и литературными данными не превышают 3%.

Для растворов пропиленгликоль + вода, дипропиленгликоль + вода, трипропиленгликоль + вода, ППГ-425 + вода были получены уравнения, которые позволяют рассчитать коэффициенты температуропроводности в зависимости от концентрации компонентов и температуры смеси. Для чистых компонентов растворов были рассчитаны коэффициенты теплопроводности в исследованном температурном диапазоне.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 19-19-00115.

1. Н.С. Богатищева, М.З. Файзуллин, Е.Д. Никитин, Журнал Физ. Химии **91**, 9, 1484 (2017).
2. З.И. Зарипов, Г.Х. Мухамедзянов, Теплофизические свойства жидкостей и растворов. — Казань: Издательство Казанского государственного технологического университета (2008).
3. T.Sun, A.S. Teja, J. Chem. Eng. Data **49**, 1311 (2004).

ИССЛЕДОВАНИЕ УГЛА РАСКРЫТИЯ СВОБОДНОЙ СТРУИ ПЕРЕГРЕТОЙ ВОДЫ
ПРИ ИСТЕЧЕНИИ ЧЕРЕЗ ЦИЛИНДРИЧЕСКИЙ КАНАЛ

К.А. Бусов*, А.С. Томин

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: kbusov@itp.uran.ru

Истечение двухфазных потоков находит широкое практическое применение в различных технических устройствах (системы охлаждения, опреснительные установки, впрыск топлив в двигателях внутреннего сгорания и др.). Важными вопросами в исследованиях газов и жидкостей, истекающих через каналы различной геометрической формы, являются задачи, связанные с составом, формой, структурой и устойчивостью среды. Анализ публикаций показывает, что важную роль в процессах диспергирования играет угол раскрытия истекающей струи [1-5]. Исследования струй перегретых жидкостей показали, что при определенных термодинамических и конструктивных условиях, угол раскрытия метастабильного потока может изменяться до развернутого угла [6]. Цель данной работы заключалась в изучении изменения угла раскрытия свободной струи перегретой воды, истекающей через короткий цилиндрический канал (диаметр $d = 0.5$ мм) в неподвижную воздушную среду при атмосферном давлении. Струи перегретой воды анализировались в трех различных диапазонах с характерными размерами $l_1 \sim 1$ м, $l_2 \sim 0.1$ м, $l_3 \sim 0.01$ м (l — расстояние от выходного среза цилиндрического канала).

В ходе проведения экспериментов был прослежен характер изменения угла раскрытия свободной струи для различных степеней перегрева. Обнаружено, что с ростом термодинамических параметров (температура, давление) до реализации взрывного вскипания наблюдался практически линейный рост угла раскрытия. В условиях интенсивного гетерогенного зародышеобразования для метрового ($l \sim 1$ м) и дециметрового диапазонов ($l \sim 0.1$ м) отмечалось достижение максимума угла раскрытия струи с последующим уменьшением. В сантиметровом интервале ($l \sim 0.01$ м) установлено лишь монотонное увеличение угла раскрытия струи (уменьшение угла раскрытия не наблюдалось) с ростом температуры. При глубокой степени метастабильности, когда в струе реализовывался механизм интенсивного гомогенного парообразования, угол раскрытия потока достигал максимального значения $\alpha = 120^\circ$. В этом случае разница в углах раскрытия для сантиметрового и метрового интервалов составляла около 100° . Также прослежено сокращение длины сечения вскипания с увеличением температуры.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации (грант № МК-1933.2020.8)

1. L. Rayleigh, On the instability of jets, Proc. London Math. Soc., **10** (1878).
2. H. Lefebvre *et al.*, Atomization and Sprays, CRC Press, (2017).
3. J. Eggers *et al.*, Physics of liquid jets, Rep. Prog. Phys. **71** (2008).
4. N. Ashgriz *et al.*, Handbook of atomization and sprays: theory and applications, Springer, (2011).
5. T. Bar-Kohany *et al.*, State of the Art Review of Flash-Boiling Atomization, Atomization and Sprays, **26**, 12 (2016).
6. K.A. Busov, N.A. Mazheiko, O.A. Kapitunov, V.N. Skokov, V.P. Koverda, Transient modes in a swirl jet of superheated water, Int. J. Heat Mass Transf. **157**, 119711 (2020).

ИНТЕНСИФИКАЦИЯ ТЕПЛООБМЕНА ПРИ СПИНОДАЛЬНОМ РАСПАДЕ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ПОЛИПРОПИЛЕНГЛИКОЛЕЙ

Д.В. Волосников^{1*}, И.И. Поволоцкий¹, М.Г. Васин^{2,3}, П.В. Скрипов¹

¹Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Троицк, Россия

³Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: dima_volosnikov@mail.ru

Миниатюризация электронных компонентов, рост производительности микропроцессоров и повышение тепловыделения при пиковых нагрузках требует создания эффективных систем охлаждения. Применение известных схем охлаждения миниатюрных систем зачастую дорогостояще [1] или технологически затруднительно, например, зеркал мощных лазеров с системой микроканалов, заполненных однокомпонентным жидким теплоносителем [2]. Задачи интенсификации теплообмена при фазовом переходе жидкость-пар успешно решены в случае крупных и среднеразмерных теплообменных аппаратов. Конструкции миниатюрных теплообменных систем чувствительны к образованию «сухих» пятен, подвержены локальному перегреву и разрушению. Необходим поиск путей отвода тепла в условиях мощных локальных нагревов и значительных температурных напоров, свойственных современным вычислительным и электронным системам. Данное исследование направлено на изучение спинодального распада [3], как разновидности фазового перехода в расслаивающихся растворах, связанного с разделением раствора на две фазы разного состава, сопровождающимся интенсификацией теплообмена. Данный эффект перспективен при создании систем порогового регулирования теплообмена [4].

Цель работы — выяснение условий реализации спинодального распада в водных растворах полипропиленгликолей (ППГ) со средней молекулярной массой $M_n \sim 425$ и 725 при их импульсном нагреве выше нижней критической температуры растворения (НКТР).

В докладе представлены следующие результаты исследования водных растворов ППГ-425 и ППГ-725: фазовая диаграмма с линиями бинодалей (опыт) и спинодалей (расчет); коэффициенты мгновенной теплоотдачи к водным растворам ППГ в области устойчивых и неустойчивых состояний, полученные методом импульсного изотермического воздействия на вещество $\Delta T_{st}(t) = \text{const}$, где $t = 100$ мс [5]. На фазовой диаграмме раствора определена область спинодального распада при заданной продолжительности опыта в диапазоне концентраций ППГ (10 – 30) масс.% и температурах $T_{st} \sim (225 - 300)^\circ\text{C}$.

Исследования водных растворов — типичных представителей растворов с НКТР востребованы при создании миниатюрных систем охлаждения. Теплообмен в микроканалах за счет спинодального распада имеет ряд преимуществ по сравнению с теплообменом при фазовом переходе жидкость-пар: отсутствует «разрушительный» скачок давления, на поверхности нагревателя не образуется сухое пятно. Эффект спинодального распада в растворах с верхней критической температурой расслаивания (ВКТР) может быть использован при создании систем нагрева [6].

Работа выполнена при поддержке РФФ проект № 19-19-00115.

1. В.И. Дмитрин, Ю.Ф. Майданик, Тепловые процессы в технике **9**, 8 (2017).
2. Ю.И. Шанин, Тепловые процессы в технике **12**, 1 (2020).
3. В.П. Скрипов, А.В. Скрипов, Успехи физических наук **128**, 6 (1979).
4. W. Xing, A.K. Vutha, X. Yu, A. Ullmann *et al.*, International Journal of Heat and Mass Transfer **107** (2017).
5. П.В. Скрипов, А.А. Старостин, Д.В. Волосников, Доклады РАН **390**, 2 (2003)
6. A. Ullmann, K. Maevski, N. Brauner, International Journal of Heat and Mass Transfer **70** (2014).

ИЗМЕРЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ВОДНОГО РАСТВОРА ППГ-425

Д.А. Галкин*, П.В. Скрипов

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: dmitry.gall10@gmail.com

Измерение коэффициента теплопроводности, а если точнее, расчет величины коэффициента теплопроводности из первичных результатов эксперимента по идеальной модели, является совершенно необходимым в рамках комплексного изучения процессов переноса. Поскольку объектами в наших опытах являются сложные жидкие среды, в качестве наиболее подходящего метода подобных измерений был выбран метод нестационарного нагрева тонкого проволочного зонда (Transient Hot Wire Method в англоязычной литературе, коротко, THW).

Ранее нами была реализована методика управления мощностью, рассеиваемой на нагревателе-зонде [1], для исследования переноса тепла в термонапряженных процессах. Данная методика послужила основой для разработки собственной установки, работающей по принципу THW [2,3]. Обзор научной литературы, связанной с THW методом, показал, что в широко применяемых коммерческих установках не выполняется ключевое требование модели – поддержание постоянства плотности теплового потока [4]. Упомянутое требование эквивалентно поддержанию постоянства мощности на нагревателе-зонде в ходе импульса нагрева. Выполнение этого требования является сложной задачей, поскольку свойства материала зонда и исследуемого вещества зависят от температуры. В итоге, задача поддержания постоянства мощности ранее так и не была решена [5]. Соответственно, в известных реализациях THW метода прибегают к различного рода пересчетам и схмотехническим ухищрениям, существенно усложняющим процедуру сбора первичных данных.

Нам удалось адаптировать созданную ранее методику постоянной мощности применительно к задачам THW, подразумевающим сравнительно малые значения температурного напора (единицы К) и большие длительности греющего импульса (единицы секунд). Точность поддержания установленного значения мощности составляет величину не хуже 99.95%. Проверка на эталонных жидкостях показала хорошее согласие получаемых данных со справочными данными.

В докладе будут представлены результаты по измерению коэффициента теплопроводности водного раствора полипропиленгликоля с молекулярной массой, равной 425 (ППГ-425). Содержание воды изменялось во всем диапазоне концентраций. Измерения проведены в диапазоне температур от 30°C до температуры фазового разделения раствора по механизму жидкость-жидкость.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 19-19-00115.

1. S.B. Rutin, P.V. Skripov, J. Eng. Thermophys **21**(2), 144 (2012).
2. S.B. Rutin, D.A. Galkin, P.V. Skripov, Int. J. Heat Mass Transfer **115**, 769 (2017).
3. S.B. Rutin, D.A. Galkin, P.V. Skripov, Applied Thermal Engineering **129**, 145 (2018)
4. U. Hammerschmidt, W. Sabuga, Int. J. Thermophys **21**(6), 1255 (2000).
5. B. Hakansson, P. Andersson, G. Backstrom, Rev. Sci. Instrum **59**(10), 2269 (1988).

ОЦЕНКА КРИТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ЧАСТИЧНО-РАСТВОРИМЫХ БИНАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

А.А. Игольников*, С.Б. Рютин, П.В. Скрипов

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: alexander.igolnikov@bk.ru

Современные электронные устройства являются мощными источниками тепла, обладающими малыми характерными размерами. Поддержание заданных режимов работы микропроцессоров требует применения современных теплопередающих устройств. В этой связи, наряду с использованием микроканальных технологий, потенциальными жидкими теплоносителями могут выступать бинарные растворы, имеющие ограниченную область смешения в координатах температура-концентрация. Таким соединениям присуще явление спиноподобного распада при пересечении диффузионной спиноподобности жидкость-жидкость.

Спиноподобный распад — это особый случай начальной стадии фазового превращения, когда систему удается перевести в лабильное состояние, вследствие чего релаксация системы сопровождается усилением случайных неоднородностей концентрации частиц и возможным появлением модулированных релаксационных структур [1].

При теплофизическом описании жидких систем в рамках теории термодинамического подобия требуется наличие критических параметров, оценка которых и является целью настоящей работы.

Для экспериментального изучения частично-растворимых систем нами выбраны растворы, обладающие нижней критической температурой растворения (НКТР), так как степень их изученности мала. Принимая во внимание факт расслоения исследуемых растворов в условиях стационарного нагрева, нами был предложен метод управляемого импульсного нагрева проволочного зонда, погруженного в гомогенный (в исходном состоянии) раствор заданной концентрации. Суть метода заключается в поддержании заданного режима тепловыделения на зонде, в том числе на фоне фазовых и структурных превращений. Это достигается за счет применения операционных усилителей с обратной связью в аналоговой схеме [2,3]. В ходе импульсного нагрева регистрируются падение напряжения на зонде и ток в цепи питания в зависимости от времени. Получение первичных данных сопровождается расчетом мощности тепловыделения и температуры зонда — термометра сопротивления. Поскольку метод чувствителен к разрешению фазовых превращений, становится возможным построение линий достижимого перегрева и доступного для метода участка критической кривой растворов, перегретых относительно спиноподобности жидкость-жидкость.

В работе будут представлены данные по критической кривой раствора вода/ППГ-425 и его достижимому перегреву в зависимости от концентрации полипропиленгликоля в воде, а также результаты сопоставления теплофизических свойств раствора в неустойчивых состояниях при заданном тепловом режиме. Параметрами эксперимента являются давление и концентрация ППГ в воде.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 19-19-00115.

1. В.П. Скрипов, А.В. Скрипов, УФН **128**, 2, 193 (1979).
2. S.B. Rutin, D.V. Volosnikov, P.V. Skripov, Int. J. of Heat and Mass Transf. **91**, 1 (2015).
3. S.B. Rutin, D.A. Galkin, P.V. Skripov, Int. J. of Heat and Mass Transf. **115**, 769 (2017).

ПРЕДСКАЗАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УГЛЕВОДОРОДОВ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Н.Д. Кондратюк^{2,1*}, В.В. Писарев^{1,2}

¹Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия

²Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, Москва, Россия

*e-mail: nidkond@gmail.com

Исследование свойств существующих углеводородных жидкостей, а также поиск новых соединений с необходимыми параметрами представляют большой промышленный интерес, так как они лежат в основе смазочных и топливных жидкостей.

В докладе будут продемонстрированы методики по молекулярно-динамическому расчету уравнений состояния и коэффициентов переноса для жидких углеводородов [1-6]. Проведено сравнение потенциалов межатомного взаимодействия по их предсказательной способности. Предсказанные без наличия экспериментальных данных коэффициенты вязкости для нормальных [3,4], разветвленных [5] алканов и ароматических соединений [6] в диапазоне давлений от 0.1 МПа до 1 ГПа совпадают с опубликованными позднее экспериментальными работами (рис. 1). Показан универсальный скейлинг между коэффициентами диффузии и вязкости (рис. 2) при давлениях вплоть до 500 МПа [6].

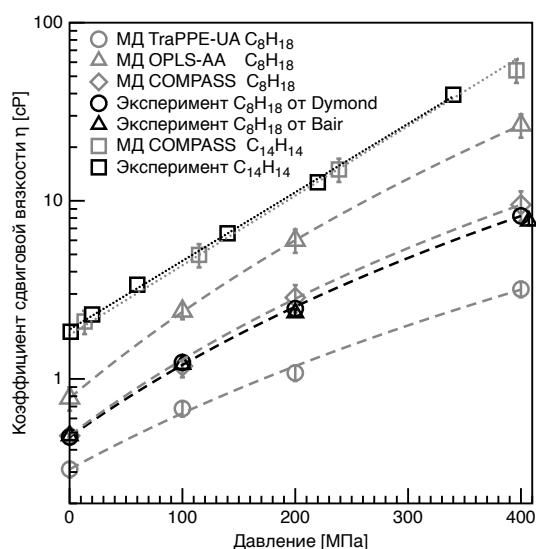


Рис. 1. Результаты МД расчета зависимости вязкости от давления в различных силовых полях (Δ \circ \square) vs. экспериментальные данные (черные символы Δ \circ \square) для изооктана C_8H_{18} и для 1,1-дифенилэтана $C_{14}H_{14}$.

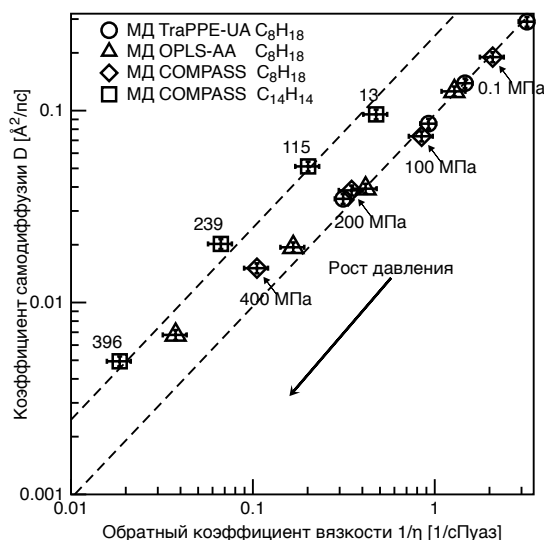


Рис. 2. Зависимость коэффициента самодиффузии от обратной сдвиговой вязкости для разных давлений для изооктана C_8H_{18} в различных силовых полях (Δ \circ \square) и для 1,1-дифенилэтана $C_{14}H_{14}$ (\square). Чем ниже точки, тем выше давление.

Работа частично подготовлена в ходе проведения исследования в рамках Программы фундаментальных исследований Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ).

1. Н.Д. Кондратюк, Г.Э. Норман, В.В. Стегайлов. ВМС Сер. А. **58**(5), 519-531 (2016)
2. N.D. Kondratyuk, G.E. Norman and V.V. Stegailov. J. Chem. Phys. **145**(20), 204504 (2016).
3. V. Pisarev and N. Kondratyuk. Fluid Phase Equilib. **501**, 112273 (2019).
4. N.D. Kondratyuk and V.V. Pisarev. Fluid Phase Equilib. **498**, 151-159 (2019).
5. N. Kondratyuk. J. Chem. Phys. **151**(7), 074502 (2019).
6. N. Kondratyuk, D. Lenev and V. Pisarev. J. Chem. Phys. **152**, 191104 (2020).

ПРИМЕНЕНИЕ СКОРОСТНОЙ ВИДЕОСЪЕМКИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ФРОНТА ИСПАРЕНИЯ ПЕРЕГРЕТОГО Н-ПЕНТАНА ПРИ ГЕТЕРОГЕННОМ ВСКИПАНИИ В СТЕКЛЯННОМ КАПИЛЛЯРЕ

Е.В. Липнягов*, М.А. Паршакова

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: el_ru@el.ru

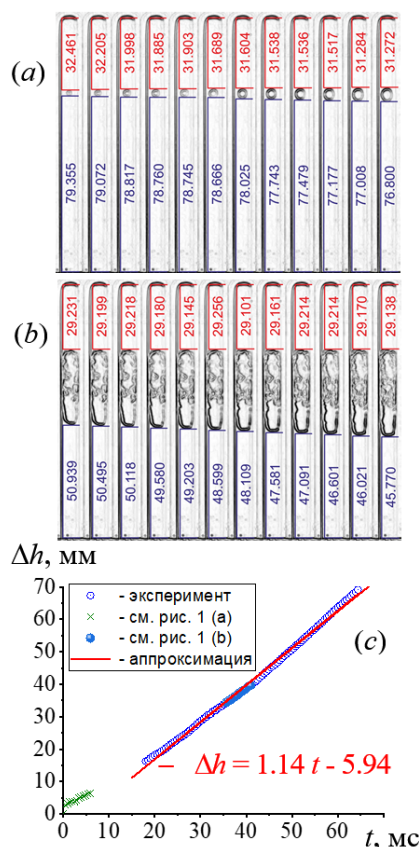


Рис. 1. Видеокадры процесса вскипания перегретого н-пентана при давлении 0.10 МПа, температуре 100.2 °С и их обработка: (а) – рост пузыря; (б) – фронт испарения; (с) – зависимость распространения фронта испарения от времени. Время между кадрами – 0.49 мс. Это представляет интерес как для развития теории высокоинтенсивных фазовых переходов, так и для решения ряда прикладных задач.

В докладе представлены экспериментальные данные по линейной скорости распространения фронта испарения, сформированного в результате спонтанного вскипания перегретого н-пентана в стеклянном капилляре. Перегрев реализован путем понижения давления на термостатируемую жидкость от 2.00 до 0.10 МПа в интервале температур 100.2–135.1 °С. Высота термостатируемой области — 114.6 мм, внутренний диаметр капилляра — 5.6 мм. Скорости рассчитаны по выборочным кадрам скоростной видеосъемки процесса вскипания перегретой жидкости. Частота видеосъемки составила 2050 кадров в секунду. Кинетика данного процесса изучена методами непрерывного понижения давления и измерения времен жизни перегретой жидкости [1, 2].

Из всего массива видеоданных (более 1000) отобраны файлы, на которых вскипание перегретого н-пентана возникает на одном и том же центре парообразования при разных температурах, а паровой пузырь при достижении противоположной стенки формирует две фазовых границы раздела: верхнюю (малоподвижную) и нижнюю (фронт испарения) (см. рис. 1). По видеокдрам определены положения верхней h_1 и нижней h_2 границ раздела в момент времени t , рассчитаны разность этих величин Δh , скорость распространения парового фронта $v = dh/dt = \text{const}$. В частности, для температур 100.2 и 115.2 °С получено $v = 1.14$ и 1.44 м/с, соответственно. Привязка к реальным значениям h осуществлена при помощи катетометра КМ-6.

Данные по распространению фронта испарения перегретой жидкости могут быть использованы для построения модели неравновесного испарения. С её помощью можно определить температуру жидкости на границе жидкость-пар, получить коэффициенты теплоотдачи на межфазной поверхности в условиях умеренного и сильного перегрева.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-08-00270).

1. В.П. Скрипов, Е.Н. Сеницын, П.А. Павлов и др., Теплофизические свойства жидкостей в метастабильном состоянии. — М.: Атомиздат (1980).
2. E.V. Lipnyagov, M.A. Parshakova, and S.A. Perminov, Int. J. Heat and Mass Trans. **104**, 1353 (2017).

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ НАИБОЛЕЕ ВЕРОЯТНЫХ ЦЕНТРОВ ПАРООБРАЗОВАНИЯ НА КИНЕТИКУ СПОНТАННОГО ВСКИПАНИЯ ПЕРЕГРЕТОГО Н-ПЕНТАНА

М.А. Паршакова*, Е.В. Липнягов

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: parmari@yandex.ru

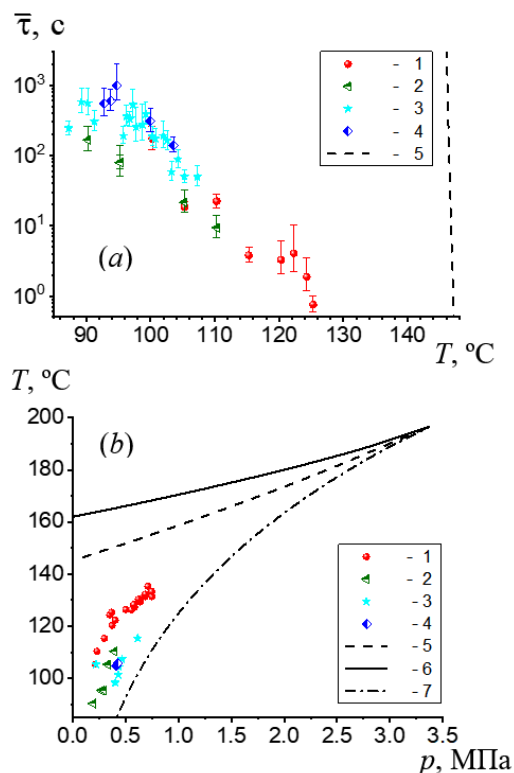


Рис. 1. Зависимость среднего времени жизни перегретого н-пентана от температуры при давлении 0.10 МПа (а) и фазовая диаграмма н-пентана (б): (1) — эксперимент без ПТС; (2-4) — в присутствии ПТС; (5) — граница достижимого перегрева; (6) — спинопаль; (7) — бинопаль. Трубка перезаполнялась н-пентаном только перед сериями (1) и (2).

В работе представлены экспериментальные данные по изучению кинетики спонтанного вскипания перегретого н-пентана в стеклянной трубке, имеющей два видимых дефекта на внутренней поверхности. Данные получены как в присутствии внутри трубки платинового термометра сопротивления HEL-705-U-012-00 (ПТС), так и в его отсутствии. Опыты проведены методами непрерывного понижения давления (в диапазоне температур 90.3-135.3 °С) и измерения времен жизни (87.3-125.3 °С) [1, 2]. В первом случае измерялись температура и давление, при которых жидкость вскипает, во втором – температура и время жизни перегретой жидкости при установившемся атмосферном давлении. Одновременно с частотой 2050 кадров в секунду велась скоростная видеосъемка процесса вскипания. Внутренний диаметр трубки $D = 5.6$ мм, объем перегреваемой области $V = 2.8 \cdot 10^{-6}$ м³.

На рис. 1(а) представлена зависимость среднего времени жизни перегретого н-пентана от температуры при атмосферном давлении. Она имеет классический вид: 2 ниспадающих участка и 1 – 2 «плато». Уровни «плато» (порядка 10^3 и 10 с) характерны для других опытов по перегреву н-пентана в стеклянных капиллярах [1, 2]. Их принято объяснять воздействием фонового излучения. На рис. 1(б) показана зависимость температуры перегретого н-пентана от средних значений давления при вскипании на сбросе. На рис. 1 также изображена граница достижимого перегрева, рассчитанная по теории гомогенной нуклеации. «Недогрев» до теории составляет 20-35 °С. Дефекты трубки определяют верхнюю границу перегрева, а место сближения ПТС со стеклом — нижнюю. Визуализация мест появления первого жизнеспособного пузыря с помощью ядерной оценки плотности их распределения [2] позволила выделить наиболее вероятные центры парообразования, а также получить их статистические характеристики.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-08-00270).

1. В.П. Скрипов, Е.Н. Синицын, П.А. Павлов и др. Теплофизические свойства жидкостей в метастабильном состоянии. — М.: Атомиздат (1980).
2. E.V. Lipnyagov, M.A. Parshakova, and S.A. Perminov, Int. J. Heat and Mass Trans, **104**, 1353-1361 (2017).

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ РАССЛАИВАЮЩИХСЯ РАСТВОРОВ
ОКТЕН-ФТОРИРОВАННЫЙ УГЛЕРОД

И.И. Поволоцкий*, Д.В. Волосников, П.В. Скрипов
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e-mail: iliyapov@rambler.ru

Скорость протекания химических реакций при синтезе органических соединений является важным параметром при их масштабировании. В технологиях флэш-синтеза используются системы микропотоков, а сами реакции протекают в миниатюрных химических реакторах. При этом время реакций сокращается от стандартных (в случае использования колб) часов-минут до диапазона миллисекунд-секунд. В этой связи, актуально развитие быстродействующих методик и средств контроля реакции [1].

Существенным ограничением использования растворов является частичная или полная (в зависимости от температуры при заданном давлении) несовместимость их компонентов. Знание фазовой диаграммы, оценка областей гомогенного состояния раствора, определение линий фазового разделения по механизму жидкость-жидкость (линия бинодали) являются исходными и необходимыми сведениями. Нами исследуются существенно неидеальные бинарные растворы «непредельный углеводород / фторированный углерод», системы с верхней критической температурой растворения (ВКТР).

Цель работы — определение линии бинодали растворов данного типа в координатах концентрация-температура и поиск положения критической точки на этой линии (ВКТР); определение и сопоставление тепловой проводимости чистых компонентов и их растворов; разработка методики определения фазового и компонентного состава.

Опыты по определению бинодали выполнены двумя методами – традиционным методом визуального наблюдения и методом двух-импульсного нагрева зонда [2]. Работа импульсного метода основана на контроле косвенного признака, соотносимого с данными первого метода и связанного с нарушением гомогенности среды при приближении к линии бинодали. В случае ВКТР речь идет о приближении сверху, а параметром опыта служит температура в объеме раствора. Для повышения чувствительности к малым изменениям свойств раствора в исходном состоянии, измерения проведены в области его кратковременно перегретых (относительно температуры равновесия жидкость-пар) состояний.

В рамках доклада планируется обсудить данные для растворов октена в перфторметилциклогексане и карбогале. Результаты определения бинодали, полученные двумя методами, достаточно хорошо согласуются между собой. Сопоставление данных о переносе тепла растворами в двухфазной и гомогенной областях исходного состояния, наряду с выявлением положения бинодали, позволило оценить влияние расслаивания раствора на его тепловую проводимость в области устойчивых и перегретых состояний. В некоторых случаях импульсный метод позволил заранее (от 1 К до 5 К, в зависимости от концентрации) «почувствовать» приближение температуры разделения жидкость– жидкость. В этой связи, метод может быть адаптирован к задаче дистанционного контроля растворов с ВКТР в процессах синтеза в гомогенной среде, сопровождающихся изменением как температуры в реакторе, так и концентрации реакционно-способного компонента.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 19-38-90075.

1. J.I. Yoshida, Flash Chemistry: Fast Organic Synthesis in Microsystems, John Wiley & Sons, (2008).
2. K.V. Lukynov, A.A. Starostin, P.V. Skripov, Int. J. Heat Mass Transf. **106** (2017).

ПЛОТНОСТЬ И ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЕ СПЛАВОВ Al – Ni – Co – РЗМ,
СКЛОННЫХ К ФОРМИРОВАНИЮ АМОРФНОГО СОСТОЯНИЯБ.А. Русанов^{1*}, А.И. Мороз^{1,2}, В.Е. Сидоров¹, П. Швец³, П. Швец ст.³, Д. Яничкович³¹Уральский государственный педагогический университет, Екатеринбург, Россия²Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия³Институт физики Словацкой академии наук, Братислава, Словакия*e-mail: rusfive@mail.ru

Сплавы композиций алюминий — переходный металл (ПМ) — редкоземельный металл (РЗМ) представляют особый интерес для исследователей, благодаря высокой стеклообразующей способности и высоким механическим и коррозионным свойствам в аморфном состоянии [1, 2]. Процесс их получения и температурные режимы разлива могут существенно влиять на структуру и свойства в аморфном и нано-кристаллическом состояниях [3]. Исследование их структурно-чувствительных свойств в жидком состоянии позволит определить оптимальные режимы разлива при быстрой закалке для получения аморфных сплавов с заранее заданными свойствами. В данной работе исследованы теплофизические свойства (плотность и электросопротивление) сплавов Al-Ni-Co-РЗМ (РЗМ – Nd, Gd, Yb) с различными соотношениями переходных металлов (от 2 ат.% до 6 ат.%). Содержание РЗМ в сплавах — 6 ат.%. Плотность сплавов в кристаллическом и жидком состояниях измерена абсолютным вариантом метода проникающего гамма-излучения в температурном интервале от комнатной температуры до 1550 К. Измерения проводили при избыточном давлении высокочистого гелия в режиме непрерывного нагрева/охлаждения со скоростью 3 К/мин. Электрическое сопротивление сплавов изучено с помощью бесконтактного метода во вращающемся магнитном поле. Опыты проводили в атмосфере гелия в температурном интервале от комнатной температуры до 1550 К с изотермическими выдержками 10 мин через каждые 30 К. Для определения особенностей фазовых переходов и определения температур плавления/кристаллизации был проведен дифференциальный термический анализ (ДТА) на установке Perkin Elmer DTA-7 со скоростью 10 К/мин в потоке аргона. В денситометрических опытах установлено нелинейное поведение плотности сплавов в двухфазной области. Сплавы Al-Ni-Co-РЗМ (РЗМ – Nd, Gd, Yb) имеют широкий интервал двухфазного состояния (около 400 К), в котором в процессе нагрева происходит несколько скачков плотности, сопровождающихся тепловыми эффектами (согласно ДТА). Было обнаружено нехарактерное для алюминиевых сплавов увеличение плотности при нагреве при температуре, соответствующей плавлению интерметаллида Al₉Co₂. Кроме того, в двухфазной области наблюдается несовпадение (гистерезис) плотности в режимах нагрева/охлаждения, который исчезает при полной кристаллизации/плавлении сплавов. Было установлено, что электросопротивление сплавов линейно увеличивается при нагреве, а скачки абсолютных значений совпадают по температуре с изменениями плотности и тепловыми процессами, зафиксированными в ДТА. Переход из кристаллического в двухфазное состояние сопровождается скачкообразным увеличением значений сопротивления при нагреве и уменьшением при охлаждении, соответственно. Процесс плавления сопровождается лишь изменением наклона кривой сопротивления, который характеризует изменение температурного коэффициента сопротивления (ТКС).

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-32-80001).

1. Y. Jin, A. Inoue, F.L. Kong *et al.*, Journal of Alloys and Compounds **832**, 154997 (2020).
2. B. Rusanov, V. Sidorov, P. Svec *et al.*, Journal of Alloys and Compounds **787**, 448 (2019).
3. F.C. Li, T.Liu.Y. Zhang *et al.*, Materials Today Advances **4**, 100027 (2019).

ЭЛЕКТРОФИЗИКА

ИССЛЕДОВАНИЕ УСЛОВИЙ ФОРМИРОВАНИЯ КАПЕЛЬ В ПРОЦЕССЕ ИСПАРЕНИЯ Nd:Y₂O₃ ИЗЛУЧЕНИЕМ ВОЛОКОННОГО ЛАЗЕРА

М.А. Гашков^{1*}, Н.М. Зубарев^{1,2}, Е.А. Кочурин¹, В.В. Лисенков¹, В.В. Осипов¹, В.В. Платонов¹,
Е.В. Тихонов¹

¹Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

*e-mail: gashkov@iep.uran.ru

В [1] было показано, что в процессе синтеза нанопорошка из Nd:Y₂O₃ излучением волоконного лазера в мишени наблюдалось образование кратеров глубиной в сотни микрон. Это сопровождалось разлётом большого количества капель расплава, что отрицательно сказывалось на производительности получения порошка [2]. Возможные причины и условия, при которых можно наблюдать явление образования капель были исследованы, например, в работах [3, 4]. Поэтому актуальной задачей является анализ условий образования капель, разлетающихся из кратера, возникающего под действием излучения волоконного лазера.

По аналогии с [3, 4] для анализа характера протекания процессов используются безразмерные величины: числа Рейнольдса $Re = U_m D / \nu$ и Вебера $We = \rho U_m^2 D / \sigma$, где U_m , σ , ν , ρ_m — скорость, поверхностное натяжение, вязкость и плотность расплава, D — диаметр лазерного пятна на поверхности мишени [1, 2]. Рассмотрим два критерия расплёскивания: для смоченной поверхности: $K = We^{0.8} Re^{0.4} \geq 2100$ [3] и для сухой $K = We^{0.5} Re^{0.25} \geq 57.7$ [4]. Применительно к анализу движения расплава мы построим параметр расплёскивания K в зависимости от избыточного давления p лазерного факела, т.е. разницы давлений в лазерной плазме и окружающем ее буферным газом. По нашим оценкам, оно лежит в диапазоне от 1 до 4 атмосфер. Давление p можно связать со скоростью движения расплава формулой Бернулли $p = \rho_m U_m^2 / 2$. Оценим параметры образования капель для условий работ [1,2,5]: $\rho_m = 4000$ кг/м³, $\sigma = 1.0$ Н/м, $\nu = 2.5 \cdot 10^{-7}$ м²/с; $D = 250$ мкм и 430 мкм.

На рисунке 1 представлен график зависимостей критериев расплёскивания для разных диаметров D . Видно, что для сухой поверхности всплески будут возникать для всех значений давления из заданного интервала. С другой стороны, для критериев возникновения вторичных капель на смоченной поверхности найдётся область, в которой капли не будут возникать: для $D = 250$ мкм, $p_{cr} \approx 1.3$ атм., для $D = 430$ мкм $p_{cr} \approx 2.6$ атм. Таким образом, пороговое значение избыточного давления лазерного факела можно оценить как 1.5 – 2.5 атм.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ № 20-38-70022.

1. В.В. Осипов, В.В. Лисенков, В.В. Платонов и др. ЖТФ, **84**, 88 (2014).
2. V.V. Osipov, V.V. Platonov, V.V. Lisenkov *et al.*, Appl. Phys. A, **124**, 3 (2018).
3. G.E. Cossali, A. Coghe, M. Marengo. Exp. Fluids, **22**, 463 (1997).
4. C.H.R. Mundo, M. Sommerfeld, C. Tropea. Int. J. Multiphase Flow, **21**, 151 (1995).
5. E.A. Kochurin *et al.*, J. Phys.: Conf. Ser. **774**, 012121 (2016).

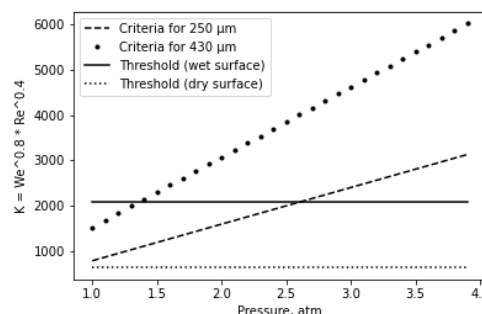


Рис. 1. Зависимость параметра расплёскивания материала подложки K от избыточного давления лазерного факела p .

ИЗУЧЕНИЕ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ТИТАНА, ПОЛУЧЕННЫХ
МАГНИТНО-ИМПУЛЬСНЫМ ПРЕССОВАНИЕМ НАНОПОРОШКОВ

С.В. Заяц*, А.С. Кайгородов, С.Н. Паранин

Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: seriyoga@iep.uran.ru

Титан и титановые сплавы являются очень привлекательными материалами для перспективных областей применения благодаря низкой плотности, высоким механическим свойствам и коррозионной стойкости. Дальнейшее совершенствование необходимо для повышения их конкурентоспособности по сравнению с высокопрочными сталями или Ni-сплавами. Одним из способов повышения характеристик титановых сплавов является их применение в качестве матрицы для создания композитов, которые обладают очень хорошими механическими свойствами, но издержки их производства довольно часто больше, чем у стандартных материалов. Однако стоит отметить, что при этом использование данных материалов в конструкциях самолетов (реактивный двигатель и фюзеляж) и применение в автомобильной промышленности растут быстрыми темпами.

В данной работе проводится исследование композита на основе титана, упрочненного собственным оксидом, полученного магнитно-импульсным прессованием (МИП) композиционных порошков двух типов. Первый — титановый шарообразный нанопорошок, полученный методом электрического взрыва проводников (ЭВП), где титановое ядро покрыто тонкой оксидной пленкой. Второй — механическая смесь порошков металлического титана и порошка TiO_2 . Механическая обработка проводилась в шаровой планетарной мельнице АГО-2С, где основной задачей было перемешивание исходных порошков, а не измельчение металлической составляющей смеси. В результате были получены три состава: металлическая титановая матрица и 5, 10 и 15 вес.% TiO_2 , соответственно.

В качестве импульсной обработки композитов проводилась всесторонняя динамическая пластичная деформация (ДПД) порошковых образцов, когда весь объем исходного компакта подвергался деформации в ходе нескольких «ударов». Для этого в разборную пресс-форму квадратного сечения (10×10 мм) засыпались 1.7 г порошка. Деформация проводилась в несколько этапов. Первый: МИП порошков до плотности порядка 50–55%. Второй и третий этап: спрессованный образец помещался в пресс-форму, ставясь на ребро, и сжимался до плотности $\sim 80 - 90\%$. Первые два этапа ДПД проводились исключительно при комнатной температуре, третий — при комнатной температуре и с нагревом до $400^\circ C$. Таким образом, суммарное количество воздействий на образец составляло 3 импульса давления.

По причинам самоизоляции при пандемии все работы по данной теме сдвинулись во времени, и данные по структурным исследованиям порошков и компактов, механическим свойствам компактов после ДПД находятся в работе и будут представлены в докладе на школьно-семинаре.

Работа выполнена в рамках темы государственного задания ИЭФ УрО РАН № 115031110089 и гранта РФФИ: № 20-08-00548 А.

ГЕНЕРИРОВАНИЕ СУБНАНОСЕКУНДНЫХ ИМПУЛЬСОВ МОЩНОСТЬЮ 54 ГВт ГИРОМАГНИТНЫМИ ЛИНИЯМИ

М.С. Педос*, С.Н. Рукин, С.П. Тимошенко, Е.А. Аличкин

Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: pedos_ms@mail.ru

Одним из перспективных направлений развития технологии импульсной энергетики является освоение пикосекундного диапазона длительности импульсов в сочетании с увеличением пиковой мощности от сотен МВт до единиц ГВт и более. Мощные пикосекундные генераторы востребованы в различных областях экспериментальной электрофизики. Схемотехническая идеология построения пикосекундных импульсных устройств основана на использовании принципа сжатия энергии импульса во времени. Наиболее перспективными, на наш взгляд, являются твердотельные генераторы с выходным полупроводниковым размыкающим переключателем, импульс которого дополнительно сжимается во времени и усиливается с помощью гиромагнитных нелинейных линий передачи (NLTL, от англ. Non-Linear Transmission Line — гиромагнитные нелинейные передающие линии). В работе использован подход, при котором длительность входного импульса близка по величине к периоду генерируемых линией колебаний. В таком подходе NLTL выступает не как генератор высокочастотных колебаний, а как волновой магнитный компрессор с усилением мощности, поскольку основная часть энергии входного импульса передается только в первый пик колебаний.

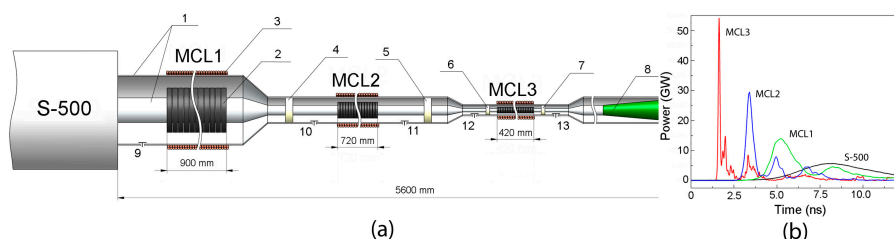


Рис. 1. Конструкция системы компрессии энергии импульса (а) и осциллограммы мощности импульсов после каскадов сжатия (б): 1 — электроды линии, 2 — ферритовые кольца, 3 — соленоид, 4–7 — изоляторы, 8 — резистивная нагрузка, 9–13 — емкостные делители для регистрации импульсов напряжения.

Конструкция системы компрессии энергии, а также осциллограммы импульсов мощности, иллюстрирующие процесс сжатия энергии в генераторе в целом при оптимальных параметрах линий, представлены на Рис. 1. Для того, чтобы акцентировать функциональную особенность работы линий, они обозначаются как MCL (от англ. Magnetic Compression Line — линия магнитной компрессии).

В настоящей работе исследовалась система компрессии, соответствующая Рис. 1. В экспериментах входной импульс напряжения формировался твердотельным генератором S-500 с полупроводниковым прерывателем тока. В линии третьей ступени сжатия были исследованы два варианта линий, различающихся диаметрами внешнего электрода — 50 и 38 мм. Установлено, что 38-мм линия производит более эффективное сжатие энергии импульса по сравнению с 50-мм линией: пиковая мощность 54 ГВт (1.6 МВ, 48 Ом) длительностью 170 пс в 38-мм линии и 45 ГВт (1.5 МВ) длительностью 250 пс в 50-мм линии.

При пиковой мощности входного импульса 6 ГВт (490 кВ, 40 Ом) длительностью ~ 7 нс на выходе трехкаскадного компрессора получена пиковая мощность 54 ГВт (1.62 МВ, 48 Ом) в субнаносекундном диапазоне длительности импульса (0.17 нс).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТОЙКОСТИ ИНДУКТОРА С ГРАДИЕНТНЫМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ СОПРОТИВЛЕНИЕМ ПРИ ГЕНЕРАЦИИ СИЛЬНЫХ ИМПУЛЬСНЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ

П.А. Русских*, Г.Ш. Болтачев, С.Н. Паранин

Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: russkikh_p@inbox.ru

При магнитно-импульсной обработке в сильных магнитных полях амплитудами 40-60 Тл с длительностями полуволны импульса 5-20 мкс рабочая поверхность индукторов подвергается большим термомеханическим напряжениям, вызванным джоулевым нагревом скин-слоя при протекании тока и его силовым взаимодействием с генерируемыми магнитными полями. В результате материал индуктора разрушается или за счет пластической деформации, или за счет формирования на рабочей поверхности трещин, перпендикулярных направлению тока. Одно из возможных решений проблемы представлено в работе [1], в которой без учёта тепловых эффектов показано, что в материале со спадающим вглубь сопротивлением можно существенно снизить нагрев благодаря тому, что токоведущий слой, тепловыделение и силовое действие оказываются на некоторой глубине от рабочей поверхности индуктора. Целью работы является исследование стойкости стали с градиентным сопротивлением, при воздействии сильного импульсного магнитного поля.

В работе моделируются электромагнитные, термоупругие и пластические процессы в материале с модифицированным поверхностным слоем в одномерной плоской геометрии на основе уравнений магнитной диффузии, теплопроводности, закона Гука и критерия текучести Мизеса. Внешнее магнитное поле задается в виде затухающей синусоиды. Рассчитывается эволюция возникающих в материале термомеханических напряжений и деформаций во время действия магнитного импульса и на последующей стадии релаксации до полного охлаждения. Начальное сопротивление задавалось близкой к форме ступеньки двухпараметрической функцией. Её параметрами были: отношение сопротивления поверхностного слоя к сопротивлению объёма материала $\rho^*/\rho_{\text{bulk}}$ и толщина модифицированного слоя x_c . Температурные зависимости сопротивления и предела прочности аппроксимировались линейными функциями. Коэффициент температурного расширения, удельная теплоёмкость и другие параметры предполагались постоянными. В расчёте $\rho^*/\rho_{\text{bulk}}$ и x_c не превышали 2.5 и 1.6 мм, соответственно. Поле B_{th} , которое приводит к росту остаточных пластических деформаций в последовательности идентичных, но разнесенных по времени, внешних импульсных воздействий, было выбрано пороговой характеристикой разрушения.

Результаты расчёта были верифицированы по экспериментальным данным для стали 30ХГСА с однородным сопротивлением: для импульса с длительностью полуволны 14 мкс пороговая амплитуда B_{th} составила около 50 Тл [2]. Моделирование показало, что при любом $\rho^*/\rho_{\text{bulk}}$ существует оптимальная толщина x_c , приводящая к наибольшему полю B_{th} , которая увеличивается с ростом $\rho^*/\rho_{\text{bulk}}$, но не превышает 0.5 мм. Лучший результат достигнут при параметрах $\rho^*/\rho_{\text{bulk}}$ и x_c равных 2.5 и 0.45 мм, соответственно. В этом случае B_{th} удается повысить с 47 до 56 Тл.

Работа выполнена при частичной поддержке проектов РФФИ №№ 19-08-00931, 20-21-00050 и 20-58-00029.

1. Г.А. Шнеерсон, Поля и переходные процессы в аппаратуре сверхсильных токов. — М.: Энергоиздат (1981).
2. A.V. Spirin, G.Sh. Boltachev, V.I. Krutikov *et al.*, AIP Conference Proceedings **2174**, 020163 (2019).

НАНОМАТЕРИАЛЫ

ВЛИЯНИЕ ГАДОЛИНИЯ НА СВОЙСТВА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Р.Г. Абасзаде^{1,2*}, О.А. Алиев¹, С.А. Мамедова¹¹Институт физики Национальной Академии Наук Азербайджана, Баку, Азербайджан²Азербайджанский Государственный Университет Нефти и Промышленности, Баку, Азербайджан*e-mail: abaszada@gmail.com

Углеродные нанотрубки отличаются от других структур своими механическими, электрическими, магнитными и оптическими свойствами [1,2]. Улучшение поглощения рентгеновских лучей одностенными углеродными нанотрубками (ОСНТ) посредством легирования гадолинием (Gd) изучалось [3]. В комбинационном рассеянии наблюдались одиночный и двойной резонансы и было введено шесть критериев для идентификации двойных резонансов [4]. Использование рамановской спектроскопии для выявления структуры и необычных электронных и фононных свойств одностенных углеродных нанотрубок (ОСНТ) подробно рассматривалось. В [5] были обобщены наиболее распространенные экспериментальные методы, используемые для исследования углеродных нанотрубок, и приведен обзор новых экспериментальных результатов для каждой из особенностей в спектрах комбинационного рассеяния первого и второго порядка для одностенных углеродных нанотрубок. Основные понятия и характеристики спектров комбинационного рассеяния углеродных нанотрубок (как изолированных, так и связанных), а также поляризационный анализ, спектроскопия комбинационного рассеяния на поверхности и дополнительные оптические методы, обсуждаемые с точки зрения их преимуществ и ограничений, представлены в [6].

Мы изучали влияния легирования редкоземельными металлами на свойства углеродных нанотрубок. Экспериментальные инструменты: рентгеновское излучение, комбинационное рассеяние, ИК-Фурье анализом. Обнаружили, что 15% легирование гадолинием сильно влияет на физические свойства углеродных нанотрубок, функционализированных карбоксильной группой.

1. M.J.O'Connell, Carbon nanotubes:properties and applications. CRC press, 360 p., (2018).
2. M.S.Dresselhaus, G.Dresselhaus, A.Jorio, Annual Review of Materials Research **34**, 247, (2004).
3. A.Narsito, I.Kartini, S.J. Santosa, IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. **107**, 012051 (2016).
4. Ch.Thomsen, S.Reich, J.Maultzsch, Phil. Trans. R. Soc. Lond. A **362**, 2337 (2004).
5. M.S.Dresselhaus, G.Dresselhaus, R.Saito, A.Jorio, Physics Reports **409**, 47, (2005).
6. A.Jorio, M.A.Pimenta, A.G.Souza Filho, R.Saito, G.Dresselhaus, M.S.Dresselhaus, New Journal of Physics **5**, 139 (2003).

ИССЛЕДОВАНИЕ МАЛОУГЛОВЫМ РЕНТГЕНОВСКИМ РАССЕЯНИЕМ РАСТВОРОВ НАНОЧАСТИЦ СИСТЕМЫ «ЯДРО-ОБОЛОЧКА»

С.В. Амарантов^{1*}, Я.И. Дериков²

¹Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва, Россия

²Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева, Москва, Россия

*e-mail: amarantov_s@mail.ru

В данной работе исследовались структурные характеристики раствора квантовых точек (КТ) CdSe/ZnS в толуоле (10% массовая концентрация, с max поглощения 520 нм) методом малоуглового рентгеновского рассеяния. КТ интересны своими оптическими свойствами, например, экситонным типом электронного возбуждения. Нами была измерена малоугловая кривая рассеяния от модуля вектора рассеяния q ($q = 4\pi \sin \theta / \lambda$, где θ — половина угла рассеяния, с длиной волны $\lambda = 0,144$ нм) от КТ и проведена обработка этой кривой тремя различными моделями: а) однородным эллипсоидом рис. 1а, набором однородных шаров различного радиуса рис. 1б [1] и системой «ядро-оболочка» рис. 1в, с отношением плотности ядра к плотности оболочки — как одного из параметров модели и внешним радиусом оболочки R_0 с дисперсией $\sigma(R_0)$. В таблице 1 приведены найденные параметры для этих трех моделей.

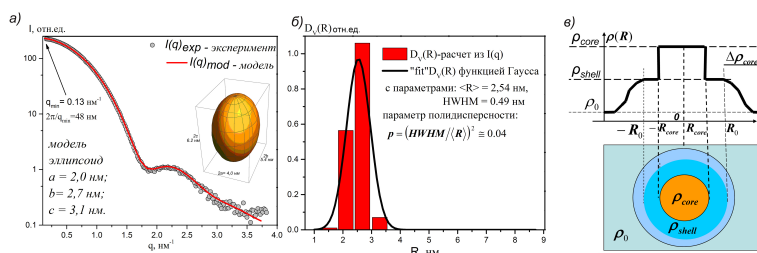


Рис. 1. Три различных варианта моделирования кривой рассеяния раствора КТ CdSe/ZnS. а) кривая интенсивности рассеяния в зависимости от модуля вектора рассеяния q , на вставке модель (I): однородного эллипсоида; б) модель (II): распределение однородных шаров по объемам $D_V(R)$; в) модель (III): «ядро-оболочка» с отношением $\eta = \rho_{\text{core}}/\rho_{\text{shell}}$ плотности ядра радиуса R_{core} к плотности оболочки радиуса R_0 с $\sigma(R_0)$.

Первые две модели рис. 1а,б являются моделями с однородной плотностью, а рис. 1в «ядро-оболочка», как модель с неоднородной плотностью внутри частицы, модель (II) показывает что раствор имеет высокую степень монодисперсности, что позволяет реконструировать форму частицы (I) или искать плотность внутри частицы сферической формы (III). Найденные численные значения параметров этих трех моделей представлены в таблице 1.

Таблица 1. Параметры моделей: эллипсоид, распределение шаров $D_V(R)$, «ядро-оболочка».

эллипсоид	$D_V(R)$		модель «ядро-оболочка»			
	Средний радиус	Парам. Полидисп.	Внешний радиус	дисперсия	толщина оболочки	Отношение плотности
(a, b, c) , нм	$\langle R \rangle$, нм	p	R_0 , нм	$\sigma(R_0)$, нм	ΔR , нм	$\eta = \rho_{\text{core}}/\rho_{\text{shell}}$
(2.0, 2.7, 3.1)	2.5	0.04	2.5	0.3	0.8	1,15

1. Свергун Д.И., Фейгин Л.А. Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние. М. Наука, 1986.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОКОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ АЛЮМИНИЯ

Д.К. Баранов^{1,2*}, И.А. Некрасов^{1,2}, И.В. Бекетов^{1,2}, А.А. Багазеев^{1,2}, А.И. Малкин¹, Н.С. Князев¹

¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

²Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: danil.baranov2013@yandex.ru

Одним из направлений изучения физических свойств наночастиц является исследование их взаимодействия с электромагнитным излучением: исследование прохождения, отражения и поглощения электромагнитной волны композитным материалом с наночастицами в зависимости от их размера, формы и т.д. Основными величинами, которые характеризуют электрофизические свойства таких композитов, являются комплексная диэлектрическая и магнитная проницаемости.

В данной работе будет представлено экспериментальное и теоретическое исследование электрофизических свойств композитов на основе алюминия с массовой долей наночастиц 5%, 10%, 20% и 40% при различных толщинах образцов в частотном диапазоне 8 – 12 ГГц. Для создания данных исследуемых композитов используется нанопорошок с диаметром частиц 75 нм, который получают методом электрического взрыва проволоки [1]. После чего этот нанопорошок размещен в эпоксидной смоле с ее дальнейшим отверждением.

Методом линии передачи с использованием векторного анализатора цепей [2] получены комплексные величины коэффициентов отражения от границы образца конечной толщины для случая прямоугольного волновода. На основе полученных экспериментальных данных вычислены диэлектрическая и магнитная проницаемости исследуемых нанокompозитов с использованием математического аппарата метода NRW (Nicolson–Ross–Weir) [3].

Выполнен расчет эффективной диэлектрической проницаемости немагнитного нанокompозита на основе алюминия в рамках обобщенного метода Бруггемана [4]. Далее были вычислены коэффициенты отражения для случая падения электромагнитной волны в прямоугольном волноводе на границу слоя конечной толщины [5].

В данной работе представлено исследование отражения и поглощения электромагнитных волн X-диапазона на немагнитных нанокompозитах на основе металлического алюминия. Показано, что для образцов с массовой долей наночастиц 5%, 10% и 20% обобщенный метод Бруггемана дает хорошее согласие диэлектрической проницаемости с экспериментом. Соответственно наблюдается хорошее согласие теоретического и экспериментального коэффициентов отражения.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ № 20-48-660044.

1. Yu. A. Kotov, *Nanotechnologies in Russia*, **4**, 415 (2009).
2. A. I. Malkin, N. S. Knyazev, *CEUR Workshop Proceedings*, **1814**, 45 (2017).
3. A.L. De Paula, M.C. Rezende, J.J. Barroso, *SBMO/IEEE MTT-S Int. Microw. Optoelectron. Conf.*, 488 (2011).
4. D.A.G. Bruggeman, *Ann. Phys.* **416**, 636 (1935).
5. Q. Chen *et al.*, *AIP Advances*, **9**, 015113 (2019).

Влияние избыточного кислорода на электрические свойства композитных тонких пленок Fe – ZrO₂

И.А. Анисимов, А.Л. Березутский*, В.А. Дыбов, А.Н. Смирнов, О.В. Стогней

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

*e-mail: a.l.berezutskii@yandex.ru

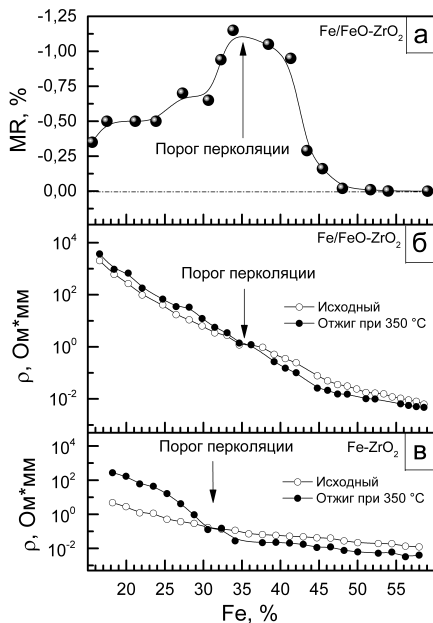


Рис. 1. Концентрационные зависимости: а — магнитосопротивления композитов Fe/FeO–ZrO₂; б — удельного сопротивления композитов Fe/FeO–ZrO₂; в — удельного сопротивления композитов Fe – ZrO₂

Магнитные свойства композитных структур практически не зависят от дополнительного окисления фазы железа. Доперколяционные композиты проявляют суперпарамагнитные свойства (отсутствие магнитного гистерезиса и насыщения в полях 10 кЭ). За порогом перколяции обе системы, как Fe – ZrO₂, так и Fe/FeO–ZrO₂, проявляют ферромагнитные свойства.

В системе Fe – ZrO₂ туннельный магниторезистивный эффект не обнаружен ни в одном образце. За порогом перколяции (при концентрации Fe более 56 ат.%) наблюдается анизотропное магнитосопротивление, что характерно для ферромагнитных нанокристаллических материалов. В системе Fe/FeO–ZrO₂ напротив, наблюдается отрицательное туннельное магнитосопротивление (см. рис. 1а) с максимумом на пороге перколяции. Предполагается, что причина такой разницы обусловлена матрицей из диоксида циркония. В системе Fe – ZrO₂ диоксид циркония нестехиометричен и содержит большое число кислородных вакансий. Вследствие этого основным механизмом электропереноса является «прыжковый» механизм, который не зависит от магнитного поля. Дополнительный кислород «заполняет» вакансии, поэтому в Fe/FeO–ZrO₂ основной механизм — туннельный.

Работа выполнена при поддержке гранта ФЗГМ-2020-0007.

Исследованы электрические и магнитные свойства тонких композитных пленок Fe – ZrO₂. Композитные пленки Fe – ZrO₂ (2 – 4 мкм) получены в широком интервале концентраций металлической фазы (13 – 62 ат. % Fe) методом ионно-лучевого распыления составных мишеней. Исследовано две системы: первая система напылена в среде чистого аргона, вторая — в смешанной газовой среде (Ar + O₂), при парциальном давлении кислорода 1.2·10⁻⁵ Торр. По данным рентгено-дифракционного анализа в первой системе присутствуют две фазы (кристаллическое наноструктурированное ОЦК–Fe и аморфный ZrO₂). Предполагается, что в этой системе формируется композитная структура Fe – ZrO₂. Во второй системе помимо ОЦК–Fe и аморфного ZrO₂ наблюдается фаза вюрцита (FeO). Предполагается, что введение кислорода привело к формированию оксидной оболочки на поверхности металлических (Fe) наногранул. Вторую систему можно рассматривать, как сложный композит Fe/FeO–ZrO₂.

Электрический порог перколяции определялся по сопоставлению концентрационных зависимостей сопротивления, измеренных в исходном состоянии и после отжига (рис. 1б, в). Установлено, что добавление кислорода (система Fe/FeO–ZrO₂) приводит к незначительному смещению порога перколяции на 4 ат. % (относительно системы Fe – ZrO₂), при этом удельное сопротивление в доперколяционной области возрастает более чем на два порядка.

ИЗУЧЕНИЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК, ПОЛУЧЕННЫХ ИЗ КОЛЛОИДНЫХ РАСТВОРОВ НАНОЧАСТИЦ СУЛЬФИДА СЕРЕБРА

Е.С. Воронцова^{1*}, Ю.В. Кузнецова², С.В. Ремпель^{1,2}

¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

²Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: e.s.vorontsova17@gmail.com

В настоящее время существует много способов создания веществ и материалов в нанокристаллическом состоянии. Особое внимание привлекают полупроводниковые сульфиды, включая Ag_2S . Сульфид серебра в наносостоянии представляет интерес благодаря возможности применения в оптоэлектронике, биологии и медицине [1]. В зависимости от способа синтеза меняется морфология тонких пленок, что приводит к изменениям оптических свойств Ag_2S .

В представленной работе наночастицы сульфида серебра в водном растворе синтезированы методом химической конденсации [2]. Для оценки влияния концентрации стабилизирующего агента в синтезе наночастиц Ag_2S , были использованы различные молярные соотношения (3-меркаптопропила) триметоксисилана (МПС) к Ag_2S . Также в эксперименте использованы молярные соотношения AgNO_3 : Na_2S : 1.25:0.625; 2.5:1.25; 5:2.5, чтобы оценить влияние концентрации прекурсоров в синтезе наночастиц Ag_2S (образцы Ag_2S -1, Ag_2S -2, Ag_2S -3). Для изучения размеров полученных наночастиц использовался метод динамического рассеяния света. Результат исследования представлен в табл. 1. На основе проведенных исследований был сделан вывод о том, что для получения стабилизированных наночастиц без образования агломератов соотношение молярных концентраций AgNO_3 : Na_2S должно быть в диапазоне 1,25 : 2,52,5 : 5 при отношении МПС к Ag_2S как 0.25:1.

Таблица 1. Гидродинамический радиус и дзета-потенциал наночастиц Ag_2S .

Образец	Гидродинамический радиус наночастиц после синтеза, нм	Гидродинамический радиус наночастиц через неделю после синтеза, нм	Дзета-потенциал ζ , мВ
Ag_2S -1	2211±938	—	15±6
Ag_2S -2	66±24	44±15	29±8
Ag_2S -3	56±19	34±14	30±7

Тонкие плёнки сульфида серебра получены из синтезированных коллоидных растворов несколькими способами. Образцы тонких пленок изучены с помощью оптической микроскопии и методом атомно-силовой микроскопии с помощью научного технического комплекса NTEGRA Prima II. При изменении молярных отношений МПС к Ag_2S и молярных отношений прекурсоров наблюдалось изменение морфологии частиц на поверхности подложки. При исследовании пленок обнаружена самоорганизация в виде колец и полуколец диаметром от 0.5 мкм до 15 мкм.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда [проект №. 19-73-20012].

1. S. V. Rempel, N. N. Aleksandrova, Yu. V. Kuznetsova, E. Yu. Gerasimov. Inorganic Materials **52**, 101 (2016).
2. Y. V. Kuznetsova, S. V. Rempel, I. D. Popov, E. Y. Gerasimov, A. A. Rempel. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects **520**, 369 (2017).

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И СТРУКТУРА $\text{Er}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$

И.П. Дмитренко^{1*}, К.Г. Абдулвахидов², М.А. Сирота³, И.В. Мардасова³, М.А. Витченко³

¹Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

²Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов, Ростов-на-Дону, Россия

³Донской государственной технический университет, Ростов-на-Дону, Россия

*e-mail: vanekdmitrenko@gmail.com

Как известно, физические свойства редкоземельных составов со структурой гранатов, $R_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$, R — редкоземельный элемент, могут быть изменены различными методами синтеза [1] или замещением катиона редкоземельного металла трехвалентными катионами, что делает данные материалы привлекательными для использования в качестве устройств хранения данных и волноводов в высокочастотных технологиях.

Целью данной работы явилось получение твердофазным методом синтеза состава $\text{Er}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ (ErIG) из порошков Er_2O_3 и Fe_2O_3 и изучение влияния силовых механических воздействий (механоактивации) на физические свойства и структуру ErIG.

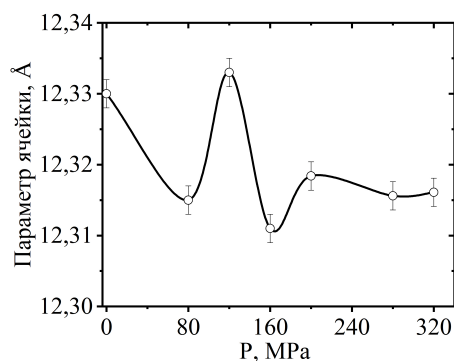


Рис. 1. Зависимость параметра ячейки синтезированных порошков $\text{Er}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ от давления механической активации.

Структура синтезированных и механоактивированных образцов ErIG была изучена с помощью метода рентгеновской дифракции при комнатной температуре. $\text{Er}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ характеризуется кубической симметрией $Ia\bar{3}d$ с параметром ячейки $a = 12.33 \text{ \AA}$. Обнаружено, что с ростом давления механической активации параметр ячейки меняется немонотонно вследствие незавершенности генерации дислокаций (см. рис. 1).

Изучены оптические и рентгеновские спектры поглощения, магнитные свойства состава $\text{Er}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ при комнатной температуре и давлениях от 80 до 320 МПа, а также температурная зависимость диэлектрических свойств. Диэлектрические спектры образцов имеют размытый характер и релаксорное поведение. На температурной зависимости диэлектрической проницаемости в окрестности $T = 212^\circ\text{C}$ обнаружена аномалия, которая наблюдается только при нагревании образцов. Природу этой аномалии можно объяснить термическим обеднением примесных энергетических уровней.

Установлено, что в интервалах давлений 80–200 МПа в процессе механоактивации порошка ErIG между наковальнями Бриджмена развиваются рекристаллизационные процессы.

1. M. Ristić, S. Popović, I. Czako-Nagy and S. Music, Croat. Chem. Acta, **67**, 315 (1994).

НАНОМАТЕРИАЛЫ ДЛЯ АНОДОВ ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

Н.В. Чиркунова^{1,2}, Е. Подлеснов², А.В. Сауц^{2,3}, М.В. Дорогов^{1,2*}¹Тольяттинский государственный университет, Тольятти, Россия²Университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия³Санкт-Петербургский университет технологий управления и экономики, Санкт-Петербург, Россия*e-mail: maxim@tltu.ru

Наноматериалы широко используются в промышленности с конца XX в. Показано, что наночастицы и нановискеры металлов и их оксидов перспективны для применения в катализе, фотокатализе [1], солнечных панелях [2], литиевых аккумуляторах [3] и т.д.

Одномерные (1D) наноструктуры вызывают значительный интерес в качестве анодного материала для литий-ионных батарей. Использование структур из активных материалов с высоким аспектным соотношением сторон (длины к диаметру) улучшает механическую стабильность, кинетику электрохимических реакций и перенос заряда в материале электрода [4]. Такие структуры выдерживают большие изменения объема во время цикла и обеспечивают легкий перенос электронов на всех этапах работы от батареи. В докладе представляются методы создания одномерных наноструктур с использованием нановискеров (нитевидных нанокристаллов — ННК) оксида меди и нанолент (НЛ) олова.

Для получения ННК CuO использовали электроосаждение меди и последующее термическое окисление. Детальное исследование структуры ННК было выполнено с помощью просвечивающей микроскопии высокого разрешения [5]. Показано, что формированию ННК способствуют такие факторы, как внутренние механические напряжения, дефектная структура и пористые каналы в объеме электроосажденных покрытий.

Оловянные НЛ также были изготовлены методом электроосаждения. Их структура была проанализирована с помощью электронной микроскопии и предложен возможный механизм образования НЛ. Установлено влияние внутренних напряжений на процесс роста НЛ.

Проведены электрохимические испытания анодов на основе ННК оксида меди, а также НЛ олова с различными связующими. Фазовый состав и морфологические изменения во время циклирования были изучены с помощью электронной микроскопии и дифракции рентгеновских лучей, а также моделировались на основе подхода механики сплошных сред.

Кроме того, было продемонстрировано, что ННК CuO обладают хорошими сорбционными и фотокаталитическими способностями, что позволяет применять их в химической промышленности.

Работа поддержана Российским научным фондом (грант № 19-72-10112).

1. Y.C. Zhang, L. Yao, G. Zhang, D.D. Dionysiou, J. Li, X. Du, *Applied Catalysis B: Environmental*, **144**, 730 (2014).
2. Q. Zhang, K. Zhang, D. Xu, G. Yang, H. Huang, F. Nie, C. Liu, S. Yang, *Progress in Materials Science*, **60**, 208 (2014).
3. M.G. Masteghin, R.C. Bertinotti, M.O. Orlandi, *Materials Characterization*, **142**, 289 (2018).
4. P. Hu, M. Dorogov, Y. Xin, K.E. Aifanti, *ChemElectroChem*, **6**, 3139 (2019).
5. M. Dorogov *et al.*, *Materials Science and Technology*, **34**, 2126 (2018).

ПРИМЕСНЫЕ Mn^{2+} ДЕФЕКТЫ В ОПТИЧЕСКОЙ НАНОКЕРАМИКЕ $MgAl_2O_4$

В.А. Дутов^{1*}, А.Н. Киряков¹, А.Ф. Зацепин¹, А.В. Фокин¹, Т.В. Дьячкова², А.П. Тютюнник²,
Ю.Г. Зайнулин²

¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

²Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: silver.beats@inbox.ru

Алюмомагниева шпинель ($MgAl_2O_4$) с введенным в структуру примесным марганцем, является перспективным люминофором с эффективной люминесценцией в красной (1.9 эВ) и зеленой (2.4 эВ) спектральных областях. Локализация примесного марганца в разных структурных позициях приводит к изменениям в энергетической структуре примесных центров за счет усиления или ослабления силы кристаллического поля. Кроме того, положение энергетических уровней марганцевых центров также зависит от его электронной конфигурации. Нанокристаллиты алюмомагниева шпинели характеризуются повышенной внутренней энергией и сильным катионным перемешиванием (ионы алюминия в позициях магния и наоборот), что обеспечивает метастабильные марганцевые дефекты, не свойственные монокристаллическому состоянию. Характер влияния кристаллического поля, валентного состояния и пониженной размерности кристаллитов на примесный ион марганца отражается в спектрально-люминесцентных свойствах, и может быть оценен путем анализа спектроскопических параметров марганцевых центров. Таким образом, цель данной работы заключается в комплексном анализе структурных, спектрально-люминесцентных и парамагнитных свойств прозрачных нанокристаллических керамик алюмомагниева шпинели.

Оптические нанокерамики $Mg_{1-x}Al_2O_4:Mn_x$ ($x = 0.005; 0.00005$) получены в результате термобарического синтеза. Изучение структурных свойств выполнено с помощью метода РФА. Оптическая спектроскопия выполнена с применением методик измерения оптического поглощения, фотолюминесценции, измерения спектров возбуждения и измерения кинетики фотолюминесценции. Анализ парамагнитных свойств осуществлялся с помощью спектроскопии электронного парамагнитного резонанса.

Данные РФА свидетельствуют о том, что 100% фазы исследуемых нанокерамик — $MgAl_2O_4$, пространственная группа $Fd\bar{3}m$. Наблюдаемое уширение пиков на дифрактограммах связано с низкой размерностью кристаллитов и присутствием микронапряжений. Керамики оптически прозрачные — прозрачность $\sim 60\%$.

Анализ оптического поглощения показывает в керамике повышенную концентрацию F и F+ центров, обуславливающих поглощение в УФ области спектра. Вместе с тем, формируются полосы поглощения, характерные для марганцевых дефектов, локализованных в октаэдрических позициях. С ростом давления при синтезе прозрачность нанокерамик в УФ диапазоне спектра растет за счет снижения концентрации F и F+ центров, являющихся компенсаторами анти-сайт дефектов матрицы.

В спектрах фотолюминесценции нанокерамик, легированных марганцем, регистрируется свечение как в зеленом (2.4 эВ), так и в красном (1.9 эВ) спектральных диапазонах, что обусловлено перераспределением марганца по структурно-неэквивалентным октаэдрическим и тетраэдрическим узлам решетки. Кроме того, наблюдается перераспределение интенсивности свечения красной и зеленой полосы, обусловленное приложенным давлением при синтезе. Спектры возбуждения красной люминесценции нехарактерны для марганца в двухвалентном состоянии.

ЭПР спектроскопия оптических нанокерамик свидетельствует о присутствии марганца в двухвалентном состоянии. Обнаружено, что режимы синтеза влияют на переход марганца из парамагнитного в диамагнитное состояние, что сопровождается формированием красной полосы в спектрах ФЛ, и свидетельствует о свечении марганца в трехвалентном состоянии.

СТРУКТУРА НАНОКРИСТАЛЛОВ ТЕНОРИТА ПО ДАННЫМ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

А.Е. Калмыков^{1*}, А.В. Мясоедов¹, Л.М. Сорокин¹, М.В. Дорогов²¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия²Университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия*e-mail: akalm@mail.ioffe.ru

Нитевидные нанокристаллы (ННК) представляют собой кристаллы с высоким аспектным отношением: их диаметр не превышает 100 нм, а длина может достигать сотни микрон [1]. Интерес к ним обусловлен тем, что они являются одними из самых перспективных материалов для наноэлектроники и нанофотоники.

Среди полупроводниковых ННК выделяются ННК тенорита (CuO), так как они являются узкозонными полупроводниками p-типа (ширина запрещенной зоны — 1.2 эВ) и их применение возможно в качестве газовых сенсоров [2], полевых эмиттеров [3], при фотокатализе в видимом диапазоне излучения [4].

Термическое окисление является наиболее широко распространенным методом получения ННК тенорита благодаря невысокой стоимости. Вопрос о кристаллической структуре ННК CuO, полученных термическим окислением, и механизме их роста на сегодняшний день остается открытым [5]. Для катализа и фотокатализа большое значение имеют структура и морфология поверхности катализатора, так как каталитическая активность различных граней может отличаться в сотни раз. Таким образом, цель данной работы — детальное исследование структуры и морфологии ННК CuO методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), полученных термическим окислением медных покрытий. Исследование структуры ННК позволит целенаправленно управлять морфологией CuO ННК путем регулировки параметров синтеза.

В качестве объекта исследования были выбраны ННК тенорита, синтезированные в процессе отжига медных покрытий сеток из нержавеющей стали на воздухе в интервале температур 250–500°С. Впервые для ПЭМ исследования были приготовлены поперечные сечения ННК CuO, что позволило выявить целый ряд их структурных особенностей.

Установлено, что ННК могут представлять собой не только бикристаллы, но и мультикристаллы, состоящие из нескольких нанокристаллов с границей раздела параллельной направлению роста. Граница между составными частями ННК может быть плоскостью двойникования, может не совпадать с ней и представлять собой некогерентную границу. Возникновение некогерентных границ связывается с явлением повторного двойникования, когда вторая составляющая бикристалла является результатом двойникования первой составляющей сперва по плоскости (11-1), затем по плоскости (001).

Установлены ориентационные соотношения между составными частями ННК, плоскости их сопряжения. Направлением роста ННК является направление [1-10].

Поверхность ННК не состоит из явно выраженных граней, тем не менее, можно утверждать, что элементами огранки являются плоскости, содержащие направление [1-10], такие, как (001), (110), (11 – 1), (11 – 2).

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ 19-29-12041 мк. ПЭМ-исследования проводились с использованием оборудования ЦКП "Материаловедение и диагностика в передовых технологиях" (ФТИ им. А.Ф. Иоффе), поддерживаемого Минобрнауки России (уникальный идентификатор проекта RFMEFI62117X0018).

1. V.G. Dubrovskii, N.V. Sibirev, J.C. Harmand, F. Glas. *Phys. Rev. B* **78**, 235 (2008).
2. Hyo-Joong Kim, Jong-Heun Lee, *Sensors and Actuators B* **192**, 607 (2014).
3. L. Feng *et al.*, *AIP ADVANCES* **8**, 045109 (2018).
4. A.Yu. Kozlov *et al.*, *Nano Hybrids and Composites*, **13**, 183 (2017).
5. Lijun Xiang *et al.*, *J. Mater. Res.* **33**, 2264 (2018).

ВЛИЯНИЕ СОСТАВА АМОРФНЫХ СПЛАВОВ НА КОРРОЗИЮ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ ХЛОРИДА НАТРИЯ

Э.А. Карфидов^{1,2*}, Б.А. Русанов³, Е.В. Никитина^{1,2}, В.Е. Сидоров³, П. Швец⁴, Д. Яничкович⁴

¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

²Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

³Уральский государственный педагогический университет, Екатеринбург, Россия

⁴Институт Физики Словацкой академии наук, Братислава, Словакия

*e-mail: karfused@mail.ru

Одним из способов снижения коррозионных потерь является нанесение защитного слоя, что благодаря своим отличительным физико-химическим свойствам значительно увеличивает коррозионную износостойкость оборудования. Подобным перспективным кандидатом для антикоррозионного покрытия может служить аморфный сплав на основе алюминия, содержащий в своем составе редкоземельные металлы (неодим, гадолиний и иттербий) [1,2].

В данной работе исследовали коррозионное поведение сплава $Al_{86}-Co_x-Ni_y-PZM_6$ ($PZM_6 = Nd, Gd, Yb$; $x = 2, 4$; $y = 4, 6$) в водном растворе NaCl (5 мас. %) при 20°C на протяжении 1500 часов. Для большей достоверности получаемых данных выдержку проводили в параллели по три образца каждого сплава. Массовый и глубинный показатели скорости коррозии по данным гравиметрического анализа, а также микрофотографии поверхности сплавов после экспериментов, полученные с помощью микроскопа TESCAN MIRA 3 LMU, представлены в табл. 1 и на рис. 1, соответственно.

Таблица 1. Значения скоростей коррозии для сплавов $Al_{86}-Co_x-Ni_y-PZM_6$ в 5% мас. NaCl.

Сплав	Скорость коррозии, мг/м ² ч	Глубинный показатель коррозии, мм/год
$Al_{86}Ni_6Co_2Nd_6$	$2,100 \pm 0,100$	$0,0065 \pm 0,0003$
$Al_{86}Ni_4Co_4Nd_6$	$0,635 \pm 0,031$	$0,0021 \pm 0,0001$
$Al_{86}Ni_6Co_2Yb_6$	$1,833 \pm 0,092$	$0,0059 \pm 0,0003$
$Al_{86}Ni_4Co_4Yb_6$	$0,435 \pm 0,022$	$0,0014 \pm 0,0001$
$Al_{86}Ni_6Co_2Gd_6$	$5,214 \pm 0,250$	$0,0162 \pm 0,0008$
$Al_{86}Ni_4Co_4Gd_6$	$0,601 \pm 0,030$	$0,0019 \pm 0,0001$

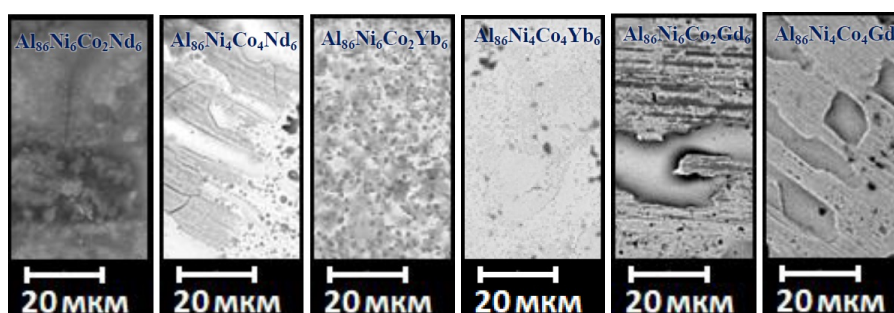


Рис. 1. Микрофотографии поверхности сплавов $Al_{86}-Co_x-Ni_y-PZM_6$ после длительного взаимодействия с водным раствором хлорида натрия

Наиболее коррозионностойкими оказались сплавы структуры $Al_{86}-Co_4-Ni_4-PZM_6$ с повышенным содержанием кобальта. Наиболее устойчив сплав $Al_{86}Ni_4Co_4Yb_6$, (0,0014 мм/год), что позволяет его отнести к весьма стойким согласно ГОСТ 13819-68.

Работа выполнена при частичной поддержке проекта РФФИ № 20-32-80001.

1. N.R. Tailleart *et al.*, Journal Corrosion Science **59** (2012).

2. L.M. Zhang *et al.*, Journal of Materials Science & Technology **35**, 7 (2019).

ОСОБЕННОСТИ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПЛЕНОК FeAl

А.С. Комлев^{1*}, Н.С. Перов¹, Т. Strusch², А.С. Semisalova²¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия²Institute of Ion Beam Physics and Materials Research, Dresden, Germany*e-mail: alkomlev98@yandex.ru

Тонкие магнитные пленки являются активно изучаемыми объектами в области магнетизма уже несколько десятков лет. Тонкие магнитные пленки могут быть эффективно использованы в датчиках, исполнительных механизмах, солнечных элементах, тонкопленочных электростатических устройствах, пористых нанокompозитных пленках и т.д. Одним из новых перспективных направлений в этой сфере являются исследования наноструктурированных пленок. Наличие размерных эффектов позволяет управлять магнитными свойствами таких объектов при помощи изменения структуры на этапе их создания. Нами были исследованы особенности свойств наноструктурированных пленок на основе сплава Fe-Al, который представляет интерес из-за его низкой стоимости, высокотемпературных структурных и привлекательных магнитных свойств [1].

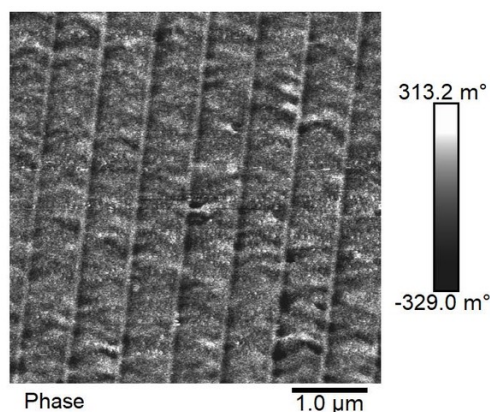


Рис. 1. Изображение поверхности образца, полученное с помощью магнитосиловой микроскопии

Исследуемый объект — тонкая пленка FeAl, толщина которой 50 нм. В изначальном виде это соединение находилось в парамагнитном состоянии. Наноструктуризация данного образца производилась путем разупорядочения структуры при помощи ионного пучка. В результате ионной имплантации была сформирована периодическая структура из дорожек шириной 500 нм, расстояние между которыми 100 нм. На рис. 1 представлено изображение, полученное при помощи магнитосиловой микроскопии, на которой видны кластеризованные магнитоупорядоченные (ферромагнитные) частицы внутри разупорядоченных областей. Такая структуризация образца привела к появлению магнитостатически взаимодействующих областей, которые определяют не только статические, но и динамические свойства образца

в целом.

Исследования магнитных свойств были проведены при помощи вибрационного магнитометра VSM LakeShore 7404. Были измерены петли гистерезиса при различных температурах в трех взаимоперпендикулярных положениях образца относительно внешнего магнитного поля и FORC (First order reversal curve) кривые. Полученные данные были обработаны в программе FORCinel [2]. С помощью FORC анализа произведена оценка магнитостатических взаимодействий и выявлено распределение сформированных наночастиц по коэрцитивности в рассматриваемом образце. Анализ низкотемпературных измерений и FORC диаграмм позволил количественно оценить долю суперпарамагнитных частиц в объекте, которая существенно влияет на магнитный отклик системы.

Комлев А.С. является стипендиатом Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

1. R. Brajpuria, S. Rajan, S. Jani, A. Vyas, *Surface and Interface Analysis* **51**, 371 (2019).
2. R. Harrison, J. Feinberg, *Geochem. Geophys. Geosyst.* **9**, Q05016 (2008).

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ И КИНЕТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ТЕЛЛУРА В СРЕДЕ ВОДОРОДА И ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ (He, Ar)

А.О. Кузьмин^{1*}, М.Р. Рабаданов², И.М. Шапиев², А.М. Исмаилов²

¹Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия

²Дагестанский Государственный Университет, Махачкала, Россия

*e-mail: kuzmin@catalysis.ru

Известно, что осаждение теллура из паровой фазы с целью получения кристаллических структур требует наличия газа носителя, при этом в присутствии H_2 происходит образование эпитаксиальных плёнок с высоким структурным совершенством [1], а также нитевидных кристаллов (НК) с чётко выраженной гексагональной структурой. В то же время осаждение в среде Ar приводит к образованию кристаллических структур, состоящих из нанотрубок и стержней [2]. Высказано предположение [1] о существенном вкладе атомарных форм теллура (Te и H_2Te), образующихся в среде H_2 , на качество образующихся структур, так как паровая фаза над чистым теллуром состоит в основном из молекул Te_2 .

В работе выполнен термодинамический анализ системы Te– H_2 . Показано, что наличие H_2 не приводит к дополнительному смещению равновесия в сторону образования атомарного теллура, паровая фаза состоит в основном из молекул Te_2 с небольшим количеством H_2Te и Te. Построена неравновесная стационарная модель, описывающая особенности транспорта теллура. Показано, что учёт образования H_2Te и транспорта H_2Te и Te из горячей в холодную зону не приводит к существенному увеличению количества осаждаемого атомарного теллура.

Методом растровой электронной микроскопии, при осаждении Te из паровой фазы в атмосфере водорода, гелия и аргона, подтверждена гипотеза о влиянии инертной газовой среды на структуру и морфологию (рис. 1) осаждаемых плёнок и НК теллура. Наличие газа с высоким значением теплопроводности приводит к термализации паров теллура, уменьшению и приближению его температуры к температуре точки роста кристаллов вблизи зоны осаждения, а также к более медленному транспорту паров теллура. Это способствует к приближению к равновесному процессу, аналогично процессам осаждения с малыми пресыщениями. Выявлена схожесть процессов в водороде и гелии, как наиболее близких по значениям теплопроводности. Определены оптимальные диапазоны технологических параметров процесса осаждения теллура из паровой фазы для получения пленок и НК Te с высоким структурным совершенством.

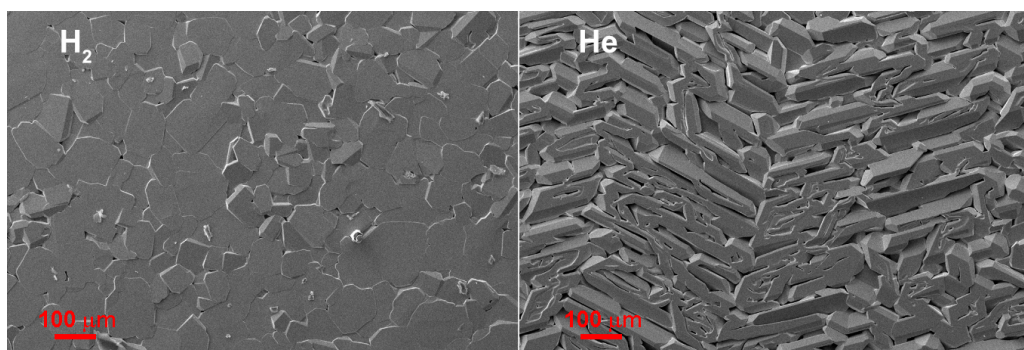


Рис. 1. Морфология поверхности пленок теллура, осаждённого в среде H_2 и He при давлении 1 атм.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ № 18-02-00808А.

1. А.М. Ismailov и др., Tech. Phys. Lett. **41**, 83 (2015).
2. С.С. Hawley *et al.*, Cryst. Growth Des. **12**, 2789 (2012).

ГАЗОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК Cr_2O_3

Б.О. Кушнарёв*, А.В. Алмаев

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

*e-mail: kuschnaryow@mail.ru

Сенсоры на основе металлооксидных полупроводников с n -типом проводимости отличаются чувствительностью к низким концентрациям токсичных и взрывоопасных газов, но характеризуются относительно высокими рабочими температурами 473 – 723 К, что приводит к высокому потреблению энергии. Одним из способов понижения потребляемой сенсорами энергии является выбор в качестве материалов для чувствительного элемента металлооксидных полупроводников p -типа проводимости, к которым относится Cr_2O_3 .

Тонкие пленки Cr_2O_3 , толщиной 150 нм, были получены методом ВЧ магнетронного напыления на сапфировую подложку с последующим отжигом в атмосфере воздуха при $T = 673$ К в течение 3 ч. Поверхность пленок представлена зернами с размером 40 – 70 нм. При помощи рентгеноструктурного анализа, оптической и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопий установлено, что полученные пленки являются поликристаллическими и соответствуют Cr_2O_3 . На рис. 1. показаны временные зависимости сопротивления пленок Cr_2O_3 R при воздействии 1000 ppm H_2 и 100 ppm NO_2 . Подача H_2 , восстановительного газа, приводит к возрастанию R . После воздействия H_2 в диапазоне температур $T = 303 - 473$ К R восстанавливается до начального уровня R_0 в атмосфере сухого чистого воздуха. При подаче NO_2 , окислительного газа, R обратимо уменьшается. Такое поведение R при воздействии газов характерно для металлооксидов p -типа проводимости. После подачи NO_2 , R при $T = 303 - 473$ К не восстанавливается до R_0 за счет высокой энергии связи молекул NO_2 с поверхностью Cr_2O_3 . При увеличении времени воздействия газов на образцы, R выходит на насыщение. За отклики на H_2 и NO_2 принимали отношения $[(R_{\text{H}_2} - R_0)/R_0] \cdot 100\%$ и $[(R_0 - R_{\text{NO}_2})/R_0] \cdot 100\%$, где R_{H_2} и R_{NO_2} — сопротивления пленок Cr_2O_3 при воздействии H_2 и NO_2 , соответственно. Значения откликов при $T = 473$ К составляют 52,8% на воздействие 1000 ppm H_2 и 58,8% на 100 ppm NO_2 . При этих же T и концентрации газов времена отклика составляли 37 с для H_2 и 138 с для NO_2 . С повышением T отклик пленок Cr_2O_3 на оба газа возрастал монотонно. Кроме этого, образцы демонстрировали сравнимую с воздействием H_2 чувствительность к воздействию парами ацетона и толуола при тех же рабочих температурах.

Объяснение полученных результатов затрудняется отсутствием моделей сенсорного эффекта для металлооксидных полупроводников p -типа проводимости с малым размером зерен. В атмосфере воздуха на поверхности Cr_2O_3 хемосорбируются молекулы O_2 , которые захватывают электроны из зоны проводимости полупроводника и формируют в его приповерхностной области слой, обогащенный основными носителями заряда. При появлении молекул H_2 и NO_2 происходит их взаимодействие с ранее хемосорбированными молекулами O_2 , обуславливающие изменения размеров обогащенной области и сопротивления образца. Для развития моделей сенсорного эффекта необходимы дальнейшие исследования.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (проект № 20-79-10043).

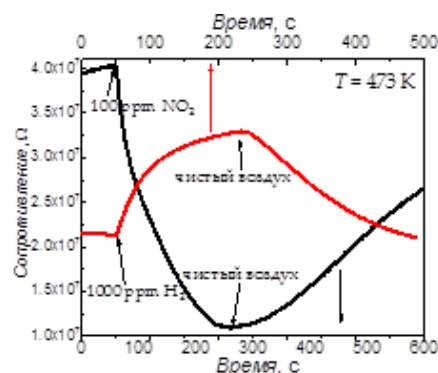


Рис. 1. Временные зависимости сопротивления тонких пленок Cr_2O_3 , при воздействии H_2 и NO_2

СИНТЕЗ ФУНКЦИОНАЛЬНОГО ИНТЕРМЕТАЛЛИДА PtAl₂ МЕТОДОМ РАЗМОЛА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ПОРОШКОВ В ШАРОВОЙ МЕЛЬНИЦЕ

А.А. Ливинец^{1,2*}, К.А. Козлов², П.С. Кошевой^{1,2}, А.Ю. Волков²

¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

²Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: belkich513@gmail.com

Надежно установлено, что интерметаллическое соединение платины с алюминием PtAl₂ может длительное время выдерживать высокую температуру, благодаря чему является прекрасным защитным покрытием рабочих лопаток турбин авиационных газотурбинных двигателей [1]. Это открывает широкие возможности для практического использования данного интерметаллида. Однако, в нашей стране это соединение не применяется, поскольку способ его получения неизвестен. Целью данной работы является изучение формирования интерметаллида PtAl₂ в процессе размолта элементарных порошков в шаровой мельнице.

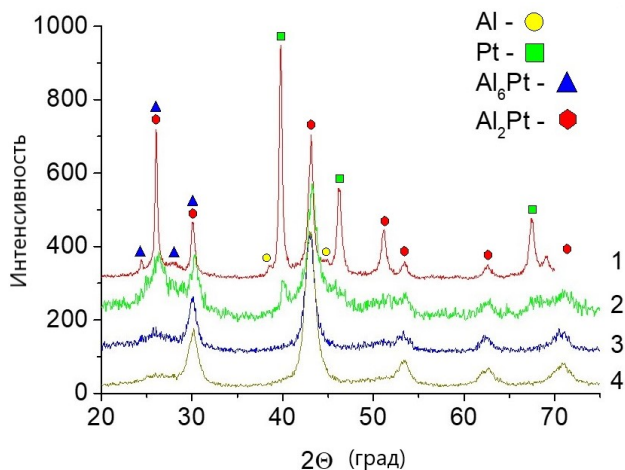


Рис. 1. Дифрактограммы образцов, которые были синтезированы из смеси №1 за 1 час (1), 2 часа (2), 4 часа (3) и 8 часов (4) помола.

Исходными материалами являлись порошки Pt и Al в виде крупных опилок (размером около 250 мкм), а также нанопорошок Pt с размером частиц ~40 нм. Были подготовлены две исходные смеси: первая была получена путем смешивания только крупнозернистых порошков Pt и Al, вторая смесь состояла из крупнозернистого Al-порошка и наноразмерного Pt-порошка. Во всех смесях содержание порошков платины и алюминия соответствовало стехиометрическому соотношению (Al:Pt = 2:1). Помол проводился в шаровой планетарной мельнице Pulverisette-7 в защитной среде гептана. Забор синтезированных порошковых смесей происходил по 0,5 г после 1, 2, 4 и 8 часов помола. Исследование проводилось методом рентгеноструктурного анализа на дифрактометре DMAX Rigaku 2200. Изучение микроструктуры порошков проводилось на сканирующем микроскопе QUANTA 200.

Установлено, что использование метода размолта элементарных порошков в шаровой мельнице приводит к получению достаточно чистого порошка искомого интерметаллида PtAl₂ (рис. 1). Показано, что через 1 час помола в полученном порошке обнаружено некоторое количество алюминия, платины и интерметаллида PtAl₆. Интерметаллид PtAl₂ полностью формируется за 4 часа синтеза, при этом зафиксировано появление аморфной структуры. Использование в смеси нанопорошка платины приводит к значительному ускорению процесса. Также проводились эксперименты по синтезу интерметаллида PtAl₂ методом кручения под высоким давлением порошков алюминия и платины, но в этом случае не удалось добиться гомогенности фазового состава.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Давление» № АААА-А18-118020190104 - 3.

1. I. Gurappa, Materials Science and Engineering A **356**, 372 (2003).

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА V_2O_5 , ЛЕГИРОВАННОГО МоТ.С. Лосев^{1*}, Д.В. Бухвалов^{1,2}, А. Кханна³, И.С. Жидков¹, Э.З. Курмаев^{1,4}.¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия²Колледж наук, Институт физики и химии материалов, Лесотехнический университет Нанкина, Нанкин, Китай³Лаборатория физики сенсоров и стекл, Департамент физики, Университет Гуру Нанака Дэва, Пенджаб, Индия⁴Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*e-mail: tslosev@urfu.ru

Оксиды переходных металлов являются перспективными материалами для использования в качестве катодов литий-ионных аккумуляторов благодаря большой площади поверхности и размерному эффекту. Оксид V_2O_5 с орторомбической слоистой структурой обладает высокой электрохимической активностью, большой работой выхода, высокой теоретической плотностью энергии и высокой структурной стабильностью при внедрении ионов Li^+/K^+ . Недавно Mjeji и др. установили, что добавление Мо еще больше повышает стабильность катодов из V_2O_5 [1]. Таким образом, целью нашей работы стало экспериментальное и теоретическое исследование электронной структуры тонких пленок $V_2O_5:Mo$ для объяснения их свойств.

Образцы кристаллических тонких пленок $V_2O_5:Mo$ получены методом термического испарения. Поверхностный состав и электронная структура определены из анализа рентгеновского фотоэлектронного спектра (РФЭС) образцов. РФЭС спектр атомов примеси Мо практически полностью совпадает со спектром оксида MoO_3 , следовательно, атомы Мо в тонких пленках V_2O_5 шестивалентны. Из РФЭС спектра полосы $V 2p$ следует присутствие не только ионов V^{5+} , но и V^{4+} , что согласуется с результатами [2]. Соотношение $V^{5+}:V^{4+}$ составляет 5.9:1. Ионы со степенью окисления 4+ образуют новые разрешенные электронные состояния в запрещенной зоне. Ионы примеси Мо имеют степень окисления 6+, поэтому можно предположить, что каждый атом Мо при внедрении в кристаллическую решетку уменьшает заряд 6 ионов V^{5+} на единицу для обеспечения зарядовой нейтральности, что и приводит к образованию V^{4+} . Установлено, что с учетом соотношения $V^{5+}:V^{4+}$ отношение $V:Mo$ составляет 36:1 и концентрация Мо в V_2O_5 равна 0.4%. При этом большая часть Мо существует в составе MoO_3 . Стоит отметить, что по данным РФЭС в образцах отсутствовала фаза VO_2 . Также расчеты показали, что энтальпия внедрения иона Li в катод составляет -4.34 и -6.52 эВ для катодов с примесью Мо и без, соответственно.

Таким образом, в нашей работе мы показали, что присутствие шестивалентных ионов Мо приводит к образованию ионов V^{4+} и появлению новых электронных состояний в запрещенной зоне. Образование новых электронных состояний облегчает перемещение электронов в твердом теле, что повышает проводимость катодов из V_2O_5 . Стабильность работы аккумуляторов увеличивается за счет снижения энергии включения одного атома лития в катод по сравнению с катодами из V_2O_5 без примеси.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента России № МК-989.2020.2.

1. I. Mjeji, M. Gaudon, A. Rougier, Sol. Energy Mater Sol. Cells **198**, 19 (2019).
2. G. Silversmit, D. Depla, H. Poelman, G.B. Marin, R. De Gryse, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **135**, 167 (2004).

РЕЗУЛЬТАТЫ АНАЛИЗА РЕНТГЕНОВСКИХ ФОТОЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ ПЛЁНОК ТВЁРДЫХ РАСТВОРОВ $Cd_xPb_{1-x}S$

Т.С. Лосев^{1*}, И.С. Жидков¹, А.В. Поздин¹, Л.Н. Маскаева¹, Э.З. Курмаев^{1,2}.

¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

²Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: tslosev@urfu.ru

Нанокристаллические тонкие пленки PbS является перспективным материалом для создания фотоэлектрических устройств с высокой чувствительностью в инфракрасном диапазоне благодаря узкой запрещенной зоне (0,41 эВ). Кроме того, твердый раствор CdPbS может применяться в фотоэлектронных устройствах, работающих в диапазоне 0.4 – 3.0 мкм с перемещенной спектральной чувствительностью [1]. Целью нашей работы стало исследование тонких пленок $Cd_xPb_{1-x}S$ на подложках из кремния (Si) и индий-оловянного оксида (ITO).

Поверхностный состав и электронная структура определены из анализа рентгеновского фотоэлектронного спектра (РФЭС) образцов. Повышение концентрации кадмия в исходном растворе до $[Cd^{2+}] = 0.08$ моль/л приводит к варьированию концентрации основных элементов на поверхности, что отражается в резком изменении соотношения Pb/Cd. Такое изменение может быть обусловлено перестройкой в твердом растворе, когда доминирующей становится структура CdS. Указанные изменения сопровождаются сменой типа проводимости. Во всех образцах на поверхности присутствуют $PbCO_3$ и $Pb(HCO_3)_2$. Важным моментом является наблюдаемая структурная перестройка, происходящая при увеличении концентрации кадмия в исходном растворе до $[Cd^{2+}] = 0.08$ моль/л, и сопровождающаяся сменой типа проводимости. Стоит отметить, что положения и форма максимумов спектров для образцов с $[Cd^{2+}] = 0.04$ моль/л и 0.06 моль/л вне зависимости от типа подложки практически не отличаются.

Травление ионами аргона на глубину примерно 21 нм [1] позволяет сравнить распределение элементов на поверхности и в объеме плёнки. В образцах на кремнии с n-типом проводимости имеются существенные отличия в соотношениях основных элементов. Так, если на поверхности число атомов свинца значительно превышает число атомов кадмия, то в объеме соотношение их концентраций оказывается близким к единице. Вместе с тем, для образца с p-типом проводимости на кремнии существенных изменений не обнаружено. Все образцы на ITO показали значения концентраций близким к поверхности. В тоже время при травлении образцов на ITO наблюдалась тенденция увеличения соотношения $(Pb+Cd)/S$, что говорит о том, что в объеме может существовать значительное число вакансий серы, которые могут оказывать существенное влияние на свойства исследуемой системы. Кроме того, травление уменьшает содержание кислорода и углерода, что свидетельствует о том, что значительный вклад в сигнал от этих элементов на поверхности вносят адсорбированные молекулы.

1. N.A. Forostyanaya, L.N. Maskaeva, Z.I. Smirnova, S. Santra, G.V. Zyryanov, V.F. Markov, M.V. Kuznetsov, *Thin Solid Films* **657**, 101 (2018).

ДЕТЕКТОР ТЕРАГЕРЦОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА $\text{Bi}_{88}\text{Sb}_{12}$

Е.С. Макарова^{1*}, А.В. Асач¹, И.Л. Тхоржевский¹, А.Д. Сединин¹, Д.В. Зыков¹, А.Д. Зайцев¹, П. Демченко¹, А.С. Тукмакова¹, А.В. Новотельнова¹, Н.С. Каблукова^{1,2}, М.К. Ходзицкий¹

¹Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

²Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна, Санкт-Петербург, Россия

*e-mail: makarova_helena_2011@mail.ru

Потребность в детекторах, работающих в терагерцовом диапазоне частот, существует сегодня во многих областях современной науки и техники [1]. Излучение ТГц диапазона частот играет важную роль в астрономии при измерении параметров спектральных линий [2]. Детекторы ТГц диапазона необходимы для формирования изображения в ТГц диапазоне частот в навигации, биологии, в медицине [3]. Датчики ТГц излучения могут применяться для обнаружения взрывоопасных и наркотических веществ [4-6].

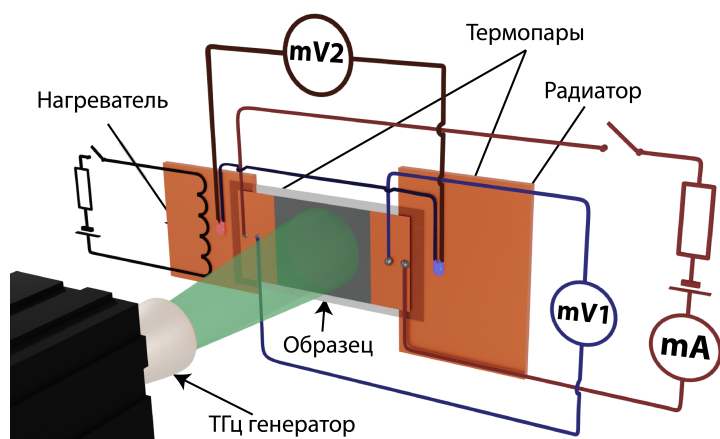


Рис. 1. Схема экспериментальной установки.

Методом термического напыления были получены серии пленок висмута и твердых растворов висмут-сурьма. Установка по исследованию отклика образца на излучение состояла из непрерывного источника ТГц излучения на частоте 0.14 ТГц, мощностью 30 мВт и держателя образца с нагревающим элементом, датчиками разности температур и радиатором рис. 1. Измерялась термо-ЭДС как фотоотклик образца на излучение терагерцового диапазона

частот. Изучено влияние на фотоотклик образца приложенного к образцу постоянного напряжения и созданного на структуре градиента температур. Приведены результаты серии экспериментов по исследованию влияния терагерцового излучения на фотоотклик полученных пленок. Исследовано влияние толщины и состава наноразмерных слоев висмута и сурьмы на различных подложках. Проведенные исследования показали, что наиболее чувствительны к терагерцовому излучению пленки $\text{Bi}_{88}\text{Sb}_{12}$.

Проведение исследований поддержано грантом РФФ проект № 19-72-10141.

1. M. Tonouchi, Nat. Photonics **18**, 97 (2007).
2. G.J. Wilmink, J.E. Grundt, Terahertz Waves **32**, 1074 (2011).
3. P.C. Ashworth et al., Optics Express **17**, 12444 (2009).
4. F. Sizov, Semicond. Sci. Technol. **33**, 123001 (2018).
5. M.S. Vitiello J. Phys. Mater. **3**, 014008 (2020).
6. R.A. Lewis, J. Phys. D: Appl. Phys. **52**, 433001 (2019).

АНТИОКСИДАНТНАЯ АКТИВНОСТЬ НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА ЦЕРИЯ

С.А. Маслова^{1,2*}, И.Н. Бажукова¹, Е.О. Бакшеев¹¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия²Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*e-mail: serafimamaslova@mail.ru

Наночастицы диоксида церия представляют собой перспективный объект для применения в медицине и биологии. В основе медико-биологического применения наночастиц лежит присущая им высокая кислородная нестехиометрия, обуславливающая проявляемую ими биологическую активность, а также отсутствие токсичности в живых системах [1,2]. Исследования биологической активности наночастиц диоксида церия показывают, что это соединение проявляет мультиферментативные, противоопухолевые, антибактериальные и противовирусные свойства [3]. Целью данной работы является исследование антиоксидантной активности наночастиц диоксида церия, стабилизированных мальтодекстрином.

Исследование свойств суспензий наночастиц проводили методом оптической спектроскопии с использованием спектрофотометра Helios Alpha 9423UVA1002E, оснащенного программным обеспечением Vision 32. Способность наночастиц диоксида церия имитировать фермент каталазу изучалась с помощью анализа изменений, происходящих в спектрах их оптического поглощения после взаимодействия с пероксидом водорода. Способность золь диоксида церия инактивировать гидроксильный радикал изучалась согласно методике, описанной в работе [4], в которой используется факт изменения интенсивности окраски раствора красителя метилового фиолетового в присутствии гидроксильного радикала, образующегося в процессе реакции Фентона из соли двухвалентного железа и пероксида водорода.

На основании проведенных исследований можно сделать следующие выводы.

1. Наночастицы CeO_2 способны выполнять функции фермента каталазы и разрушать пероксид водорода. Определены количественные значения каталазной активности наночастиц.
2. Наночастицы CeO_2 способны инактивировать гидроксильные радикалы аналогично молекулярным антиоксидантам (аскорбиновая кислота, токоферол, метионин и т.д.), но, в отличие от перечисленных веществ, которые способны участвовать только в одном редокс-цикле, после которого они разрушаются, наночастицы диоксида церия имеют способность к регенерации, что является преимуществом в данном аспекте [4].

Таким образом, проведенные исследования показали принципиальную возможность использования наночастиц диоксида в медицине, например, в качестве потенциальных антиоксидантов для защиты клеток от активных форм кислорода.

1. А.Б. Щербаков, Н.М. Жолобак, В.К. Иванов, Ю.Д. Третьяков, Н.Я. Спивак, Биотехнология **4**, 1С9 (2011).
2. А.Б. Щербаков, О.С. Иванова, Н.Я. Спивак, В.В. Козик, В.И. Иванов, — Томск: Издательский Дом Томского государственного университета (2016).
3. Р.А. Вазиров, С.Ю. Соковнин, В.Г. Ильвес, Межвузовский сборник научных трудов **10**, 196 (2018).
4. А.Б. Щербаков, Н.М. Жолобак, В.К. Иванов, О.С. Иванова, А.В. Марчевский, А.Е. Баранчиков, Н.Я. Спивак, Ю.Д. Третьяков, Журнал неорганической химии **57**, 11С1499 (2012).

ВЛИЯНИЕ МАТЕРИАЛА ПОДЛОЖКИ НА СТРУКТУРУ ПОКРЫТИЯ КУБИЧЕСКОГО КАРБИДА ВОЛЬФРАМА WC_{1-x} , НАНЕСЕННОГО ПЛАЗМОДИНАМИЧЕСКИМ МЕТОДОМА. Насырбаев^{1*}, А.А. Сивков^{1,2}, Д.С. Никитин¹¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия²Цзилиньский университет, Чанчунь, Китайская Народная Республика

*e-mail: arn1@tpu.ru

Одной из современных проблем в промышленности является увеличение срока службы технических материалов, решением которой может быть применение упрочняющих покрытий. Широкое применение получили покрытия из гексагональных карбидов вольфрама WC и W_2C . Однако судя по фазовой диаграмме в системе $W-C$ существует также и метастабильная кубическая модификация (WC_{1-x}) [1]. Получение кубического карбида вольфрама в объемном виде затруднено ввиду особенностей его получения [2], к которым относятся существование в узком диапазоне параметров (атомарное отношение C/W и температура). Более того, кубический карбид вольфрама может существовать при комнатной температуре только при реализации процесса сверхбыстрой кристаллизации частиц (порядка $10^7 - 10^8$ К/с). Такие параметры достигаются при использовании технологий высокоскоростного распыления материала, в числе которых выделяются плазменные и аналогичные им технологии.

В работе продемонстрирована возможность нанесения покрытий кубического карбида вольфрама на металлические подложки посредством использования сильноточно-го коаксиального магнетоплазменного ускорителя (КМПУ) с графитовыми электродами. По произведенной серии экспериментов исследовалось влияние материала подложки (медь ($\lambda_{Cu} = 395$ Вт/(м·К), титан ($\lambda_{Ti} = 18$ Вт/(м·К)) на характеристики покрытия кубического карбида вольфрама. Экспериментальная серия производилась в камере-реакторе, заполненной аргоном при комнатной температуре и атмосферном давлении. Электропитание к ускорителю подводилось от емкостного накопителя энергии ($W_{нак} = 27$ кДж). Покрытия, полученные плазмодинамическим методом, исследовались методами рентгеновской дифрактометрии (XRD) и сканирующей электронной микроскопии (SEM).

Анализ результатов XRD показал, что во всей серии экспериментов были получены покрытия, содержащие кубическую фазу карбида вольфрама. По результатам количественного рентгеноструктурного анализа было определено, что на медной подложке покрытие состоит преимущественно (до 95%) из фазы кубического карбида вольфрама. В экспериментах с титановой подложкой в покрытии помимо преобладающей (до 60%) фазы WC_{1-x} присутствуют фазы гексагонального карбида вольфрама (W_2C), а также карбида титана (TiC), образующиеся в результате низкого рассеивания тепла на титановой подложке. По результатам SEM была определена толщина покрытия, в экспериментах с медной подложкой составившая порядка 15 мкм. Для кубического карбида вольфрама в полученных покрытиях были проведены прямые измерения механических свойств: для покрытий на медной подложке нанотвердость по Берковичу составила $H = 30.1 \pm 0.9$ ГПа, а модуля Юнга $E = 354 \pm 15$ ГПа.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 19-13-00120).

1. A. S. Kurlov, A. I. Gusev, Russ. Chem. Rev. **75**(7), 617 (2006).

2. Y. Gao, X. Song, X. Liu, C. Wei, H. Wang, G. Guo. Scr. Mater. **68**(2), 108 (2013).

ТЕРМОСТИМУЛИРОВАННАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ В ОБЛУЧЁННЫХ НАНОТРУБКАХ
ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ

И.А. Петренёв*, А.С. Вохминцев, Е.А. Силенкова, Р.В. Камалов, И.А. Вайнштейн

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: i.a.petrenev@urfu.ru

Диоксид циркония используется в различных отраслях науки и техники благодаря высокой химической, механической и температурной стабильности. На его основе производятся батареи, конденсаторы, антикоррозионные покрытия, топливные элементы, твёрдые электролиты, катализаторы и т.д. [1]. Интерес к оптическим свойствам ZrO_2 обусловлен перспективами применений в качестве функциональных слоёв в фото-, катодо-, электро- и термолюминесцентных устройствах. Цель данной работы заключалась в исследовании термостимулированной люминесценции (ТСЛ) в нанотрубулярных массивах диоксида циркония, полученных методом анодирования.

Нанотрубулярный массив диоксида циркония толщиной около 1.7 мкм был синтезирован методом анодирования металлической циркониевой фольги чистотой 99% [2]. Zr-фольга толщиной 100 мкм предварительно обезжиривалась, погружалась в ультразвуковую ванну, обрабатывалась раствором кислот $HF:HNO_3:H_2O = 1:6:20$, промывалась дистиллированной водой и сушилась на воздухе. Анодирование проводилось в двухэлектродной электрохимической ячейке при постоянном напряжении 20 В и температуре анода 10°C в течение 2 ч. Электролит представлял собой раствор этиленгликоля, содержащий 5 мас.% H_2O и 1 мас.% NH_4F . Перед измерением ТСЛ образцы отжигались на воздухе при температуре 875 К в течение 30 мин. Для возбуждения ТСЛ образцы облучались излучением рентгеновской трубки Oxford Instruments Eclipse IV при напряжении 45 кВ и токе 50 мА, доза составляла 10 Гр. Кривые ТСЛ регистрировались с использованием оригинальной установки на базе спектрометра Perkin Elmer LS 55 и высокотемпературной приставки [3]. Регистрация ТСЛ проводилась в фиксированных полосах свечения в спектральной области 300 – 550 нм при линейном нагреве образцов в температурном диапазоне 300 – 875 К со скоростью 2 К/с.

Кривые ТСЛ облученных образцов содержат два пика: низкотемпературный (P1) с максимумом интенсивности при 350 К и высокотемпературный (P2) — при 580 К. Соотношение интенсивностей указанных пиков меняется при регистрации в исследуемых полосах свечения. Так, интенсивность пика P1 выше в полосе 515 нм, а пика P2 — в полосе 415 нм. На основе анализа измеренных кривых ТСЛ методом начального роста выполнены оценки энергий активации ловушек, ответственных за наблюдаемые пики P1 и P2. Анализ независимых работ показал, что полученные экспериментальные данные удовлетворительно согласуются с результатами для нанопорошков ZrO_2 , облученных ультрафиолетовым и гамма-излучением [4, 5]. Обсуждаются возможные механизмы наблюдаемых термоактивационных процессов в исследуемых нанотрубках с участием собственных дефектных центров.

1. D. Panda, T.-Y. Tseng, *Thin Solid Films* **531**, 1 (2013).
2. I.A. Petrenyov, R.V. Kamalov, A.S. Vokhmintsev, N.A. Martemyanov, I.A. Weinstein, *J. Phys. Conf. Ser.* **1124**, 022004 (2018).
3. A.S. Vokhmintsev, M.G. Minin, A.M.A. Henaish, I.A. Weinstein, *Meas. J. Int. Meas. Confed.* **66**, 90 (2015).
4. H.K. Yueh, B. Cox, *J. Nuc. Mater.* **323**, 57 (2003).
5. P. Salas, E. De la Rosa-Cruz, L.A. Diaz-Torres, V.M. Castaño, R. Melendrez, M. Barboza-Flores, *Radiat. Meas.* **37**, 187 (2003).

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ Al – Ni – Co – R (R = Nd, Gd, Yb)

Б.А. Русанов^{1*}, В.Е. Сидоров¹, П. Швец², П. Швец ст.², Д. Яничкович², Э.А. Карфидов³¹Уральский государственный педагогический университет, Екатеринбург, Россия²Институт физики Словацкой академии наук, Братислава, Словакия³Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия*e-mail: rusfive@mail.ru

Сплавы на основе алюминия с переходными (ПМ) и редкоземельными (РЗМ) металлами, при сравнительно небольших скоростях охлаждения, склонны образовывать аморфное состояние. В аморфном состоянии такие системы проявляют целый комплекс нехарактерных кристаллическим аналогам механических и коррозионных свойств. Наряду с этим, процесс кристаллизации аморфной фазы в сплавах Al-Ni-Co-R представляет особый интерес для понимания процессов формирования аморфного состояния.

В данной работе была исследована кинетика кристаллизации, структура и электрическое сопротивление сплавов Al – Ni – Co – R (R = Nd, Gd, Yb) в аморфном и нанокристаллическом состояниях. Концентрация ПМ составила от 2 ат.% до 6 ат.% в разных соотношениях, а РЗМ — 6 ат.%. Сплавы указанных составов в аморфном состоянии были получены методом спиннингования. Тепловые процессы были изучены с помощью дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) на установке Perkin Elmer DSC-7 со скоростями нагрева от 5 К/мин до 40 К/мин. Особенности структуры исследованы методами дифракции рентгеновских лучей и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) высокого разрешения с помощью дифрактометра Bruker D8 Advance и электронного микроскопа FEI Titan Themis 300, соответственно. Электрическое сопротивление аморфных образцов измерено стандартным четырёхзондовым методом.

Установлено, что процесс кристаллизации аморфных сплавов идет в 4 – 5 стадий. Рентгеновский анализ показал, что на первой стадии кристаллизации в сплавах с разным соотношением ПМ выделяются нано-частицы α -Al, что характерно для аморфных сплавов на основе алюминия. Это также подтверждается результатами ПЭМ. Особый интерес вызывает вторая стадия кристаллизации. В наших опытах было показано, что в ходе второй стадии продолжается рост частиц α -Al, который сопровождается образованием тройного интерметаллида $Al_{19}R_3Ni_5$, который ранее не обнаруживали в таких системах. Дальнейшая кристаллизация проходит с образованием двойных интерметаллидов Al_9Co_2 , Al_3R и Al_4R . Температурные зависимости электрического сопротивления характеризуются скачкообразным уменьшением относительных значений в процессе расстеклования, при этом температуры скачков совпадают с данными ДСК.

Образование метастабильных тройных соединений в процессе расстеклования сплавов Al – Ni – Co – R (R = Nd, Gd, Yb) вокруг частиц α -Al может свидетельствовать об изменениях параметров среднего порядка, который, в свою очередь, влияет на свойства сплавов в аморфном состоянии. Наряду с этим, изменение соотношения никеля и кобальта не существенно влияет на процесс формирования и морфологию интерметаллидов при кристаллизации, а лишь позволяет управлять термической стабильностью сплавов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-32-80001).

ХРОМОВЫЕ ПОКРЫТИЯ ДЛЯ ЗАЩИТЫ ЦИРКОНИЕВОГО СПЛАВА Э110 ПРИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОМ АТМОСФЕРНОМ ОКИСЛЕНИИ

С.Е. Ручкин*, Д.В. Сиделёв

Томский политехнический университет, Томск, Россия

*e-mail: ruchkin70@gmail.com

Циркониевые оболочки тепловыделяющих элементов ядерного топлива активно окисляются при высоких температурах в агрессивных средах. Модификация их поверхности с помощью магнетронного распыления хрома позволяет существенно повысить их защитные параметры при нормальных и аварийных условиях работы ядерного реактора [1]. Однако, хром имеет достаточно большой коэффициент диффузии в Zr (особенно в β -фазе) при высоких температурах, что является основной проблемой металлического покрытия из Cr. Поэтому цель настоящей работы — поиск оптимальной структуры защитного покрытия на основе хрома для циркониевого сплава Э110.

С помощью ионно-плазменной вакуумной установки магнетронного распыления было получено четыре серии покрытий: (1) Cr покрытие (~ 2.53 мкм); (2 – 4) многослойные покрытия с общей толщиной $\sim 2.45 - 2.60$ мкм. Последние имели следующую структуру: чередующиеся слои CrN/Cr с шагом 50, 250 или 500 нм, верхний слой — Cr, толщиной 1 мкм. Плоские образцы Э110 ($15 \times 15 \times 2$ мм³) с покрытиями и без него окислялись на атмосфере при температуре 1100°C с разной выдержкой по времени: от 10 до 40 минут. До и после окисления проводились гравиметрические измерения образцов на аналитических весах с точность 10^{-4} г.

На рис. 1 показан привес (W) образцов после высокотемпературных испытаний на атмосфере. Покрытия значительно повышают стойкость сплава Э110 к окислению на воздухе. Первоначально (10 мин) образец с однослойным покрытием окисляется сильнее ввиду формирования на его поверхности оксидной плёнки большей толщины. При окислении в течение 20 минут все образцы имеют схожие значения привеса. Но при более длительном тесте (30 и 40 мин) наблюдалось резкое увеличение W (Э110/Cr), что указывает на его интенсивное окисление. Образцы с покрытиями CrN/Cr имеют меньший привес после 20 мин окисления, он слабо меняется с увеличением и выдержки до 40 мин. Такое поведение образцов возможно обусловлено подавлением взаимной диффузии хрома и циркония на границе раздела фаз «покрытие-подложка» за счёт применения многослойной структуры на основе слоёв CrN и Cr. Полученные результаты демонстрируют высокую эффективность использования многослойных покрытий CrN/Cr для повышения стойкости к окислению сплава Э110.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Госкорпорации «Росатом» в рамках научного проекта 20-21-00037.

1. E.B. Kashkarov, D.V. Sidelev, M.S. Syrtanov, C. Tang, M. Steinbrück, *Corrosion Science* **175**, 108883 (2020).

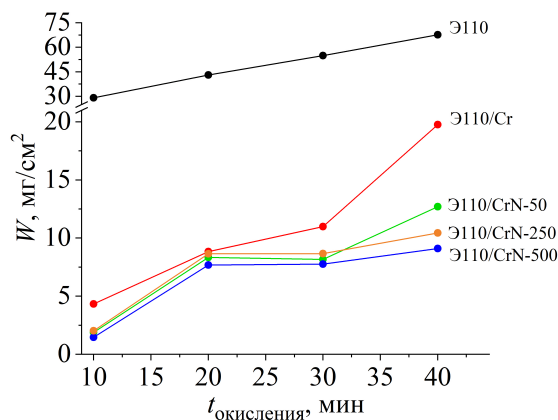


Рис. 1. Привес образцов: Э110 — без покрытия; Э110/Cr — с Cr покрытием; Э110/CrN-50, Э110/CrN-250, Э110/CrN-500 — с покрытиями с чередующимися слоями 50, 250 и 500 нм, соответственно.

ВЛИЯНИЕ РЕЖИМА ОХЛАЖДЕНИЯ КАПЛИ РАСПЛАВА RE-TM-B НА МОРФОЛОГИЮ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАГНИТНЫХ МИКРОПРОВОДОВ

В.Л. Сидоров^{1,2*}, О.В. Коплак¹, Е.В. Дворецкая¹

¹Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

*e-mail: bobik_132@mail.ru

Сплавы группы RE-TM-B (RE — редкоземельные металлы, TM — переходные металлы, B — бор) характеризуются высоким значением запасенной магнитной энергии. Магниты, изготовленные на их основе, обладают хорошей термо- и временной стабильностью, коррозионной стойкостью. Как показано в [1], из сплава RE-TM-B могут быть созданы магнитные пинцеты (микропровода), обладающие высоким градиентом магнитного потока для захвата и перемещения магнитомеченных клеток. Получение микропроводов осуществлялось методом экстракции висящей капли расплава, разогретой электронным пучком, которая охлаждалась с линейной скоростью в пределах 20 – 55 м/с. Типичная структура микропроводов представляла кристаллическое ядро α -Fe, покрытое аморфной оболочкой PrDyFeCoB [2]. Однако это фазовое расслоение не единственно, и порой при тех же условиях получения образцов из расплава PrDyFeCoB обнаруживаются микропровода и без геометрически выделенного ядра. При скоростях охлаждения 20 – 35 м/с формируются аморфные (до 80 %) микропровода с хаотическими включениями фазы α -Fe. В работе обсуждаются возможные причины формирования круглых и линзообразных микропроводов, а также взаимосвязь морфологии с долей аморфности и соответственно магнитными свойствами микропроводов (PrDy)(FeCoB). При изменении скорости охлаждения капли расплава геометрические параметры микропроводов меняли форму (от круглого до практически плоского), ширину (от 20 – 120 мкм) и длину (10 – 100 мкм) (рис. 1). Установлено, что форма поперечного сечения микропровода зависит от вязкости и поверхностного натяжения расплава в момент его застывания.

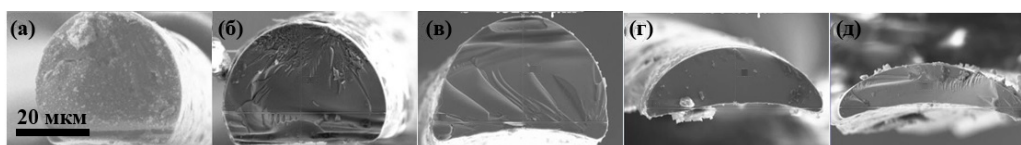


Рис. 1. Изображения поперечного сечения микропроводов различной формы в сканирующем электронном микроскопе. Скорость вращения цилиндра уменьшается от (а) к (д) в пределах 55 – 20 м/с.

Микротвердость микропровода с цилиндрической формой поперечного сечения (рис. 1(а), скорость охлаждения \sim 55 м/с) составляет 13.4 ГПа и превосходит значение в 9.3 ГПа для микропровода с линзообразной формой (рис. 1(д)), полученного при более низкой скорости затвердевания (\sim 20 м/с). При этом для одного и того же микропровода микротвердость поперечного сечения была меньше продольного и отличалась в 1.5 раза. Модуль Юнга уменьшался от значения $E = 207$ ГПа для поперечного сечения, до $E = 140$ ГПа для продольного сечения этого же микропровода.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ «Стабильность» 20-32-70025.

1. R.V. Morgunov *et al.*, *Materials Letters* **273**, 127954 (2020).
2. R.V. Morgunov и др. *JMMM* **497**, 166004 (2020).

СИНТЕЗ И МОДИФИКАЦИЯ НАНОСТРУКТУРНОГО ДИОКСИДА ТИТАНА ДЛЯ УЛУЧШЕНИЯ ЕГО ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

А.А. Сушникова^{1,2}, И.Б. Дорошева^{1,2,3}, А.А. Валеева^{1,3}, А.А. Ремпель^{1,2}

¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

²Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

³Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: sushnikova.ann@gmail.com

Наноструктурный диоксид титана (TiO_2) активно используют при синтезе различных органических молекул [1]. На полноту протекания реакции и каталитическую активность фотокатализатора влияют множество факторов, такие как морфология, фазовый состав, ширина запрещенной зоны, наличие структурных вакансий, концентрация активных центров, время жизни возбужденного состояния электронов и дырок, удельная площадь поверхности.

Целью данной работы является подбор параметров синтеза и модификация нанотрубчатого TiO_2 для повышения удельной площади поверхности и увеличения фотокаталитической активности.

Нанотрубчатый TiO_2 был синтезирован методом анодирования титановой фольги в потенциостатическом режиме в течение 60 мин при напряжении 60 В с поддержанием температуры электролита на уровне 20°C на установке Digma. Отжиг TiO_2 проводился на воздухе в муфельной печи SNOL при температурах 180, 240, 300°C .

Рентгенодифракционный анализ (XRD) синтезированных нанотрубок TiO_2 был выполнен в $\text{CuK}_{\alpha 1,2}$ излучении. Рентгенограммы снимались в режиме пошагового сканирования с $\Delta(2\theta) = 0.02^\circ$ в интервале углов 2θ от 10° до 80° с высокой статистикой. Удельная площадь поверхности образцов была измерена с предварительной дегазацией при 120°C . Исследование морфологии нанотрубок было выполнено на растровом электронном микроскопе. Исследование методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS) проводилось с использованием электронного спектрометра. В качестве источника излучения использовалась рентгеновская пушка с алюминиевым анодом мощностью 165 Вт.

Согласно данным XRD, при малых углах рассеяния наблюдается интенсивное диффузное гало и отсутствие дифракционных пиков, что свидетельствуют об аморфности структуры. Отжиг на воздухе в интервале температур 180 – 300°C в течение 1 часа привел к изменению структуры: аморфная фаза перешла в анатаз при 300°C , кроме того наблюдалось увеличение удельной площади с 14 до $54 \text{ м}^2/\text{г}$. XPS показал усиление интенсивностей пиков титана и кислорода, что говорит об удалении органических загрязнений с поверхности TiO_2 при отжиге.

Таким образом, выбранные условия синтеза и отжига позволяют получать толстые плёнки TiO_2 (до 6 мкм), сохраняя при этом диаметр трубок в нанометровом диапазоне. Данная толщина оксидного слоя достаточна для ее беспрепятственного механического отделения от титановой фольги и последующего использования в качестве фотокатализатора в виде порошка. Отжиг привел к изменению структуры и увеличению величины удельной поверхности TiO_2 , что позволит повысить эффективность фотокатализатора.

Работа выполнена при частичной поддержке проекта РФФИ (Проект № 20-03-00299).

1. A.A. Rempel, A.A. Valeeva, Russ. Chem. Bull. **68**, 2163 (2019).

СЕНСОРЫ НИЗКИХ КОНЦЕНТРАЦИЙ H_2 НА ОСНОВЕ СТРУКТУР $Pt/\alpha - Ga_2O_3/\epsilon - Ga_2O_3/Pt$ С ОСТРОВКОВЫМИ СЛОЯМИ ПЛАТИНЫ НА ПОВЕРХНОСТИ

Н.Н. Яковлев*, А.В. Алмаев

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

*e-mail: nik_mr_x@mail.ru

Ранее были исследованы газочувствительные свойства полиморфных структур $Pt/\alpha - Ga_2O_3/\epsilon - Ga_2O_3/Pt$, выращенных ООО «Совершенные кристаллы» под руководством В.И. Николаева, методом хлоридной газофазной эпитаксии (HVPE) на профилированных подложках (PSS) [1]. Данные структуры демонстрировали отклик на H_2 , начиная с комнатной температуры. Минимальная детектируемая концентрация H_2 при температуре $200^\circ C$ составляла 54 ppm. По нашему мнению, контакт $Pt/\epsilon - Ga_2O_3$ имеет ключевую роль для обеспечения чувствительности к H_2 . Известно, что нанесение островковых слоев платины приводит к увеличению отклика на восстановительные газы. С учетом этого на поверхность структуры $\alpha - Ga_2O_3/\epsilon - Ga_2O_3$ между платиновыми контактами были нанесены островковые слои платины. Островковые слои представляют собой тонкие частички платины, хаотично распределенные между платиновыми контактами.

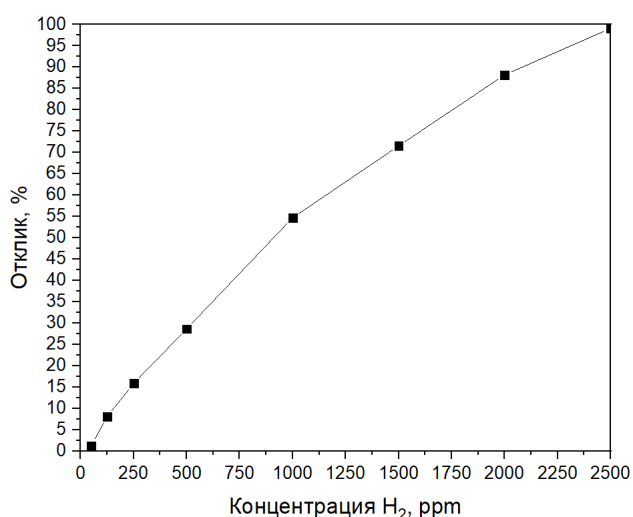


Рис. 1. Зависимость отклика от концентрации водорода в камере

После такой модификации образцов отклик на 54 ppm H_2 увеличился с 0.13% до 1.31%. Для определения отклика измерялись ВАХ и временные зависимости тока при постоянном смещении. Методика проведения эксперимента описана в работе [1]. Отклик рассчитывался по следующей формуле:

$$S_I = \frac{I_H - I_0}{I_0} \cdot 100\% = \frac{\Delta I}{I_0} \cdot 100\% \quad (1)$$

где I_0 — квазистационарное значение тока, текущего через образцы, в атмосфере чистого воздуха; I_H — квазистационарное значение тока, текущего через образцы при подаче H_2 . Зависимость отклика от концентрации представлена на рис. 1. Измерения проводились в диапазоне концентраций H_2 от 50 до 2500 ppm.

Увеличение чувствительности образцов на воздействие H_2 вызвано, с одной стороны, каталитическими свойствами островковых слоев платины, а с другой — увеличением площади поверхности, участвующей во взаимодействии с газом.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-79-10043).

1. A.V. Almaev, V.I. Nikolaev, S.I. Stepanov, A.I. Pechnikov, A.V. Chikiryaka, N.N. Yakovlev, V.M. Kalygina, V.V. Koryuev, E.V. Chernikov, *Journal of Physics D: Applied Physics* **53** (2020).

СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ И ФИЗИКА НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР

ВЛИЯНИЕ СОВМЕСТНОГО ДОПИРОВАНИЯ ТИТАНОМ И ДИОКСИДОМ ТИТАНА
НА СТРУКТУРУ, ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА
СОЕДИНЕНИЯ $\text{Fe}_{1.02}\text{Se}$

Е.В. Кислов*, Н.В. Селезнева, Н.В. Баранов

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: eu.kislov@gmail.com

Селенид железа FeSe с тетрагональной структурой типа PbO и пространственной группой $P4/nmm$ является сверхпроводником с температурой перехода около 8 К. Существенное влияние на сверхпроводящие свойства могут оказывать замещения по подрешеткам металла и халькогена [1], а также термообработки в атмосфере кислорода, которые, как предполагается, приводят к деинтеркаляции избыточных атомов железа [2]. В работе [3] было показано, что одним из вариантов введения кислорода в решетку является добавление оксидов в шихту на этапе синтеза. При этом использование не только оксида железа, но и оксидов других переходных металлов может создать условия для замещения и по подрешетке железа. Выбор титана обусловлен тем, что его атомы, как правило, не обладают собственным магнитным моментом в халькогенидных соединениях, а также предполагалось, что присутствие титана в шихте будет препятствовать образованию оксида железа при синтезе.

Целью настоящей работы является изучение влияния совместного допирования соединения $\text{Fe}_{1.02}\text{Se}$ титаном и диоксидом титана концентраций $y = 0.04, 0.1$ и 0.3 на фазовый состав, структуру и сверхпроводящие свойства.

Синтез образцов производился одностадийным методом твердофазных реакций в вакуумированных кварцевых ампулах при температуре 700°C . Рентгеноструктурный анализ проводился при помощи дифрактометра Bruker AXS D8 ADVANCE с последующей обработкой результатов программным комплексом FullProf. Измерение температурных зависимостей электросопротивления проводилось 4-х контактным методом при помощи рефрижератора замкнутого цикла CryoFree204 в интервале температур от 5.5 до 310 К.

Рентгеноструктурный анализ полученных соединений показал, что допирование титаном и диоксидом титана в системе $\text{Fe}_{1.02}\text{SeTi}_y(\text{TiO}_2)_y$ приводит к значительному изменению фазового состава образцов. Установлено, что образец $\text{Fe}_{1.02}\text{SeTi}_{0.04}(\text{TiO}_2)_{0.04}$ содержит тетрагональную и гексагональную фазы аналогично исходному составу $\text{Fe}_{1.02}\text{Se}$, при этом параметр c тетрагональной фазы, характеризующий межслоевое расстояние, остается практически неизменным; в образцах с содержанием титана и диоксида титана $y = 0.1$ и 0.3 тетрагональная фаза отсутствует, а основной является гексагональная фаза типа NiAs .

Переход в сверхпроводящее состояние наблюдается только для исходного и образца с минимальным содержанием титана и диоксида титана $y = 0.04$. В образцах с содержанием титана и диоксида титана $y = 0.1$ и 0.3 переход в сверхпроводящее состояние отсутствует. Схожее поведение наблюдается у образцов, допированных никелем [4], однако в них подавление происходит при добавлении еще меньшей концентрации допанта. Кроме того, установлено, что добавление титана и диоксида титана не изменяет температуру начала перехода, но уменьшает его ширину.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (проект FEUZ-2020-0054).

1. Y. Takano *et al.*, J. Phys. Soc. Jap. **79**, 102001 (2010).
2. Y. Mizuguchi *et al.*, Europhysics Letters **90**, 57002 (2010).
3. G. S. Thakur *et al.*, Zeitschrift Für Anorganische Und Allgemeine Chemie **640**, 1159 (2014).
4. A. K. Yadav *et al.*, Solid State Commun. **202**, 8 (2014).

ДВУХУЗЕЛЬНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ БЕТЕ ДЛЯ СИСТЕМЫ ЛОКАЛЬНЫХ БОЗОНОВ НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ

Е.Л. Спевак*, Ю.Д. Панов, А.С. Москвин

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: spevak155@gmail.com

В работе представлено исследование системы локальных бозонов[1] на квадратной решетке с учетом взаимодействия ближайших и следующих за ближайшими соседней, а также эффект коррелированного зарядового переноса. Система рассматривается в рамках двухузельного приближения Бете[2], заключающегося в рассмотрении кластера (рис. 1(a)) в эффективном внешнем поле. Мы построили фазовую диаграмму в координатах температура-концентрация и сравнили ее с фазовой диаграммой данной системы, полученной в одноузельном приближении среднего поля (mean-field approximation, MFA) (рис. 1(b)).

Мы используем формализм операторов вторичного квантования, а также оценку свободной энергии в неравенстве Боголюбова для описания исследуемой системы. Гамильтониан системы имеет вид:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i) + V \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j - \alpha V \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} n_i n_j - \mu \sum_i n_i, \quad (1)$$

где V, α — коэффициенты взаимодействия, t — коэффициент переноса μ — химический потенциал, $\langle i, j \rangle$ — ближайшие соседние узлы, $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ — вторые соседи, a_i^\dagger, a_i — операторы рождения и уничтожения локальных бозонов в i -м узле решетки соответственно.

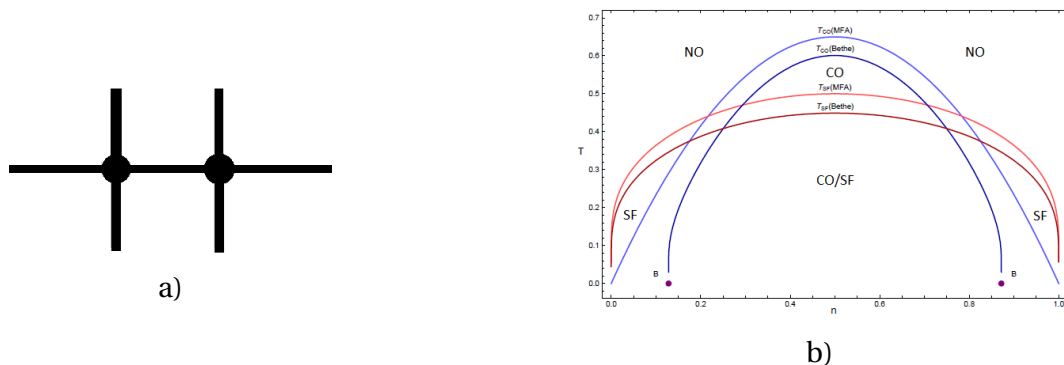


Рис. 1. а) Изображение кластера, б) сравнение фазовых диаграмм.

Сравнение температур фазового перехода показывает, что учет корреляции двух соседних узлов(в одном кластере) в эффективном поле изменяет критические температуры зарядоупорядоченной(CO) и сверхтекучей(SF) фаз, т. е. $T_{CO}(MFA) > T_{CO}(Bethe)$, $T_{SF}(MFA) > T_{SF}(Bethe)$. Также исследование показало, что для зарядоупорядоченной фазы существует критическая концентрация(точка B), после которой зарядовый порядок реализоваться не может.

Работа была выполнена в рамках работ по проекту госзадания FEUZ-2020-0054.

1. T. Matsubara, H. Matsuda, Progress of Theoretical Physics **16**, 569 (1956).
2. Ю.Д. Панов, А.С. Москвин, В.А. Улитко, А.А. Чиков, Физика твердого тела **9**, 1676 (2019).

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА МОДЕЛЬНОГО КУПРАТА

А.А. Чиков*, В.А. Улитко, Ю.Д. Панов, А.С. Москвин

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: alex.chikov@yandex.ru

Конкуренция магнитного, сверхпроводящего и зарядового упорядочений в купратах типа $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ является важным вопросом современной физики[1]. Ключевым элементом структуры являются плоскости CuO_2 , описанию которых в рамках псевдоспинового формализма был посвящен ряд теоретических работ [2,3,4]. В этих работах трем эффективным валентным состояниям кластера CuO_4 ($[\text{CuO}_4]^{5-}$, $[\text{CuO}_4]^{6-}$, $[\text{CuO}_4]^{7-}$) был сопоставлен псевдоспин $S = 1$. Гамильтониан для плоскости CuO_2 выглядит следующим образом:

$$H_{\text{ch}} = \Delta \sum_i S_{zi}^2 + V \sum_{\langle ij \rangle} S_{zi} S_{zj} + J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{P}_{i0} (\hat{s}_{xi} \hat{s}_{xj} + \hat{s}_{yi} \hat{s}_{yj} + \hat{s}_{zi} \hat{s}_{zj}) \hat{P}_{0j} - \\ - t_p \sum_{\langle ij \rangle} (P_i^+ P_j + P_j^+ P_i) - t_n \sum_{\langle ij \rangle} (N_i^+ N_j + N_j^+ N_i) - \\ - \frac{t_{pn}}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (P_i^+ N_j + P_j^+ N_i + N_i^+ P_j + N_j^+ P_i) - t_b \sum_{\langle ij \rangle} (S_{+i}^2 S_{-j}^2 + S_{+j}^2 S_{-i}^2) \quad (1)$$

где $S_{\pm} = \hat{S}_x \pm i \hat{S}_y$, $T_{\pm} = S_z S_{\pm} + S_{\pm} S_z$, $P^+ = \frac{1}{2}(S_+ + T_+)$, $N^+ = \frac{1}{2}(S_+ - T_+)$, а $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z, \hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$ – операторы x -, y - и z -проекций псевдоспина и спина соответственно. Суммирование \sum_i производится по всем узлам решетки, $\sum_{\langle ij \rangle}$ — по ближайшим соседям.

Гамильтониан (1) учитывает экранированное кулоновское взаимодействие (V) CuO_4 кластеров, энергетический порог реакций диспропорционирования $[\text{CuO}_4]^{6-} + [\text{CuO}_4]^{6-} \rightarrow [\text{CuO}_4]^{5-} + [\text{CuO}_4]^{7-}$ (Δ), а также спиновое обменное взаимодействие (J), различные варианты одночастичного (t_p , t_n , t_{pn}) и двухчастичный транспорт (t_b). Оператор $P_{0i} = 1 - S_{iz}^2$ играет роль оператора спиновой плотности, т.е. учитывает тот факт, что обменное спиновое взаимодействие имеет место только для состояний с $S_z = 0$ (соответствуют $[\text{CuO}_4]^{6-}$).

В настоящей работе представлены фазовые диаграммы для модельного купрата, полученные по результатам вычисления структурных факторов методом Монте-Карло:

$$F_{\mathbf{q}}(A, B) = \frac{1}{N^2} \sum_{lm} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)} \langle A_l B_m \rangle, \quad (2)$$

где A_l и B_m — локальные параметры порядка: $F_{(\pi, \pi)}(\mathbf{s}, \mathbf{s})$ для антиферромагнитного порядка, $F_{(\pi, \pi)}(S_z, S_z)$ для зарядового порядка, $F_{(0,0)}(S_+^2, S_-^2)$ для сверхпроводящего порядка, $F_{(0,0)}(P^+, P)$ для «металлической» фазы.

Работа была выполнена в рамках работ по проекту госзадания FEUZ-2020-0054, а также при поддержке стипендии Президента РФ (СП-2278.2019.1).

1. E. Fradkin, S. A. Kivelson, Nature Physics **8**, 864 (2012).
2. A. S. Moskvin, Phys. Rev. B **84**, 075116 (2011).
3. A. S. Moskvin, Journal of Experimental and Theoretical Physics **121**, 477 (2015)
4. A. S. Moskvin, Journal of Physics: Conference Series **592**, 012076 (2014)

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

ИНФРАКРАСНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ГИБРИДНОГО ПЕРОВСКИТА $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$: СТРУКТУРНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И ДИНАМИКА ОРГАНИЧЕСКОГО КАТИОНА

В.Е. Аникеева^{1,2*}, К.Н. Болдырев^{1,2}, М.Н. Попова¹, О.И. Семенова³

¹Институт спектроскопии РАН, Москва, Троицк, Россия

²Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия

³Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия

*e-mail: anikeeva.ve@phystech.edu

Возрастающий интерес к изучению металлоорганических перовскитов $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ ($\text{MA} = \text{CH}_3\text{NH}_3^+$, $\text{X} = \text{I}, \text{Br}, \text{Cl}$) в качестве новых материалов для использования в солнечных элементах и фотоэлектрических устройствах обусловлен такими превосходными оптоэлектронными свойствами этих соединений, как чрезвычайно высокая эффективность люминесценции, оптимальная ширина запрещенной зоны (1.55 эВ) и высокое значение диффузионной длины носителей заряда (175 мкм) [1]. Рекордный КПД современных tandemных солнечных элементов на основе перовскита и кремния составил 28% [2].

В данной работе представлены спектроскопические исследования отражения гибридного перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ в терагерцовом диапазоне (рис. 1, а), а также спектроскопические исследования пропускания в среднем и ближнем инфракрасном диапазоне (рис. 1, б) с высоким разрешением для диапазона температур от 5 до 350 К.

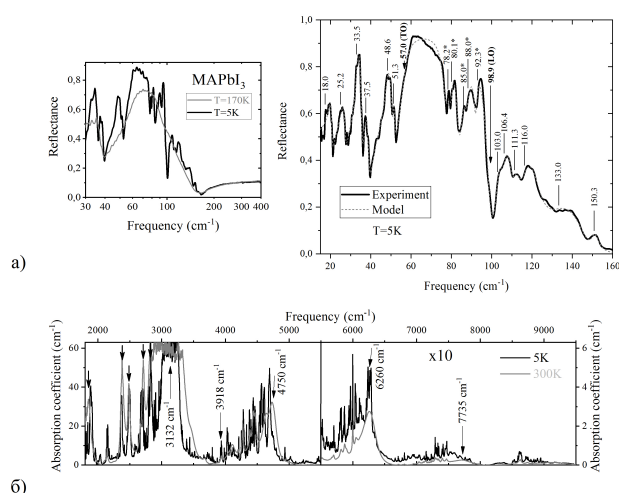


Рис. 1. Спектры отражения $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ при 5 К и 170 К (а); спектры поглощения $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ при 5 К и 300 К.

Была обнаружена торсионная мода молекулярного катиона CH_3NH_3^+ при 306 cm^{-1} , кроме того наблюдались ещё несколько новых низкочастотных колебательных мод, о которых ранее не сообщалось. Модовые параметры Грюнайзена для самых сильных мод отрицательны, что указывает на их взаимодействие с мягкими модами. Обнаружено, что многофононный спектр очень чувствителен к структурным фазовым переходам в MAPbI_3 и к изменениям вращательной динамики молекулярного катиона CH_3NH_3^+ . При температуре, близкой к фазовому переходу из тетрагональной в ромбическую

фазу ($\sim 160 \text{ K}$), наблюдался гистерезис, свидетельствующий о фазовом переходе первого рода. Полное отсутствие ориентационного порядка выше температуры фазового перехода от ромбической к тетрагональной сингонии приводит к заметному уширению колебательных линий.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ № 18-32-20142.

1. M.R. Filip, G. Volonakis and F. Giustino, Handbook of Materials Modeling, 1 (2018).
2. J. Qian, M. Ernst, N. Wu and A. Blakers, Sustainable Energy Fuels **3**, 1439 (2019).
3. K.N. Boldyrev, V.E. Anikeeva, O.I. Semenova, M.N. Popova, The Journal of Physical Chemistry C **124**, 42, 23307 (2020).

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА КВАНТОВЫХ ТОЧЕК CORE/SHELL $\text{Ag}_2\text{S}/\text{SiO}_2$, СИНТЕЗИРОВАННЫХ В ЭТИЛЕНГЛИКОЛЕ

О.В. Овчинников, С.В. Асланов*, М.С. Смирнов, А.С. Перепелица

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

*e-mail: windmaster7@yandex.ru

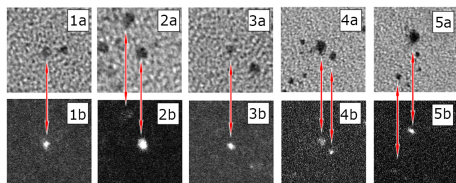


Рис. 1. Светлопольные (a) и темнопольные (b) ПЭМ изображения изученных образцов core/shell $\text{Ag}_2\text{S}/\text{SiO}_2$: с 0.1 м.д. МРТМС — 1, с 1.0 м.д. МРТМС — 2, с 3.0 м.д. эт. глик. раств. Na_2SiO_3 — 3, 3.0 м.д. водн. раств. Na_2SiO_3 — 4, 3.0 м.д. ТЕОС — 5.

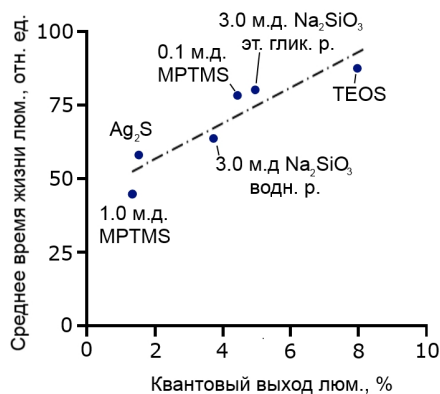


Рис. 2. Квантовые выходы и среднее время жизни люминесценции изученных образцов коллоидных КТ Ag_2S и core/shell $\text{Ag}_2\text{S}/\text{SiO}_2$.

В настоящее время разработка методов повышения квантового выхода (QY) люминесценции коллоидных квантовых точек (КТ) Ag_2S , обладающих размерно-зависимой люминесценцией в области 600 – 1300 нм интересна для приложений люминесцентной сенсорики и медицины. Ввиду интерфейсной природы рекомбинационной люминесценции КТ Ag_2S [1,2], наращивание оболочек из материалов с большой шириной запрещенной зоны, для локализации носителей заряда в ядре, и пассивации поверхностных дефектов, является удобным методом повышения QY их люминесценции. Мы сравнивали влияние различных подходов к наращиванию оболочек SiO_2 на люминесцентные свойства КТ Ag_2S синтезированных в этиленгликоле и покрытых 2-меркаптопропионовой кислотой. Для синтеза оболочек использовались распространенные прекурсоры SiO_2 : 3(меркаптопропил)триметоксисилан (МРТМС), метасиликат натрия (Na_2SiO_3) и тетраэтоксисилан (ТЕОС). Формирование оболочек производилось в две стадии: на первой осуществлялась замена лиганда внесением гидролизованного МРТМС, на второй стадии производили увеличение толщины оболочки внося прекурсоры SiO_2 : дополнительный МРТМС, раствор Na_2SiO_3 в воде, Na_2SiO_3 в этиленгликоле, гидролизованный ТЕОС. Образование оболочки подтверждали анализом ПЭМ изображений, сравнением размера КТ по данным ПЭМ с теоретической оценкой размеров из спектров поглощения, и по изменениям люминесцентных свойств. В большинстве подходов отмечалось увеличение QY люминесценции от 1.5 до 5

раз в полосе ИК рекомбинационной люминесценции. Увеличение QY люминесценции с формированием оболочки сопровождалось увеличением среднего времени жизни люминесценции от 58 нс до 87 нс. Применение дополнительного МРТМС не привело к наращиванию оболочки, а увеличение числа ионов серы спровоцировало рост ядер Ag_2S с образованием дополнительных дефектов и снижением QY люминесценции. Применение водного раствора Na_2SiO_3 привело к образованию дефективной оболочки. Наиболее высокие люминесцентные характеристики были получены в подходе с применением ТЕОС.

Работа поддержана грантом РФФИ № 20-32-90176.

1. O.V. Ovchinnikov, I.G. Grevtseva *et al.*, Opt. Quant Electron. **52**, 198 (2020).
2. O.V. Ovchinnikov, M.S. Smirnov *et al.*, Semiconductors **49**, 373 (2015).

ИК СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФОРМИРОВАНИЯ CORE/SHELL КВАНТОВЫХ ТОЧЕК $\text{Ag}_2\text{S}/\text{SiO}_2$

А.С. Перепелица*, О.В. Овчинников, М.С. Смирнов, Т.С. Кондратенко, И.Г. Гревцева,
С.В. Асланов, В.Ю. Хохлов

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

*e-mail: a-perepelitsa@yandex.ru

Коллоидные квантовые точки Ag_2S представляют практический интерес, обусловленный размерно-зависимой люминесценцией в NIR области спектра (600 – 1400 нм) и низкой токсичностью. Для эффективного применения КТ Ag_2S в биомедицинских приложениях и нанопотонике требуется разработка методик повышения квантового выхода люминесценции, в том числе и формирование структур ядро/оболочка различного состава (ZnS , CdS , SiO_2 и др.). При этом актуальным является вопрос контроля адгезии материала оболочки на поверхность КТ. Данная работа посвящена изучению закономерностей межмолекулярного взаимодействия поверхности КТ Ag_2S с оболочкой SiO_2 методами ИК спектроскопии. Объектами исследования являлись core/shell КТ $\text{Ag}_2\text{S}/\text{SiO}_2$. В качестве основы использовались КТ Ag_2S , пассивированные тиогликолевой кислотой (TGA) средним размером 2.5 нм. Формирование оболочки SiO_2 осуществляли в два этапа. На первом этапе производили замену молекул TGA на 3-меркаптопропилтриметоксисилан (MPTMS), что способствовало адсорбции молекул SiO_2 на поверхности КТ Ag_2S . На втором этапе добавляли водный раствор метасиликата натрия для увеличения толщины слоя SiO_2 .

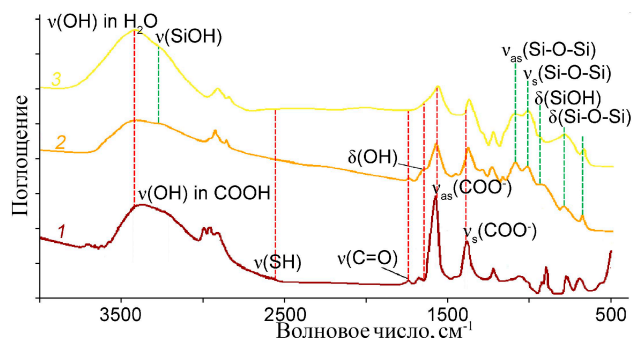


Рис. 1. ИК спектры: 1 — КТ $\text{Ag}_2\text{S}/\text{TGA}$; 2 — КТ $\text{Ag}_2\text{S}/\text{MPTMS}$; 3 — КТ $\text{Ag}_2\text{S}/\text{SiO}_2$.

(1578 cm^{-1} и 1386 cm^{-1}) и их смещение к 1567 cm^{-1} и 1388 cm^{-1} , что свидетельствует о наличии молекул TGA в свободном от взаимодействия с поверхностью КТ состоянии. Отсутствие пика в области колебаний S-H группы (2560 cm^{-1}) свидетельствует о взаимодействии кремнезема с интерфейсом КТ Ag_2S посредством тиольной группы.

При добавлении раствора метасиликата натрия в раствор КТ $\text{Ag}_2\text{S}/\text{MPTMS}$ (рис. 1, кривая 3) наблюдается рост интенсивности полос колебаний Si-O-Si и SiOH групп. Стоит отметить перераспределение интенсивности в полосах симметричных и ассиметричных валентных колебаний Si-O-Si групп. Интенсивность полосы в более низкочастотной области увеличивается по сравнению с высокочастотной полосой, на основании чего предположено, что полоса Si-O-Si в высокочастотной области связана с циклическим силоксаном. В то же время как полоса в низкочастотной области свидетельствует об удлинении Si-O-Si цепи. Таким образом, по ИК спектрам поглощения обнаружен рост толщины оболочки SiO_2 при добавлении метасиликата натрия, что подтверждается данными электронной микроскопии.

Работа выполнена при поддержке грантом РФФ (№ 19-12-00266).

ИК спектроскопия использована в качестве метода контроля процесса формирования оболочки из SiO_2 на КТ Ag_2S . По данным ИК спектроскопии установлено, что при добавлении MPTMS к коллоидному раствору $\text{Ag}_2\text{S}/\text{TGA}$ (рис. 1, кривые 1 и 2) возникают полосы с частотами, соответствующими колебаниям силоксановых (1103 cm^{-1} ($\nu_{\text{as}}(\text{Si-O-Si})$), 1023 cm^{-1} ($\nu_{\text{s}}(\text{Si-O-Si})$) и 800 cm^{-1} ($\delta(\text{Si-O-Si})$) и силанольных групп 3260 cm^{-1} ($\nu(\text{SiOH})$) и 928 cm^{-1} ($\delta(\text{SiOH})$). При этом снижается интенсивность полос, соответствующих колебаниям адсорбированной COO^- группы TGA

ТЕРАГЕРЦОВАЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКА МОНОКРИСТАЛЛОВ ГЕКСАФЕРРИТОВ БАРИЯ
 M-ТИПА $\text{Ba}_{0.2}\text{Pb}_{0.8}\text{Al}_x\text{Fe}_{12-x}\text{O}_{19}$ С ЗАМЕЩЕНИЯМИ Pb^{+2} И Al^{+3}

А.Г. Ахмед^{1,2*}, А.С. Прохоров^{1,3}, В. Анзин^{1,3}, Д. Винник⁴, Б.П. Горшунов¹, Л.Н. Алябьева¹

¹Московский физико-технический институт (государственный университет), Долгопрудный, Россия

²Университет Сохаг, Сохаг, Египет

³Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, Москва, Россия

⁴Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия

*e-mail: a.gamal@phystech.edu

Благодаря специфическим магнитным и диэлектрическим свойствам и низкой стоимости нелегированный гексаферрит бария $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ (BaM) является перспективным материалом при производстве современных электронных устройств и компонентов. Он широко используется в различных микроволновых устройствах, высококачественных магнитных накопителях, резонаторах и т. д. [1]. Важно отметить, что терагерцовые (ТГц) электродинамические свойства нелегированного и легированного BaM до сих пор не исследованы. С учетом того, что рабочие частоты современных электронных приборов приближаются к ТГц области, существует потребность в знании количественных характеристик данных соединений на ТГц частотах. В данной работе представлены результаты первых детальных исследований ТГц и инфракрасных (ИК) электродинамических свойств высококачественных монокристаллов $\text{Ba}_{0.2}\text{Pb}_{0.8}\text{Al}_x\text{Fe}_{12-x}\text{O}_{19}$ ($x = 0.0, 1.2, 3.0, 3.3$). С применением ИК Фурье-спектрометра и ТГц спектрометра с временным разрешением получены широкополосные (частоты $\nu = 8 - 8000 \text{ см}^{-1}$) спектры коэффициентов пропускания, отражения и диэлектрической проницаемости $\epsilon^*(\nu) = \epsilon_1(\nu) + i\epsilon_2(\nu)$ соединения при температурах $T = 4 \text{ К} - 300 \text{ К}$ и для двух поляризаций, когда вектор электрического поля \mathbf{E} зондирующего излучения параллелен ($\mathbf{E} \parallel c$) и перпендикулярен ($\mathbf{E} \perp c$) кристаллографической оси c . С использованием уравнений Френеля [2] были рассчитаны ТГц спектры коэффициента отражения. Полученные в результате широкополосные ($8 - 8000 \text{ см}^{-1}$) спектры отражения анализировались вместе с ТГц спектрами диэлектрической проницаемости, с применением модели независимых Лоренцианов для моделирования линий поглощения. В дальней ИК области ($80 - 1000 \text{ см}^{-1}$) наблюдался богатый набор линий поглощения для обеих поляризаций, которые на основании фактор-группового анализа были отнесены к колебаниям решетки (фононам) [3]. В суб-ТГц и ТГц диапазонах частот ($8 - 100 \text{ см}^{-1}$) наблюдались линии поглощения, являющиеся проявлением электронных переходов между уровнями тонкой структуры ионов Fe^{+2} [4]. Нами предложена модель расщепления электронных термов, учитывающая тригональные искажения кристаллического поля [5] при понижении симметрии тетраэдрических позиций $4f_1$ и $4e$ иона Fe^{+2} . Кроме того, было исследовано влияние на диэлектрический отклик исследуемых соединений замещения железа алюминием в различных концентрациях ($x = 0.0, 1.2, 3.0$ и 3.3). При комнатной температуре для поляризации $\mathbf{E} \perp c$ с увеличением концентрации Al от 0 до 3.3 частоты резонансных линий поглощения смещаются в сторону более высоких частот. Результаты, полученные в данной работе, могут быть использованы при разработке недорогих материалов с высокой диэлектрической проницаемостью (порядка 30) на терагерцовых частотах, перспективных для разработки различных электронных устройств.

Измерения терагерцового отклика выполнены при поддержке Российского научного фонда, грант 19-72-00055, температурные исследования инфракрасного отклика выполнены при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант 20-32-90034. Расчеты проведены при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, государственное задание 1740-20.

1. R. C. Pullar, *Progress in Materials Science* **57**, 1191, (2012).
2. M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics*. 7th ed. Cambridge University Press (1999).
3. A. S. Mikheykin *et al.*, *European Physical Journal B* **87**, 232, (2014).
4. L.N. Alyabyeva *et al.*, *New Journal of Physics* **21**, 063016 (2019).
5. J.P. Mahoney *et al.*, *The Journal of Chemical Physics* **53**, 4286-90, (1970).

ТЕРАГЕРЦОВАЯ МЯГКАЯ МОДА В ГЕКСАФЕРРИТЕ M -ТИПА $Ba_{1-x}Pb_xFe_{12}O_{19}$

А.Г. Ахмед^{1,2*}, А.С. Прохоров^{1,3}, В.Б. Анзин^{1,3}, В.А. Абалмасов⁴, А.А. Буш⁵, Б.П. Горшунов¹,
Л.Н. Алябьева¹

¹Московский национальный исследовательский университет (МФТИ), Долгопрудный, Россия

²Университет Сохаг, Сохаг, Египет

³Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия

⁴Институт автоматизации и электрометрии СО РАН, Новосибирск, Россия

⁵Российский технологический университет МИРЭА, Москва, Россия

*e-mail: a.gamal@phystech.edu

Гексаферриты являются перспективными материалами для использования в различных электронных приборах, таких, например, как накопители магнитной памяти, в качестве материалов для поглощающих покрытий, радиаторов и т. д. Большой класс гексаферритов с общей формулой $MFe_{12}O_{19}$ ($M = Ba, Pb, Sr, Ca$) объединяется названием «гексаферриты M -типа». Среди этого класса одним из наиболее популярных является гексаферрит бария, $BaFe_{12}O_{19}$ (BaM), который широко используется в микроволновых устройствах и поглотителях, датчиках, резонаторах и т. д. [1]. Замечательная особенность BaM состоит в том, что замещение элементов в его кристаллической структуре может приводить к гигантским изменениям физических свойств [2]. Как результат, открываются широкие перспективы для практического применения материала в различных областях электроники, например, в космических телекоммуникациях и т. д. В такой ситуации чрезвычайно востребованными являются знания диэлектрических характеристик как чистого, так и легированного BaM на частотах суб-терагерцового и терагерцового диапазонов. Поскольку таковые в настоящее время в литературе практически отсутствуют, целью настоящего исследования было проведение первых детальных измерений и анализа низкоэнергетического (терагерцового) диэлектрического отклика гексаферрита бария M -типа с замещением бария свинцом. Керамические образцы составов $Ba_{1-x}Pb_xFe_{12}O_{19}$ ($x = 0.0, 0.05, 0.10, 0.15, 0.20, 0.25$ и 0.30) были синтезированы с помощью метода твердофазных реакций. С применением терагерцового спектрометра с временным разрешением нами измерены спектры комплексной диэлектрической проницаемости $\epsilon^*(\nu) = \epsilon_1(\nu) + i\epsilon_2(\nu)$ в диапазоне частот $8 - 70 \text{ см}^{-1}$ ($0.24 - 2.1 \text{ ТГц}$) при температурах $300 \text{ К} - 5 \text{ К}$. В данном частотном диапазоне наблюдается широкая полоса поглощения, происхождение которой связано нами с электронными переходами между подуровнями основного состояния 5E ионов железа Fe^{2+} в тетраэдрической координации [3]. Полученные спектры были промоделированы с использованием независимых Лорентцианов для описания линий поглощения, что позволило получить температурные зависимости параметров каждой линии — резонансных частот, коэффициентов затухания, диэлектрических вкладов и сил осциллятора. Вдобавок, на терагерцовых частотах нами обнаружена линия поглощения с необычным температурным поведением её параметров. Так, частота линии уменьшается при охлаждении от $\sim 35 \text{ см}^{-1}$ при 300 К до 10 см^{-1} при 10 К . Наряду со значительным смягчением частоты, наблюдается уменьшение силы осциллятора линии. Аналогичные «мягкие моды» наблюдаются также в монокристаллах гексаферрита M -типа, как с такой же концентрацией свинца $x(Pb) = 0.1$, так и с $x(Pb) = 0.80$ [4,5]. Установлено, что температурное поведение частот $\nu(T)$ обнаруженных мягких мод не может быть описано известной для сегнетоэлектриков зависимостью Кохрана $\nu^2 \sim (T - T_C)$, но подчиняется степенной зависимости $\nu^4 \sim (T - T_C)$. Мы полагаем, что природа мод может быть связана с туннелированием ионов свинца между минимумами соответствующего локализирующего потенциала.

Измерения терагерцового отклика выполнены при поддержке Российского научного фонда, грант 19-72-00055, температурные исследования инфракрасного отклика выполнены при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант 20-32-90034.

1. R.C. Pullar, *Progress in Material Science* **57**, 1191, (2012).
2. E.A. Gorbachev *et al.* *Materials Today* **32**, 13, (2019)
3. L.N. Alyabyeva *et al.* *New Journal of Physics* **21**, 063016, (2019).
4. L.N. Alyabyeva *et al.* 43rd International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz waves (IRMMW-THz). Nagoya: IEEE catalog o. CFP 181MM-ART; p. 1–1, (2018).
5. A.G. Ahmed *et al.* *Journal of Alloys and Compounds* **863**, 155462, (2020).

ДИНАМИКА ПРЕДЕЛЬНО КОРОТКИХ ОПТИЧЕСКИХ ИМПУЛЬСОВ В ФОТОННОМ КРИСТАЛЛЕ СО СВЕРХРЕШЕТКОЙ

А.М. Белоненко*, Ю.В. Двужилова, И.С. Двужилов, М.Б. Белоненко
Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия
*e-mail: arrow.doctor29@gmail.com

Одной из ключевых задач нелинейной оптики, нанофотоники и наноэлектроники и, как следствие, основанных на них новейших достижений науки и техники является уменьшение размеров структурных элементов устройств, а также создание новых материалов, с помощью которых будет возможно управлять параметрами оптических сигналов, а также создавать на их основе системы передачи, обработки и хранения данных. Одними из подходящих материалов являются так называемые сверхрешетки, которые представляют собой структуры, в которых помимо решетки, есть искусственно созданный потенциал (с периодом, существенно превышающим период решетки), действующий на электроны. Таким образом, имеется возможность контроля зонного спектра.

Одним из методов построения сверхрешеток является создание фотонного кристалла, с заданными параметрами периода и глубины модуляции показателя преломления. Уникальные свойства сверхрешеток привели к широким теоретическим исследованиям и попыткам их использования в нелинейно-оптических устройствах. Одним из основных и наиболее перспективных направлений в этой сфере, на наш взгляд, является исследование распространения предельно коротких оптических импульсов в сверхрешетках в фотонном кристалле [1, 2].

На основании уравнений Максвелла, в калибровке Кулона, описывающих динамику предельно коротких оптических импульсов в твердом теле с трехмерной сверхрешеткой, образованной за счет сильного туннелирования электронов в квантовых ямах вдоль одной оси, мы получили феноменологическое уравнение в форме классического 2 + 1-мерного уравнения синус-Гордон с периодически модулированными коэффициентами. Электроны рассматривались классически в формализме кинетического уравнения Больцмана [3].

С использованием методов математического моделирования получена динамика трехмерных предельно коротких оптических импульсов в фотонном кристалле со сверхрешеткой, который имеет пространственно модулированный показатель преломления. Установлено устойчивое распространение таких импульсов, а также зависимость эволюции этих импульсов от параметров фотонного кристалла (период и глубина модуляции показателя преломления).

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Администрации Волгоградской области в рамках научного проекта № 19-43-340005.

1. Е. М. Epshtein, *Fiz. Tverd. Tela* **19**, 3456 (1977).
2. А. А. Ignatov and Yu. A. Romanov, *Fiz. Tverd. Tela* **17**, 3388 (1975).
3. М.В. Belonenko, N.E. Meshcheryakova, *Journal of Russian Laser Research* **29**, 1, 49, (2008).

РЕНТГЕНОВСКАЯ РЕФЛЕКТО-ИНТЕРФЕРОМЕТРИЯ НА БАЗЕ ЛАБОРАТОРНОГО МИКРОФОКУСНОГО ИСТОЧНИКА

М.А. Воеводина^{1*}, С.С. Лятун¹, А.А. Баранников¹, И.И. Лятун¹, И.И. Снигирева²,
А.А. Снигирев¹

¹Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, Россия

²Европейский центр синхротронного излучения, Гренобль, Франция

*e-mail: voevodina.mariia@gmail.com

Метод рентгеновской рефлектометрии (РР) активно используется для исследования тонкопленочных и многослойных систем. Однако, классический метод РР имеет целый ряд ограничений, связанных с высокими требованиями к качеству поверхности, а также геометрическим параметрам исследуемых образцов. Использование составных преломляющих линз (СПЛ) на лабораторных и синхротронных источниках открывает новые возможности для развития новых когерентно-совместимых методов, включая рефлектометрию [1,2].

В данной работе продемонстрирован метод рентгеновской рефлектометрии (РРИ) на базе лабораторного источника рентгеновского излучения для исследования тонких пленок с использованием составных преломляющих линз. Основная идея предложенного метода состоит в использовании упрощенной экспериментальной схемы, когда сфокусированный рентгеновский пучок, отраженный от параллельных плоских поверхностей образца, создает интерференционную картину в широком угловом диапазоне. Благодаря этому интерференционная картина может быть получена за один снимок, без необходимости проведения процедуры сканирования путем наклона образца или детектора. Следует отметить, что метод РРИ имеет высокое пространственное разрешение, которое достигается благодаря использованию преломляющей рентгеновской оптики.

Возможности метода были исследованы с использованием лабораторного микрофокусного источника рентгеновского излучения MetalJet компании Excellium, входящего в состав уникальной научной установки (УНУ) «Научно-образовательный тренировочный комплекс подготовки и проведения синхротронных исследований» БФУ им. И. Канта на характеристической линии GaK_{α} — 9,25 кэВ. Серия интерференционных картин была получена для тестового образца — свободно висящей мембраны Si_3N_4 толщиной 500 нм. Полученные данные хорошо согласуются с заявленными характеристиками.

Предложенный метод рентгеновской рефлекто-интерферометрии открывает широкие возможности для анализа тонкопленочных и многослойных систем. Данный метод может быть осуществлен как на синхротронных, так и на лабораторных микрофокусных источниках [3]. Кроме того, обеспечивает преимущества по сравнению с классической рентгеновской рефлектометрией, так как позволяет проводить исследования с принципиально новым пространственным и временным разрешением.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда (Проект № 19-72-30009).

1. A. Snigirev, V. Kohn, I. Snigireva *et al.*, Nature **384**, 49 (1996).
2. A. Snigirev, I. Snigireva, Springer Series in Optical Sciences **137**, 255 (2008).
3. S. Lyatun *et al.*, Journal of synchrotron radiation **26.5**, 1572 (2019).

ИНДИКАТРИСА РАССЕЯНИЯ ГЕМОГЛОБИНА

В.В. Гибизова*, А.И. Исаева, Э. Майков

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

*e-mail: gibizova@physics.msu.ru

В современном мире диагностика и лечение различных заболеваний являются приоритетными направлениями. Большинство методов связано с анализами крови, в связи с чем интересным является исследование составляющих её компонентов. В данной работе в качестве объекта изучения был выбран глобулярный белок гемоглобин, который отвечает за транспортировку, хранение и обмен кислорода.

Исследования были проведены на установке «Photocor Complex», длина волны лазера составила 647 нм, а мощность 25 мВт, все эксперименты были проведены при комнатной температуре 20°C. Углы рассеяния изменялись от 60° до 130° с шагом в 10°. В результате были получены графики зависимости интенсивности рассеянного света от угла в полярных координатах — индикатрисы рассеяния света для 4 водных растворов гемоглобина со следующими концентрациями 0.05 мг/мл до 0.35 мг/мл с шагом 0.1 мг/мл. В дальнейшем графики были обработаны с помощью метода ассиметрии и получено значение молекулярной массы гемоглобина, которая составила: 67644 ± 6564 г/моль, что хорошо согласуется с литературными данными [1,2]. В работе произведена оценка коэффициента ассиметрии, которая показала, что при увеличении концентрации гемоглобина в водном растворе происходит изменение его формы с клубков на палочки, т.е. гемоглобин вытягивается и стремится к паталогической форме [3].

Исследование выполнено при поддержке Междисциплинарной научно-образовательной школы Московского университета «Фотонные и квантовые технологии. Цифровая медицина».

1. Ю.А. Кривенцев, Р.А. Бисалиева, А.И. Носков, Гемоглобины человека. — Вестник АГТУ, **6** (2007).
2. https://www.sigmaaldrich.com/content/dam/sigma-aldrich/docs/Sigma/Product_Information_Sheet/2/h7379pis.pdf
3. Xuejin Li, Bruce Caswell, and George Em Karniadakis, Biophysical Journal **103**, 6 (2012).

ПРОЯВЛЕНИЕ ПЛЕКСИТОННОЙ СВЯЗИ В ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВАХ АССОЦИАТОВ КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК $Zn_{0.5}Cd_{0.5}S$ И НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА

И.Г. Гревцева*, Т.А. Чевычелова, В.Н. Дерепко, О.В. Овчинников, М.С. Смирнов, А.С. Перепелица

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

*e-mail: grevtseva_ig@inbox.ru

Гибридная ассоциация плазмонных наночастиц (НЧ) и полупроводниковых коллоидных квантовых точек (КТ) представляет большой практический интерес для различных приложений люминесцентной сенсорики [1]. Формирование ассоциатов обеспечивает плазмон-экситонное взаимодействие, которое может быть обусловлено изменением спектрального контура (эффект Фано и/или расщепление Раби), а также усиление люминесценции КТ (эффект Перселла) [2].

В данной работе представлены экспериментальные данные, демонстрирующие трансформацию люминесцентных свойств КТ $Zn_{0.5}Cd_{0.5}S$ в ближнем поле сферических НЧ Au. Изменения силы плазмон-экситонной связи достигали за счет формирования оболочки SiO_2 толщиной 3 и 10 нм на поверхности НЧ Au (далее $Au@SiO_2$).

Для смесей КТ $Zn_{0.5}Cd_{0.5}S$ с НЧ $Au@SiO_2$ результирующий спектр экстинкции света не имеет значительных трансформаций (сдвиг, провал, асимметрия и т.д.) (рис. 1 (а)).

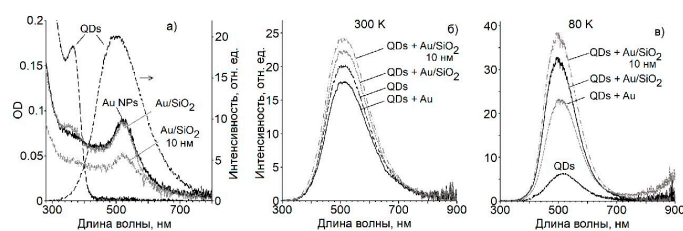


Рис. 1. Спектры экстинкции света КТ $Zn_{0.5}Cd_{0.5}S$, НЧ $Au@SiO_2$ с толщиной оболочки 3 нм и 10 нм, а также и их смесей (а). Спектры люминесценции КТ $Zn_{0.5}Cd_{0.5}S$ и их смесей с НЧ Au, записанные при температуре 300 К (б) и 77 К (в).

ее уменьшение (рис. 1(в)). Снижение температуры до 77 К, показало увеличение эффекта разгорания люминесценции в 2 – 4 раза для всех типов используемых смесей. При этом по мере увеличения толщины оболочки интенсивность люминесценции возрастала. Таким образом, обнаруженные эффекты проявления взаимодействия между КТ $Zn_{0.5}Cd_{0.5}S$ и НЧ Au обусловлены изменением плазмон-экситонной связи между компонентами за счет различной толщины оболочки SiO_2 . При этом наблюдаемая картина усложнена электрон-фононными взаимодействиями в ассоциатах.

Работа выполнена в рамках гранта Президента РФ для государственной поддержки ведущих научных школ РФ, проект НШ-2613.2020.2.

1. L. Tang *et al.* Optics express **21**(10), 11095 (2013).
2. Yi Luo *et al.* Nano Research **12**, 2164 (2019).

Пик плазмонного резонанса в спектре экстинкции света НЧ $Au@SiO_2$ с толщиной оболочки SiO_2 как 3 нм, так и 10 нм имел значительное перекрытие со спектром люминесценции КТ $Zn_{0.5}Cd_{0.5}S$, что соответствует случаю проявления эффектов плазмон-экситонного взаимодействия в люминесцентных свойствах КТ CdS.

При $T = 300$ К для смеси КТ $Zn_{0.5}Cd_{0.5}S$ с НЧ $Au@SiO_2$ наблюдали разгорание интенсивности люминесценции КТ (рис. 1(б)), а для смесей с НЧ Au

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ПРОЯВЛЕНИЯ ФОРМИРОВАНИЯ CORE/SHELL НАНОЧАСТИЦ Au/SiO₂

И.Г. Гревцева^{1*}, Т.А. Чевычелова¹, Э.И. Еникеев², В.Н. Дерепко¹, А.С. Перепелица¹

¹Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

²Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

*e-mail: grevtseva_ig@inbox.ru

Интерес к оптике металлических наночастиц (НЧ) и гибридных структур на их основе вызван перспективой решения ряда фундаментальных и научно-прикладных проблем в биологии, медицине, химии, оптоэлектронике, фотокатализе и т.д. [1,2]. Вариация структурных свойств НЧ и наличие диэлектрической оболочки обеспечивает спектральный резонанс и межчастичное расстояние при формировании плазмон-экситонных наноструктур с квантовыми точками/молекулами красителей и, соответственно, различные режимы их плазмон-экситонного взаимодействия.

В данной работе представлены результаты, демонстрирующие влияние наличия и толщины оболочки диоксида кремния (SiO₂) на положения пика экстинкции сферических НЧ золота (далее НЧ Au).

Спектрально установлен длинноволновый сдвиг максимума спектра экстинкции света от 520 нм к 538 нм по мере увеличения толщины оболочки SiO₂ от монослоя до 10 нм (рис. 1(a)).

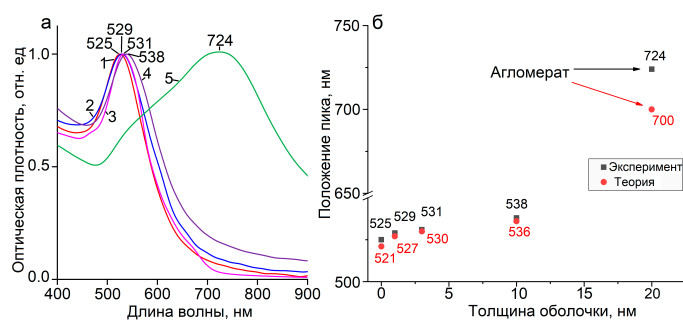


Рис. 1. Экспериментальные спектры экстинкции света НЧ Au (1); core/shell Au/SiO₂ с толщиной оболочки 1 нм (2), 3 нм (3); 10 нм (4); 20 нм (5) — (а). Экспериментальная и теоретическая зависимости положения максимума экстинкции света НЧ Au от толщины оболочки SiO₂ — (б).

SiO₂ толщиной ~ 20 нм может приводить к формированию в спектре экстинкции максимума в области 700 – 750 нм. Непосредственное влияние на положение максимума экстинкции оказывает взаимное расстояние между НЧ димера (вытянутость эллипсоида).

Работа выполнена в рамках гранта Президента РФ для государственной поддержки ведущих научных школ РФ, проект НШ-2613.2020.2.

1. J.Y. Lee *et. al.*, *Toxicology Letters* **209**, 51 (2012).

2. R.G. Chaudhuri *et. al.*, *Chemical Reviews* **112**, 2373 (2012).

В экспериментальных спектрах экстинкции света core/shell НЧ Au@SiO₂ с толщиной оболочки 20 нм наблюдается формирование максимума экстинкции при 724 нм (рис. 1(a), кривая 5). Такая значительная трансформация спектральных свойств core/shell Au/SiO₂ имеет аномальный характер и может быть обусловлена агрегацией НЧ Au и формированием общей оболочки SiO₂ на агломератах. Согласно теоретическим расчетам в рамках эллипсоидальной модели, формирование агломератов размером в две сферические НЧ Au средним диаметром 20 нм с общей оболочкой

СПЕКТРОСКОПИЯ ИТТРИЕВОГО СКАНДАТА, ЛЕГИРОВАННОГО ИОНОМ ТУЛИЯ

О.К. Алимов, Е.А. Добрецова*, В.В. Кашин, С.А. Кутовой, С.Я. Русанов, В.Б. Цветков

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия

*e-mail: elenadobretsova89@gmail.com

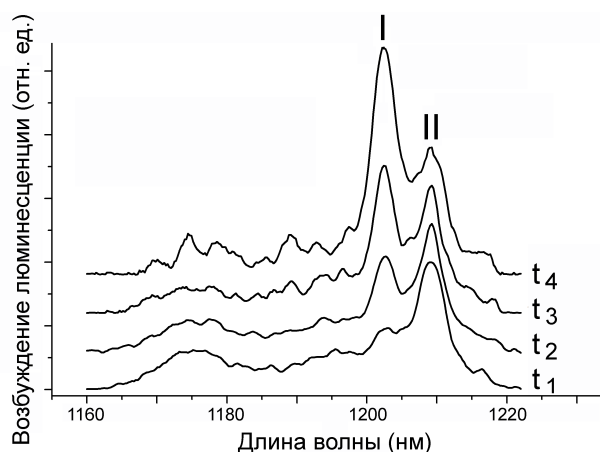


Рис. 1. Спектр возбуждения люминесценции $\text{Tm}^{3+}:\text{YScO}_3$ (задержки $t_1 = 0.6$ мс, $t_2 = 6$ мс, $t_3 = 10$ мс, $t_4 = 12$ мс).

волокна приводит к синтезу образцов с малой деформацией, а высокое отношение площади поверхности к объему способствует более эффективному охлаждению после лазерной термообработки. Скандат иттрия обладает разупорядоченной структурой в ряду твердых растворов $\text{Y}_2\text{O}_3 - \text{Sc}_2\text{O}_3$ [3] поэтому данный материал имеет совершенно новые оптические свойства, а следовательно должен обладать другими спектрально-генерационными характеристиками. На основе кристалла YScO_3 был реализован неодимовый лазер [4]. Благодаря уширенным спектральным линиям люминесценции активные среды с разупорядоченной структурой являются перспективным при создании ультрабыстрых лазеров, а также в качестве усилителей чипированных лазеров [5,6].

В данной работе проведены спектрально-кинетические исследования кристаллических волокон $\text{Tm}^{3+}:\text{YScO}_3$. Методами лазерной спектроскопии (селективное лазерное возбуждение и селективная регистрация люминесценции) было обнаружено два типа оптических центров Tm^{3+} (рис. 1). По-видимому, природа формирования оптических центров тулия обусловлена понижением порядка локальной симметрии при замещении Y^{3+} ионом Tm^{3+} или присутствием Tm^{3+} в октаэдрических пустотах биксбиитовой структуры [2].

1. J. Clark *et al.*, Journal of Solid State Chemistry **23**, 129 (1978).
2. O. Alimov *et al.*, Crystal Growth & Design **20**, 4593 (2020).
3. A.A. Kaminskii, Laser crystals: their physics and properties — Springer (2013).
4. К.С. Багдасаров, Доклады Академии Наук СССР **224**, 798 (1975).
5. W. Liu *et al.*, Crystal Growth & Design **19**, 3704 (2019).
6. W. Liu *et al.*, Crystal Growth & Design **20**, 4678 (2020).

Скандат иттрия YScO_3 является полиморфным соединением. Высокотемпературная модификация имеет структурный тип биксбиита и кристаллизуется в кубической пространственной группе $I3a$ [1], подобно оксидам иттрия и скандия. Ранее в работе [2] для получения кубического иттриевого скандата был разработан метод минипьедестала с лазерным нагревом. Метод характеризуется высокой температурой нагрева и последующим быстрым охлаждением, что препятствует фазовому переходу в другую полиморфную модификацию в процессе роста. Были синтезированы кристаллы YScO_3 в форме волокна. Малое поперечное сечение

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФТОРИДОВ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $BaF_2 - SrF_2 - ErF_3$

Е.А. Добрецова*, В.Ю. Жмыхов, С.В. Кузнецов, В.Б. Цветков, В.А. Конюшкин, А.Н. Накладов,
П.П. Федоров

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия

*e-mail: elenadobretsova89@gmail.com

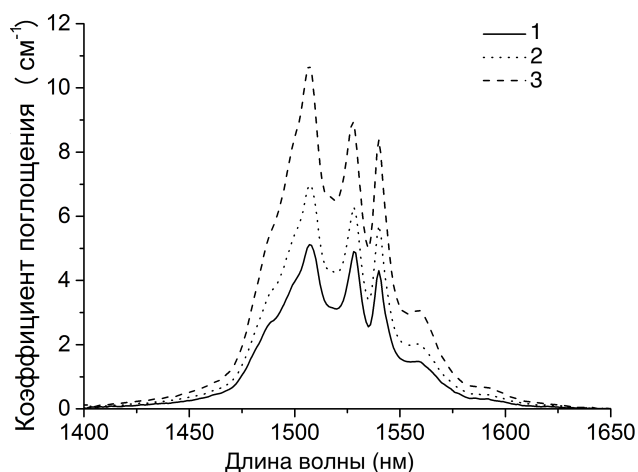


Рис. 1. Спектры поглощения монокристаллов твердых растворов $BaF_2 - SrF_2 - ErF_3$ с содержанием Er: 5 мол.% (№ 1), 7 мол.% (№ 2), 10 мол.% (№ 3).

Монокристаллы твердых растворов со структурой флюорита MF_2 ($M = Ca, Sr, Ba$), легированные редкоземельными ионами, хорошо известны в качестве активных сред лазеров[1]. К настоящему времени разработаны эффективные лазерные среды с КПД генерации более 80% на основе трехкомпонентных разупорядоченных твердых растворов со структурой флюорита [2,3]. Отдельного внимания заслуживают материалы, обладающие возможностью генерации в инфракрасном диапазоне спектра, в том числе, легированные ионами тулия, эрбия и гольмия [4-8]. В настоящей работе представлены результаты спектрально-кинетических исследований монокристаллов твердых растворов $BaF_2 -$

$SrF_2 - ErF_3$, полученных методом вертикально направленной кристаллизации (методом Бриджмена) [9]. Зарегистрированы спектры поглощения монокристаллов твердых растворов $BaF_2 - SrF_2 - ErF_3$ с содержанием Er^{3+} 5 – 10 мол.% в широкой спектральной области при комнатной температуре (рис. 1). На основании экспериментальных спектров поглощения рассчитаны параметры Джадда-Офельтаи сделан вывод об изменении структуры ближайшего окружения примесных ионов при увеличении содержания Er^{3+} .

1. A.A.Kaminskii, Laser crystals: their physics and properties. — Springer(2013).
2. P. Fedorov, Compositions of Congruently Melting Three-Component Solid Solutions Determined by Finding Acnodes on Ternary-System Fusion Surfaces, in Growth of Crystals. — Springer (1996).
3. Т.Т. Басиеви др., Квантовая электроника **37**, 934 (2007).
4. J. Sulc *et al.*, Solid State Lasers XXIII: Technology and Devices, 895925 (2014).
5. M. Nemes *et al.*, Optics Letters **42**,1852 (2017).
6. A. Lyapin *et al.*, Journal of Luminescence **167**, 120(2015).
7. P. Fedorov *et al.*, Cellulose **26**, 2403(2019).
8. A. Bitam *et al.*, Optical Materials **82**, 104 (2018).
9. П.П. Федоров и др., Доклады РАН, **369**, 217(1999).

ФОРМИРОВАТЕЛИ РЕНТГЕНОВСКОГО ПУЧКА НА ОСНОВЕ ЭЛЕМЕНТОВ
ПРЕЛОМЛЯЮЩЕЙ ОПТИКИ ДЛЯ КОГЕРЕНТНЫХ ИСТОЧНИКОВ ИЗЛУЧЕНИЯД.А. Зверев^{1*}, И.И. Снигирева², С.М. Кузнецов³, В.А. Юнкин³, А.А. Снигирев¹¹Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия²Европейский источник синхротронного излучения ESRF EBS, Гренобль, Франция³Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН (ИПТМ РАН),
Черноголовка, Россия

*e-mail: dzverev@kantiana.ru

Стремительное развитие источников синхротронного излучения, подразумевающее увеличение их спектральной яркости, улучшение когерентных и коллимационных свойств генерируемого рентгеновского пучка стимулирует работы по созданию рентгеновской оптики нового поколения, оптические свойства которой выходят далеко за рамки простых функций коллимации и фокусировки. Новая оптика способна формировать амплитуду и фазу волнового фронта пучка практически с полной свободой, позволяя раскрыть весь потенциал яркого, направленного синхротронного излучения. Такие формирователи пучка могут быть эффективно использованы как в современных когерентных методах исследования, так и в задачах диагностики источника, транспорта и подготовки рентгеновского пучка.

Одним из наиболее ярких примеров формирователей пучка является предложенный в настоящей работе рентгеновский преломляющий параболический аксикон [1]. При когерентном освещении параболический аксикон генерирует пучок Бесселя, распространяющийся вдоль оптической оси, а также кольцевой пучок, формируемый в дальнем поле. Такие оптические преобразования могут значительно упростить некоторые существующие оптические схемы современных рентгеновских методов исследования или даже привести к совершенно новым экспериментальным схемам на основе когерентных источников излучения. Так, например, в работе были предложены методы диагностики источника и юстировки оптических систем, а также разработаны новые подходы субмикронной фокусировки и фазово-контрастной микроскопии с использованием уникальных оптических свойствах параболического аксикона [2].

В качестве еще одного примера также стоит отметить важный для практического применения тип формирователей рентгеновского пучка, способных преобразовать падающее когерентное излучение в периодическое распределение интенсивности в пространстве. Такие оптические преобразователи называются рентгеновскими интерферометрами. В данной работе продемонстрированы двухлинзовые и многолинзовые интерферометры на основе преломляющей оптики [3,4]. При когерентном освещении такие линзовые системы создают множество взаимно когерентных пучков формирующих устойчивую интерференционную картину полос в области, где они перекрываются. Рассматриваемые интерферометры могут быть использованы в широком диапазоне энергий рентгеновского излучения (то 2 до 200 кэВ), при этом область их применения не ограничивается методами интерферометрии и может быть также расширена в область диагностики источника, подготовки и формирования рентгеновского пучка. Более того, предложенные интерферометры открывают новые возможности для развития подходов фазово-чувствительной визуализации [5].

Работа выполнена при частичной поддержке проекта РФФИ № 19-29-12043.

1. D. Zverev *et al.*, *Opt. Express* **25**, 28469 (2017).
2. D. Zverev *et al.*, *Proc. SPIE* **11493**, 114930K (2020).
3. A. Snigirev *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 064801 (2009).
4. A. Snigirev *et al.*, *Opt. Express* **22**, 25842 (2014).
5. D. Zverev *et al.*, *Opt. Express* **28**, 21856 (2020).

РАЗРАБОТКА МЕТОДА МИНИМИЗАЦИИ ВЛИЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ГЛИТЧЕЙ

Н.Б. Климова^{1*}, О.М. Ефанов², А.А. Снигирев¹¹Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия²Центр лазерных исследований на свободных электронах (CFEL), Гамбург, Германия*e-mail: nklimova@kantiana.ru

Строительство синхротронных источников 4-го поколения позволит получать полностью когерентный высокоэнергетический пучок рентгеновского излучения с предельно малым эмиттансом и высокой яркостью. Использование эффективной преломляющей оптики уже на выходе излучения («front-end») необходимо, чтобы реализовать все возможности и полностью раскрыть потенциал новых дифракционно-ограниченных источников. Рентгеновские преломляющие линзы (СПЛ) [1] удовлетворяют вышеуказанным требованиям. Тем не менее, алмазные СПЛ, будучи универсальными для широкого спектра приложений, имеют особенность для применения в спектроскопических экспериментах, что было отмечено в работах [2,3], где сообщалось о наблюдении эффекта «дифракционных потерь» или «рентгеновских глитчей» («glitch») [4].

Хотя глитчи всегда присутствуют в спектре пропускания монокристаллических материалов, на основе полученных данных были сделаны попытки разработать подходы минимизации или, в идеале, избавления от глитчей. В работах [5,6] получены результаты по исследованию влияния размера, расходимости сфокусированного пучка и ориентации самой линзы на положения и интенсивность глитчей. Обнаружено [5], что пространственное положение падающего рентгеновского пучка (относительно апертуры линзы) оказывает наиболее сильное влияние. В то же время было установлено, что глитчи не влияют на размер или форму фокального пятна, а только вызывают потемнение фокального пятна при определенных значениях энергии. Несмотря на то, что эффект глитчей, в основном, наблюдался в СПЛ, это универсальный эффект, который может повлиять на любую монокристаллическую рентгеновскую оптику в геометрии пропускания, т.е. когда некоторые кристаллические плоскости будут удовлетворять условию дифракции (при разных энергиях), и часть луча будет дифрагировать в каком-то другом направлении, это приведет к нежелательной потере интенсивности первичного пучка.

В результате продолжения исследований в данном направлении были выяснены и уточнены особенности этого эффекта для возможностей правильной и точной оценки эксплуатационных параметров линз при использовании на современных синхротронных источниках. Была разработана теоретическая модель, которая позволяет предсказывать положения и интенсивность глитчей, при известной кристаллографической ориентации линзы относительно рентгеновского пучка. Кроме того, был предложен метод избавления от глитчей на каждой энергии при помощи небольшого отворота линзы, который рассчитывается на основе созданной программы. Уникальность программы состоит в том, что она может определить ориентацию линзы исключительно из спектра глитчей на основе применяемого аналитического подхода, который позволяет уточнить ориентацию кристалла.

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 19-72-30009.

1. Snigirev A. *et al.*, Nature **384** №. 6604. С. 49 (1996).
2. M. Polikarpov, H. Emerich, N. Klimova *et al.*, Proc. of SPIE **10235** (2017).
3. M. Polikarpov, H. Emerich, N. Klimova *et al.*, Phys. status solidi (b) **255**, 1700229 (2018).
4. G. Turiyanskii, S. Gizha, V. Senkov *et al.*, JETP Lett. **104**, 417 (2016).
5. Q. Zhang, M. Polikarpov, N. Klimova *et al.*, AIP Conf. Proc. **2054**, 060007 (2019).
6. Q. Zhang, M. Polikarpov, N. Klimova *et al.*, J. Synch. Rad. **26**(1), 109 (2019).

СИНТЕЗ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КРИСТАЛЛОВ ГЕПТАТАНТАЛАТА ТЕРБИЯ TbTa₇O₁₉

Н.Н. Кузьмин^{1,2,3*}, К.Н. Болдырев^{2,3}, В.А. Рассулов⁴, Е.А. Волкова¹, С.Ю. Стефанович¹,
В.В. Мальцев¹

¹Московский государственный университет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

²Институт спектроскопии РАН, Троицк, Москва, Россия

³Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет),
Долгопрудный, Россия

⁴ФГБУ «Всероссийский научно-исследовательский институт минерального сырья
им. Н.М. Федоровского», Москва, Россия

*e-mail: kolyanfclm@gmail.com

В настоящее время значительный интерес вызывают оксидные соединения с редкоземельными элементами. К ним, в частности, относятся редкоземельные гептатанталаты $R\text{Ta}_7\text{O}_{19}$ ($R = \text{Y, La-Nd, Sm-Tb, Tm}$), имеющие пространственную группу (пр. гр.) $P6\bar{c}2$ [1]. Первым из этого семейства в 1980-х годах раствор-расплавной кристаллизацией с использованием растворителя $\text{Li}_2\text{V}_4\text{O}_7$ получен кристалл $\text{NdTa}_7\text{O}_{19}$ [2], его кристаллическая структура определена в работе [3]. Несколько позже описано получение $\text{NdTa}_7\text{O}_{19}$ с использованием растворителя $\text{K}_2\text{Mo}_3\text{O}_{10} - \text{V}_2\text{O}_5$ [4]. Достоинством последней системы является то, что в ней существует монофазная область кристаллизации $\text{NdTa}_7\text{O}_{19}$.

В настоящей работе кристаллы тербиевого гептатанталата $\text{TbTa}_7\text{O}_{19}$ получены методом спонтанной кристаллизации из раствора-расплава на основе $\text{K}_2\text{Mo}_3\text{O}_{10} - \text{V}_2\text{O}_5$ [4]. Концентрация растворителя составляла 75 мас.%, соотношение кристаллообразующих оксидов $\text{Tb}_2\text{O}_3/\text{Ta}_2\text{O}_5$ соответствовало их стехиометрическому отношению в формуле гептатанталата (1:7), а $\text{K}_2\text{Mo}_3\text{O}_{10}/\text{V}_2\text{O}_5$ — 1:1 (в мольных долях). В результате получены пластинчатые кристаллы размером до 0,8 мм. Структура Tb гептатанталата была решена и уточнена методом Ритвельда в рамках пр. гр. $P6\bar{c}2$, параметры элементарной ячейки: $a = b = 6.2187(9) \text{ \AA}$, $c = 19.9321(3) \text{ \AA}$, $V = 667.55(2) \text{ \AA}^3$. В среднем и дальнем инфракрасном диапазоне получены спектры нарушенного полного внутреннего отражения, найдено разложение полного колебательного представления. В спектрах наблюдаются 22 из 40 ИК активных фононных мод, предсказанных теоретико-групповым анализом. Несовпадение количества мод, теоретически и полученных экспериментально, указывает на сложный характер некоторых фононных мод (линии расположены настолько близко, что при комнатной температуре не разрешаются). Также в работе зарегистрированы спектры люминесценции в спектральной области 480 – 690 нм. Обнаруженные узкие линии люминесценции на 490, 545, 590, 620, 655, 667, 681 нм относятся к переходам $^5D_4 \rightarrow ^7F_J$ ($J = 6 - 0$) соответственно. В работе проведено измерение кинетики затухания люминесценции для переходов с уровня 5D_4 . Полученные экспериментальные данные хорошо описываются моноэкспоненциальной зависимостью с временем жизни уровня примерно 550 мкс.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ № 18-29-12091мк.

1. B. Langenbach-Kutttert, J. Sturm, R. Gruehn, Z. Anorg. Allg. Chem. **543**, 117 (1986).
2. D.Yu. Pushcharovskii, N.A. Yamnova, L.I. Leonyuk, A.V. Bogdanova, Kristallografia **32**(6), 1392 (1987).
3. L.I. Leonyuk, A.V. Bogdanova, G.S. Butuzova, N.I. Leonyuk, Sixth USSR Conference on Crystal Growth **2**, 17 (1985).
4. E.A. Volkova, A.V. Alekseev, N.I. Leonyuk, Journal of crystal growth **270**(1-2), 145 (2004).

ФОРМИРОВАНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУР ИЗ СТЕКЛЯННЫХ МИКРОСФЕР

А.В. Кучугуров*, К.А. Зубарева, Н.Т. Шардаков

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: alexey.kuchugurov@urfu.ru

Упорядоченные структуры из микрочастиц с размерами от 6 до 250 мкм являются аналогами фотонных кристаллов [1] как материалы с разрешенными и запрещенными зонами для терагерцового диапазона электромагнитного излучения, длина волны которого находится в субмиллиметровой области и составляет 10 – 500 мкм.

Для формирования упорядоченных структур из микрочастиц с диаметром более 250 мкм применяют поштучную механическую укладку с помощью робота или 3D-принтера, для частиц с диаметром менее 6 мкм используется явление самоорганизации частиц в суспензии в процессе броуновского движения.

Оба способа неприменимы для формирования упорядоченных структур из частиц, диаметр которых находится в диапазоне 6 – 250 мкм. Из-за малых геометрических размеров их поштучный захват невозможен. Процесс самоорганизации в капле суспензии также невозможен, так как из-за относительно большой массы частиц наблюдается их быстрое осаждение (седиментация).

Эти выводы были сделаны при исследовании формирования упорядоченных структур из микрошариков, для полых микросфер подобные исследования не проводились.

Цель работы заключалась в разработке методики формирования упорядоченного монослоя полых стеклянных микросфер на твердой поверхности.

Объектом исследования являлись монослои полых стеклянных микросфер и технология их получения.

В процессе исследования были решены следующие задачи:

1. Способом самоорганизации суспензии получен упорядоченный монослой из полых стеклянных микросфер диаметром от 110 до 125 мкм;
2. Исследована структура полученных упаковок, сформированы критерии для оценки качества полученных упорядоченных структур;
3. Определено влияние состава дисперсионной среды на формирование монослоя полых стеклянных микросфер;
4. Определено влияние температуры и влажности на формирование монослоя полых стеклянных микросфер.

По результатам исследования были сделаны следующие выводы:

Установлено, что на горизонтально расположенной стеклянной подложке возможно формирование плотноупакованного монослоя стеклянных микросфер за счет процессов самоорганизации, протекающих в капле суспензии, нанесенной на подложку.

Показано, что в качестве критерия упорядоченности сформированного монослоя можно принять количество гексагональных ячеек из микросфер, расположенных на единице площади подложки.

Доказано, что зависимость упорядоченности монослоя от состава дисперсионной среды носит экстремальный характер. Упорядоченность монослоя максимальна при низком и высоком содержании этанола, при промежуточных значениях упорядоченность минимальна.

Показано, что упорядоченность монослоя повышается с увеличением влажности. Влияние температуры практически не наблюдается.

1. Yablonovitch E. Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics / E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. **58**, 2059(1987).

БЕРИЛЛИЕВАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ ОПТИКА ДЛЯ КОГЕРЕНТНЫХ ИСТОЧНИКОВ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

И.И. Лятун^{1*}, С.С. Лятун¹, И.И. Снирирева², А.А. Снигирев¹

¹Балтийский федеральный университет имени И. Канта, Калининград, Россия

²European Synchrotron Radiation Facility, Гренобль, Франция

*e-mail: ivanlyatun@gmail.com

Высококогерентное рентгеновское излучение является мощным исследовательским инструментом для широкого круга научно-технических приложений, в том числе в области материаловедения, биологии, физики и медицины [1-3]. Расширенные параметры современных дифракционно-ограниченных источников рентгеновского излучения — лазеров на свободных электронах и источников синхротронного излучения (СИ) 4-го поколения открывают возможности для развития новых методов исследования. Однако появление высококогерентных источников СИ требует пересмотра используемых рентгенооптических материалов [4], инструментария, а также существующих исследовательских методик.

Бериллий является важным материалом для рентгеновской оптики, благодаря своим уникальным свойствам — малому атомному номеру и слабому поглощению рентгеновских лучей. Бериллиевая преломляющая рентгеновская оптика сегодня широко используется на источниках СИ и лазерах на свободных электронах для фокусировки и коллимации жесткого излучения, в качестве широкополосных монохроматоров, подавителей высоких гармоник и формирователей пучка [1,5-7]. Кроме того, преломляющие бериллиевые линзы являются основой в развитии Фурье-оптики, когерентной дифракции, интерферометрии, рефлекто-интерферометрии и методов визуализации [3,8-12].

В данной работе представлены экспериментальные результаты исследования влияния микроструктуры на рентгенооптические свойства широкого спектра марок металлического бериллия производства США (Materion), России (АО «ВНИИНМ») и республики Казахстан (УМЗ). В работе впервые продемонстрировано влияние размерного фактора микроструктуры бериллия на качество получаемых изображений на примере преломляющих линз марок IS50M и O-30-H (Materion) в режиме когерентной просвечивающей рентгеновской микроскопии [13]. Полученные экспериментальные результаты и сформированные рекомендации позволят повысить качество бериллиевых оптических элементов и раскрыть весь потенциал новых когерентных источников СИ 4-го поколения.

Исследования выполнены при поддержке гранта РФФИ (Проект № 19-72-30009).

1. A. Snigirev, V. Kohn, I. Snigireva *et al.*, *Appl. Opt.* **37**, 653 (1998).
2. C. Raven, A. Snigirev, I. Snigireva *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 1826 (1996).
3. A. Bosak, I. Snigireva, K. Napolskii, A. Snigirev, *Adv. Mater.* **22**, 3256 (2010).
4. T. Roth, L. Alianelli, D. Lengeler, A. Snigirev *et al.*, *MRS Bulletin* **42**, 430 (2017).
5. A. Snigirev, I. Snigireva, *Springer Series in Optical Sciences* **137**, 255 (2008).
6. G.B.M. Vaughan, J.P. Wright, A. Bytchkov *et al.*, *J. Synchrotron Rad.* **18**, 125 (2011).
7. D. Zverev, A. Barannikov, I. Snigireva, A. Snigirev, *Opt. Express* **25**, 28469 (2017).
8. M. Drakopoulos, A. Snigirev, I. Snigirev *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 014102 (2005).
9. P. Ershov, S. Kuznetsov, I. Snigireva *et al.*, *Appl. Cryst.* **46**, 1475 (2013).
10. H. Simons, A. King, W. Ludwig *et al.*, *Nature Communications* **6**, 6098 (2015).
11. D. V. Byelov, J.-M. Meijer, I. Snigireva *et al.*, *RSC Advances* **3**, 15670 (2013).
12. K. V. Falch, M. Lyubomirskiy, D. Casari *et al.*, *Ultramicroscopy* **184**, 267 (2018).
13. I. Lyatun, P. Ershov, I. Snigireva *et al.*, *J. Synchrotron Rad.* **27** (2020).

РАЗГОРАНИЕ И ЗАТУХАНИЕ ПОЛОС ИМПУЛЬСНОЙ КАТОДОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ
в Nd:ИАГА.С. Макарова^{1*}, В.И. Соломонов^{1,2}, А.В. Спирина¹¹Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия²Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*e-mail: anniebubnova@mail.ru

Исследование механизмов возбуждения и тушения полос люминесценции твердых тел является фундаментальной задачей, решив которую можно создать универсальный неразрушающий метод люминесцентного анализа, позволяющий идентифицировать тип материала, определять его фазовую структуру, а также состав собственных и примесных дефектов. В качестве такого метода анализа предлагается использовать метод импульсной катодолюминесценции (ИКЛ), так как данный вид анализа является недорогим, быстрым и информативным. Кроме того, он не требует тщательной пробоподготовки, а образцы при регистрации спектров находятся в воздухе при комнатной температуре.

В данной работе объектами исследования являются образцы иттрий-алюминиевого граната, легированного ионами неодима (Nd:ИАГ). Nd:ИАГ считается одним из лучших материалов, используемых в качестве активных сред твердотельных лазеров. Следовательно, изучение структуры данного материала, исследование примесных и собственных дефектов и кинетики их люминесценции дает дальнейшую возможность улучшения его характеристик. Ранее изучение кинетики спектральных полос Nd:ИАГ проводилось только для генерационной полосы с максимумом около 1060 нм, которая соответствует энергетическому переходу ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{11/2}$ ионов Nd^{3+} [1,2]. Однако кинетика других полос люминесценции также представляет научный интерес. Данная работа направлена на изучение процессов разгорания и затухания спектральных полос ИКЛ в образцах Nd:ИАГ в видимом и ближнем инфракрасном спектральных диапазонах.

Для возбуждения ИКЛ применялся импульсный электронный ускоритель РАДАН-303. Средняя энергия электронов составляла 150 кэВ, длительность импульса пучка электронов — 2 нс. Для регистрации спектров ИКЛ использовался спектрометрический комплекс на базе монохроматора МДР-41, разработанный в ООО «ОКБ СПЕКТР». Для регистрации и записи кинетики спектральных линий применялся цифровой осциллограф Keysight DSOX2014A.

Установлено, что в отличие от фотолюминесценции во всех спектральных полосах ИКЛ присутствует участок разгорания люминесценции, т.е. максимум интенсивности люминесценции достигается через определенное время после выключения возбуждения. Причем для разных полос это время различается. После достижения максимума кривые затухания для большинства спектральных полос имеют схожую форму и могут быть описаны экспоненциальным законом с разными характерными временами. Кроме того, для некоторых полос с длительным послесвечением на стадии разгорания наблюдаются дополнительные максимумы интенсивности.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-08-00018.

1. K.K. Deb, R.G. Buser, J. Paul, *Applied Optics* **20** 7, 1203 (1981).
2. Yu. A. Barnakov, I. Veal, Z. Kabato, G. Zhu, M. Bahoura, M. A. Noginov, *Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering* 6216 (2006).

СПЕКТРОСКОПИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК ОКСИДА ИНДИЯ-ОЛОВА

М.С. Мегедь^{1*}, Т. Чжан^{1,2}, А.А. Шахмин², М.К. Ходзицкий^{1,2}

¹ Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

² ООО «Тидекс», Санкт-Петербург, Россия

*e-mail: rem3095@yandex.ru

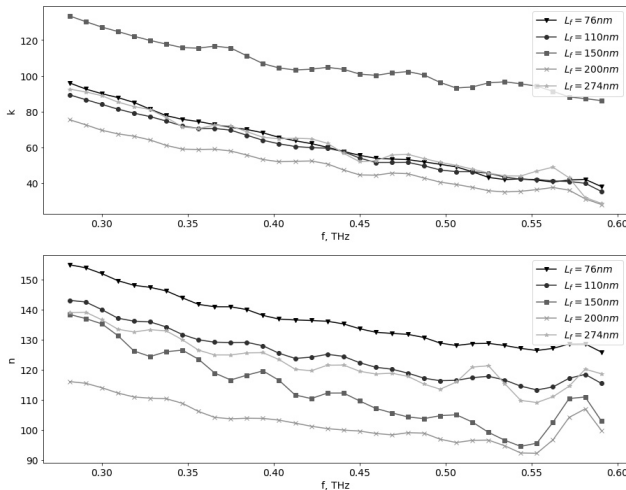


Рис. 1. Мнимая (k) и действительная (n) части показателя преломления тонких пленок ИТО.

Были исследованы 5 образцов толщиной от 76 до 274 нм, нанесенные на подложку из оптического стекла К108 толщины 3 мм. ТГц показатель преломления подложки был получен итерационным методом [2], также основанным на импульсной ТГц спектроскопии. Было разработано аналитическое соотношение (1), учитывающее эффект Фабри-Перо в тонкой пленке, основанное на получаемых экспериментально опорном оптическом сигнале $E_a(\omega)$, прошедшем через воздух, и сигнале $E_f(\omega)$, прошедшем через пленку и подложку:

$$\frac{E_f(\omega)}{E_a(\omega)} = \frac{8\hat{n}_f\hat{n}_s}{(1+\hat{n}_f)(1+\hat{n}_s)(\hat{n}_f+\hat{n}_s)} \exp\left\{\frac{i\omega}{c}(L_s+L_f+L_s\hat{n}_s-L_f\hat{n}_f)\right\} \left(1 - \frac{\hat{n}_f-\hat{n}_s}{\hat{n}_f+\hat{n}_s} \frac{\hat{n}_f-1}{\hat{n}_f+1} \exp\left\{-\frac{2i\omega L_f}{c}\hat{n}_f\right\}\right)^{-1} \quad (1)$$

Здесь комплексные показатели преломления записаны в форме $\hat{n} = n - ik$, L_s и L_f — толщина подложки и пленки соответственно, \hat{n}_s и \hat{n}_f — показатель преломления подложки и пленки соответственно. Уравнение (1) решается численно относительно \hat{n}_f , c — скорость света в вакууме. Результаты расчетов комплексных показателей преломления приведены на рис. 1.

В данной работе был предложен метод вычисления эффективного показателя преломления тонких пленок на подложке с помощью импульсной ТГц спектроскопии. Подход был применен к исследованию пленок ИТО разной толщины.

1. C. S. Yang *et al.*, Optics Express **21**(14), 16670 (2013).

2. M. Naftaly, Terahertz Metrology — Artech House (2015).

Пленки оксида индия-олова (далее англ. ИТО — indium tin oxide) — прозрачный в видимом диапазоне излучения полупроводниковый материал, наноматериалы на основе которого находят применение не только в видимом и ближнем инфракрасном диапазонах, но также и в терагерцовом (ТГц) диапазоне частот [1]. На основе ИТО, в силу наличия высокой проводимости и относительной простоты в изготовлении пленок, возможно изготовление оптоэлектронных приборов для управления ТГц излучением.

В данной работе описывается неразрушающий метод исследования дисперсии эффективного комплексного показателя преломления тонких пленок, в частности, ИТО с помощью импульсной ТГц спектроскопии с разрешением во времени. Были исследо-

АЛМАЗНЫЕ МИКРОЛИНЗЫ ДЛЯ КОГЕРЕНТНЫХ МЕТОДОВ
РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИАГНОСТИКИП.Н. Медведская^{1*}, И.И. Лятун¹, С.Н. Шевырталов¹, М.В. Поликарпов², И.И. Снигирева³,
В.А. Юнкин⁴, А.А. Снигирев¹¹Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия²Европейская лаборатория молекулярной биологии, Гамбург, Гамбург, Германия³Европейский центр синхротронного излучения, Гренобль, Франция⁴ИПТМ РАН, Черноголовка, Россия*e-mail: pmedvedskaia@gmail.com

Разработка технологии создания алмазных линз является одним из наиболее перспективных направлений развития рентгеновской преломляющей оптики. Алмазная оптика способна выдерживать экстремальные термические нагрузки на современных источниках синхротронного излучения. Было показано, что алмазные линзы, созданные методом лазерной абляции имеют большой потенциал для применения в качестве формирования и подготовки пучка с высоким тепловым потоком [1,2]. К сожалению, лазерная абляция не позволяет изготавливать линзы с радиусом менее 50 мкм и шероховатостью (rms) менее 700 нм, что ограничивает их применение для высокоразрешающих диагностических приложений [3,4].

В данной работе представлены возможности ионно-лучевой литографии (IBL) для изготовления рентгеновской преломляющей микрооптики. Метод IBL позволяет обрабатывать любые материалы независимо от их твердости с наноразмерной точностью и прецизионностью. Одиночные полулинзы с радиусом закругления ~ 5 мкм были изготовлены из монокристаллического алмаза и собраны в составную преломляющую линзу (СПЛ). Как было подтверждено с помощью лабораторных методов, профили изготовленных линз не имеют выраженных низко- и высокочастотных модуляций. Оптические характеристики СПЛ были успешно протестированы на синхротроне третьего поколения PETRA-III (DESY), где СПЛ показала дифракционно-ограниченную фокусировку жесткого рентгеновского излучения [5]. Мы уверены, что новое поколение алмазной оптики будет иметь важное значение в области применения когерентных рентгеновских изображений на современных рентгеновских источниках.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда (Проект № 19-72-30009). Алмазные пластины изготовлены в рамках гранта РФФИ № 19-29-12040.

1. M. Polikarpov *et al.*, J. Synchrotron Rad. **22**, 23 (2015).
2. S. Terentyev *et al.*, Appl. Phys. Lett. **107**, 111108 (2015).
3. T. V. Kononenko *et al.*, Appl. Phys. A **122**, 152 (2016).
4. S. Terentyev *et al.*, J. Synchrotron Rad. **24**, 103 (2017).
5. P. Medvedskaya *et al.*, Optics Express **28.4**, 4773 (2020).

ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ФРАГМЕНТОВ В СИСТЕМЕ $\text{Cr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{Ch}_2$ ($\text{Ch} = \text{S}, \text{Se}$)

А.И. Меренцов^{1*}, А.С. Шкварин¹, М.С. Постников¹, L. Gregoratti², M. Amati², P. Zeller²,
P. Moras³, А.Н. Титов¹

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²Elettra-Sincrotrone, Trieste, Italy

³Istituto di Struttura della Materia-CNR (ISM-CNR), Trieste, Italy

*e-mail: alexander.merentsov@urfu.ru

Слоистые твёрдые растворы замещения с общей формулой $\text{Cr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{Ch}_2$ ($\text{Ch} = \text{S}, \text{Se}$) интересны, в первую очередь, возможной 100% спиновой поляризацией [1,2] и являются перспективными материалами для спинтроники. Изучение электронной структуры этих материалов прямыми методами (например, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии) является первоочередной задачей для понимания процессов, происходящих в электронной подсистеме в прифермиевской области. Наиболее подходящим методом в этом случае является рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES). Однако отсутствие литературных данных по ARPES для замещённых систем на базе дихалькогенидов титана заставляет предположить принципиальную невозможность использования данного метода для изучения подобных систем. Возможной причиной может являться формирование структурных фрагментов, наличие которых косвенно подтверждалось результатами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии [1], но не было обнаружено позднее просвечивающей электронной микроскопией [2].

В настоящей работе для изучения морфологии поверхности монокристаллов $\text{Cr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{Ch}_2$ ($\text{Ch} = \text{S}, \text{Se}$) использована методика сканирующей рентгеновской фотоэлектронной микроскопии (SPEM), которая позволяет не только «видеть» микро- и наноструктуру поверхности в спектрах внутренних уровней компонентов материала, но и обнаружить различие электронной структуры различных частей поверхности. Используемая в работе методика SPEM реализована на линии ESCA microscopу синхротрона ELETTRA (Триест, Италия). Исследуемые монокристаллы составов $\text{Cr}_{0.78}\text{Ti}_{0.36}\text{Se}_2$ и $\text{Cr}_{0.34}\text{Ti}_{0.66}\text{S}_2$ выращены из поликристаллической фазы методом газотранспортных реакций с использованием входящего в состав халькогена (Se и S, соответственно) и йода в качестве газа-носителя. Методики ARPES и LEED (дифракция медленных электронов) реализованы на линии VUV синхротрона ELETTRA.

На LEED картине кристалла $\text{Cr}_{0.78}\text{Ti}_{0.36}\text{Se}_2$ обнаружены чёткие рефлекссы, говорящие о высоком качестве поверхности. Наличие сверхструктурных рефлекссов и размытая картина ARPES говорили о формировании структурных фрагментов (но не различных фаз!). SPEM картины подтвердили наличие структурных фрагментов в обоих кристаллах. Причём в $\text{Cr}_{0.78}\text{Ti}_{0.36}\text{Se}_2$, как это было обнаружено нами ранее [1], образуются фрагменты на основе TiSe_2 и CrSe_2 , а в $\text{Cr}_{0.34}\text{Ti}_{0.66}\text{S}_2$ структурные фрагменты различаются содержанием сверхстехиометричного титана.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-33-60031.

1. A.I. Merentsov, Y.M. Yarmoshenko, A.N. Skorikov, A.N. Titov, A. Buling, M. Rakers, M. Neumann, E.G. Galieva, P.A. Slepudin, J. Electron Spectros. Relat. Phenomena **182**, 70 (2010).
2. H. Luo, J.W. Krizan, E.M. Seibel, W. Xie, G.S. Sahasrabudhe, S.L. Bergman, B.F. Phelan, J. Tao, Z. Wang, J. Zhang, R. J. Cava. Chemistry of Materials **27**, 6810 (2015).

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА $Nb_xV_{1-x}Se_2$ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ РЕНТГЕНОВСКОЙ РЕЗОНАНСНОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

А.С. Шкварин¹, А.И. Меренцов¹, Н.В. Селезнева², Е.М. Шерокалова², I. Pis³, F. Bondino³,
А.Н. Титов¹

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

³Elettra-Sincrotrone, Trieste, Italy

*e-mail: alexander.merentsov@urfu.ru

Слоистые материал $NbSe_2$ интересен не только благодаря сильному электрон-фононному взаимодействию, проявляющемуся в виде переходов в состояния с волной зарядовой плотности или сверхпроводимости [1,2], но и как перспективный катодные материалы для литиевых батарей [3]. Катодные свойства $NbSe_2$ могут быть улучшены частичным замещением атомов Nb атомами V. Ещё одна возможная область применения замещённых материалов $Nb_xV_{1-x}Se_2$ — водородная энергетика. В частности, показано, что соединения 2H- $NbSe_2$ и 4H- $NbSe_2$ образуют однофазные гидриды с увеличением объема элементарной ячейки на 3% и 1.6%, соответственно. Процесс гидрирования является обратимым с температурой выхода водорода примерно 250 К. Замещение Nb^{4+} более лёгким V^{4+} позволяет уменьшить объём элементарной ячейки и потенциально увеличить степень гидрирования с сохранением зарядового состояния атомов металла. По данным рентгеновской порошковой дифракции системы $Nb_xV_{1-x}Se_2$ установлено [4], что в диапазоне $x = 0 - 0.1$ атомы как ванадия, так и ниобия находятся в тригонально-призматической координации атомами селена, а в диапазоне $x = 0.3 - 1.0$ они находятся в октаэдрической координации. Целью настоящей работы было исследование электронной структуры монокристаллов $Nb_{0.9}V_{0.1}Se_2$ и $Nb_{0.4}V_{0.6}Se_2$ с различной координацией атомов V и Nb атомами Se.

Исследуемые монокристаллы выращены методом газотранспортной реакции из поликристаллической фазы. Кристаллическая структура поли- и монокристаллических материалов определена методом рентгеновской дифрактометрии на дифрактометре Bruker-D8 Advance. Электронная структура монокристаллов исследована методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии в нерезонансном и резонансном режимах возбуждения (XPS, ResPES) и методом рентгеновской спектроскопии поглощения (XAS).

Обнаружено, что, как и в системе $Cr_xTi_{1-x}Ch_2$ ($Ch = S, Se$), в монокристаллах $Nb_{0.9}V_{0.1}Se_2$ и $Nb_{0.4}V_{0.6}Se_2$ образуются структурные фрагменты на основе VSe_2 и $NbSe_2$, концентрация которых пропорциональна содержанию соответствующего металла и между которыми происходит перенос заряда $VSe_2 \rightarrow NbSe_2$. Состояния на уровне Ферми по данным ResPES обусловлены преимущественно состояниями ванадия. Кристаллическая модификация в $Nb_{0.9}V_{0.1}Se_2$ остаётся 2H, как у $NbSe_2$, но в $Nb_{0.4}V_{0.6}Se_2$ переходит в 1T, что делает последний материал непригодным для гидрирования.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-33-60031.

1. B.P. Clayman, R.F. Frindt, Solid State Commun. **9**, 1881 (1971).
2. J.Á. Silva-Guillén, P. Ordejón, F. Guinea, E. Canadell, 2D Mater. **3**, 035028 (2016).
3. C. Peng, H. Lyu, L. Wu, T. Xiong, F. Xiong, Z. Liu, Q. An, L. Mai, ACS Appl. Mater. Interfaces **10**, 36988 (2018).
4. M. Bayard, B.F. Mentzen, M.J. Sienko, Inorg. Chem. **15**, 1763 (1976).

ДИНАМИКА РЕШЁТКИ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ОРТОБОРАТА КОБАЛЬТА $\text{Co}_3(\text{VO}_3)_2$

А.Д. Молчанова*, К.Н. Болдырев, М.Н. Попова

Институт спектроскопии РАН, Троицк, Москва, Россия

*e-mail: nastyamolchanova@list.ru

Кобальтовые бораты кристаллизуются в различных кристаллических структурах [1] и наиболее интересны большим многообразием своих магнитных свойств. Для магнитных систем таких соединений характерны состояния типа спинового стекла, а также квазиодномерный и двумерный магнетизм. В ряду соединений Co-V-O свойства ортобората кобальта $\text{Co}_3(\text{VO}_3)_2$ остаются недостаточно изученными. В работе [2] сообщалось об антиферромагнитной структуре $\text{Co}_3(\text{VO}_3)_2$ ниже $T_N = 30$ К и учетверении магнитной элементарной ячейки по сравнению с кристаллической. Позднее модель магнитной ячейки была дополнена, также по данным расчёта обменных интегралов предполагалось наличие фрустрированных взаимодействий (конкуренция ферромагнитного и антиферромагнитного обменов) [3]. Тем не менее в настоящий момент всё ещё остаются вопросы касательно магнитной структуры $\text{Co}_3(\text{VO}_3)_2$. Также в литературе отсутствуют сведения о динамике решётки этого соединения, которые могли бы быть полезны как для общей характеристики кристалла, так и для уточнения его магнитной структуры.

В настоящей работе приводится широкое исследование кобальтового бората методами оптической ИК-спектроскопии. В рамках исследования динамики решётки были зарегистрированы ИК-активные фононные моды, изучена их температурная зависимость. Поведение фононной системы в магнитоупорядоченной фазе (обнаружено порядка десяти новых мод при $T < T_N$) явно указывает на наличие структурного фазового перехода, происходящего при температуре антиферромагнитного упорядочения. Ранее таким же методом нами был зарегистрирован магнито-структурный фазовый переход в изоструктурном $\text{Co}_3(\text{VO}_3)_2$ ортоборате никеля $\text{Ni}_3(\text{VO}_3)_2$ [4].

С целью уточнения природы низкотемпературных ИК возбуждений была исследована полевая зависимость низкотемпературных терагерцовых спектров пропускания в сильных магнитных полях различных геометрий (до 32 Тл). Полученная зависимость имеет сложный, не линейный вид, что может указывать на взаимодействие магнитных подсистем Co^{2+} друг с другом. При значении внешнего поля $H_c = 13.75$ Тл спектр возбуждений резко меняется. Это может быть связано с магнитным фазовым переходом типа «спин-флоп» при H_c . О наличии такого фазового перехода уже сообщалось ранее в [5].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-32-20142 мол_а_вед. Исследование терагерцовых спектров пропускания в сильных магнитных полях проводилось в сотрудничестве с Д. Каменским (университет Радбоуд, г. Нейменег, Нидерланды).

1. J.L.C. Rowsell, N.J. Taylor, L.F. Nazar, *Journal of Solid State Chemistry* **174**, 189 (2003).
2. R.E. Newnham, R.P. Santoro, P.F. Seal, G.R. Stallings, *Physica Status Solidi* **16**, K17 (1966).
3. L.N. Bezmaternykh, S.N. Sofronova, N.V. Volkov, E.V. Eremin, O.A. Bayukov, I.I. Nazarenko, D.A. Velikanov, *Physica Status Solidi (b)* **249**, 1628 (2012).
4. R.V. Pisarev, M.A. Prosnikov, V.Y. Davydov, A.N. Smirnov, E.M. Roginskii, K.N. Boldyrev, A.D. Molchanova, M.N. Popova, M.B. Smirnov, V.Y. Kazimirov, *Physical Review B* **93**, 134306 (2016).
5. N.V. Kazak, M.S. Platunov, N.B. Ivanova, Y.V. Knyazev, L.N. Bezmaternykh, E.V. Eremin, A.D. Vasilev, O.A. Bayukov, S.G. Ovchinnikov, D.A. Velikanov, Ya.Z. Zubavichusm, *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **117**, 94 (2013).

КОГЕРЕНТНАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ ОПТИКА И УСТРОЙСТВА НА ЕЕ ОСНОВЕ ДЛЯ ИСТОЧНИКОВ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А. Нарикович¹, Д. Зверев¹, И. Лягун¹, С. Лягун¹, М. Воеводина¹, П. Медведская¹,
А. Баранников¹, И. Панормов¹, А. Сеницин¹, К.А. Чичай¹, С. Шевырталов¹, И. Снигирева²,
А. Снигирев^{1*}

¹Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия

²Европейский центр синхротронного излучения, Гренобль, Франция

*e-mail: anatoly.snigirev@gmail.com

На сегодняшний день ведется модернизация магнитных систем накопительных колец существующих источников синхротронного излучения (СИ) до 4 поколения. В России ведутся работы по созданию центров с установками класса «Мегасайенс»: проектировка и строительство двух источников СИ с предельными характеристиками [1]. Новые предельные параметры пучка, обеспечиваемые дифракционно-ограниченными источниками с уменьшенным горизонтальным эмиттансом, откроют уникальные возможности для разработки новой концепции систем транспортировки и подготовки пучка на основе рентгеновской преломляющей оптики.

В международном научно-исследовательском центре «Когерентная рентгеновская оптика для установок Мегасайенс» проводятся комплексные исследования преломляющей оптики, разработка и внедрение устройств и новых методов исследований, связанных с когерентностью рентгеновских лучей, проектирование станций СИ на основе линз. В дополнение к традиционным приложениям микрофокусировки, изменяя форму, состав и количество отдельных линз, составные преломляющие линзы (СПЛ) можно адаптировать к энергии фотонов от 2 до 200 кэВ, обеспечивая гибкую настройку фокусных расстояний и универсальность для широкого спектра методов исследований. Используя преимущество уменьшенного размера новых источников по горизонтали, преломляющая оптика, встроенная во фронт-энд, может передавать фотонный пучок практически без потерь от источника непосредственно на экспериментальные станции. В связи с этим разработка алмазной преломляющей оптики имеет ключевое значение [2]. Реализация концепции переноса пучка на основе линз значительно упростит компоновку большинства новых станций [3].

Для оптимизации позиционирования линз, разработан компактный рентгеновский трансфокатор (КТФ) — оптическое устройство на основе СПЛ [4]. Обеспечивая возможность настройки постоянной энергии и фокусного расстояния, КТФ может быть либо системой коллимации пучка, либо короткофокусным увеличительным объективом, что делает его пригодным для широкого спектра применений даже на неспециализированных станциях СИ. Это особенно важно для неразрушающих измерений *in-situ* или *in-vivo* в различных областях рентгеновской науки, где критическое значение имеет быстрое отслеживание динамических, морфологических и структурных изменений. Устройство может также использоваться для точных измерений размеров источников на источниках СИ третьего и четвертого поколений [5].

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ 19-72-30009.

1. I. A. Ashanin *et al.*, Phys. Atom. Nuclei **81**, 1646 (2018).
2. M. Polikarpov *et al.*, J. Synchrotron Rad. **22**, 23 (2015).
3. M. W. Bowler *et al.*, J. Synchrotron Rad. **22**, 1540 (2015).
4. A. Narikovich *et al.*, J. Synchrotron Rad. **26**, 1208 (2019).
5. F. Ewald *et al.*, Eur. Work. Beam Diagnostics Instrum. Part. Accel., 188-190 (2011).

DARIA — ПРОЕКТ КОМПАКТНОГО ИСТОЧНИКА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЙ МЕТОДАМИ НЕЙТРОННОГО РАССЕЯНИЯ

К.А. Павлов^{1,2*}, Н.А. Коваленко¹, П.И. Кониц³, В.В. Воронин^{1,2}, С.В. Григорьев^{1,2}¹НИЦ «Курчатовский институт» - Петербургский институт ядерной физики, Гатчина, Россия²Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия³Юлихский центр нейтронных исследований (JCNS), Гархинг, Германия*e-mail: fairy.neutrons@yandex.ru

Ведущие мировые центры нейтронных исследований в настоящее время разрабатывают источники нейтронов нового поколения для нужд физики конденсированных сред. Компактные источники призваны заменить морально устаревшие реакторы малой и средней мощности и открыть возможности для создания лаборатории рассеяния нейтронов в любой организации. Такой источник изначально уступает несколько порядков нейтронного потока большому источнику ускорительного типа; однако значительная часть этих потерь может быть компенсирована увеличением апертуры захвата и глубокой оптимизацией инструмента, включая адаптацию параметров ускорителя, мишени и замедлителя к потребностям каждой конкретной установки, использующей источник, индивидуально.

На волне всемирного интереса к компактным источникам нейтронов мы представляем российскую инициативу создания подобного источника — проект DARIA (neutron source Dedicated to Academic Research and Industrial Applications). Сформулирован общий подход к созданию установки нейтронного рассеяния на компактном источнике, на его основе описан облик необходимого ускорителя и мишени. На примере нескольких методов — дифракции, спектроскопии, рефлектометрии, малоуглового рассеяния и спин-эхо малоуглового рассеяния — предложены экспериментальные схемы реализации методов нейтронного рассеяния, рассчитан ряд оптических устройств, использование которых позволит наиболее эффективно использовать генерируемый источником нейтронный поток.

Для порошкового дифрактометра предлагается использование двух сменных замедлителей с тепловым и холодным спектром. Это позволит прибору иметь два режима работы с оптимальным потоком при заданном разрешении, отличающиеся выбором рабочего диапазона длин волн и обеспечивающие высококачественные измерения для исследования как кристаллических, так и магнитных структур.

Для реализации метода нейтронной спектроскопии на компактном источнике был выбран метод времени пролета в обратной геометрии. Его использование позволяет создать так называемый сканер возбуждений в (q, E) -пространстве — эффективный инструмент для анализа неупругого, квазиупругого и упругого рассеяния, обеспечивающий быстрое и всестороннее исследование динамики.

Из трех выбранных методов малоугловое рассеяние наиболее требовательно к светимости источника, поскольку оно предъявляет самые строгие требования к коллимации используемого пучка. Рассмотрена возможность реализации метода в фокусирующей геометрии.

Результаты этой работы будут закреплены в концептуальном проекте компактного источника нейтронов как лаборатории методов исследования нейтронного рассеяния.

Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках проекта № 19-12-00363.

ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ АНИОННЫХ ЦЕНТРОВ В НАНОТУБУЛЯРНЫХ МАССИВАХ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ

И.А. Петренёв*, А.С. Вохминцев, Р.В. Камалов, И.А. Вайнштейн

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: i.a.petrenev@urfu.ru

Самоупорядоченные нанотубулярные структуры оксидов металлов, полученные методом электрохимического окисления (анодирования), являются перспективными матрицами для создания газовых сенсоров, солнечных батарей, фотохимических и фотоэлектрохимических ячеек, детекторов ионизирующих излучений и мемристоров [1]. В частности, недавние исследования показали перспективность применения нанотубулярных массивов ZrO_2 (ZrO_2 -nt) в качестве активных слоев мемристорных ячеек памяти [2,3]. Предполагается, что за эффекты резистивного переключения в ZrO_2 ответственны кислородные вакансии (F-центры). Одним из эффективных методов исследования зонной структуры широкозонных материалов является фотолюминесценция (ФЛ). Таким образом, цель настоящей работы заключалась в синтезе и исследовании особенностей фотолюминесценции в нанотрубках диоксида циркония.

Образцы нанотубулярных слоев ZrO_2 толщиной 3 мкм синтезированы методом анодирования металлической циркониевой фольги с содержанием основных примесей (Hf, Al и Sn) < 1 % [4]. Zr-фольгу толщиной 100 мкм предварительно погружали в ультразвуковую ванну на 10 мин, обрабатывали раствором кислот $HF:HNO_3:H_2O = 1:6:20$, промывали дистиллированной водой и сушили на воздухе. Анодирование проводили в двухэлектродной электрохимической ячейке при постоянном напряжении 50 В и температуре 20°C в течение 9 ч. Электролит представлял собой раствор этиленгликоля, содержащий 5 мас. % H_2O и 0.5 мас. % NH_4F . Измерение спектров возбуждения и свечения осуществлялось на спектрометре Perkin Elmer LS 55 в диапазоне длин волн (200...700) нм при спектральной ширине щели возбуждения 5 нм и свечения 10 нм со скоростью сканирования 60 нм/мин.

Установлено, что в спектрах возбуждения наблюдаются четыре пика с максимумами $\lambda_{exc} = 258, 295, 331$ и 378 нм. Показано, что полученные спектры удовлетворительно коррелируют с особенностями оптического поглощения в исследуемом диапазоне длин волн [5]. Спектры свечения характеризуются широкой полосой в области (375...550) нм. Продемонстрировано, что после изотермического отжига при температуре 500°C интенсивность ФЛ возрастает более чем в 5 раз и максимум свечения сдвигается в синюю область на 60 нм. Анализ независимых работ показал, что увеличение интенсивности ФЛ может быть обусловлено перераспределением носителей заряда между уровнями в запрещенной зоне и/или перезарядкой центров рекомбинации, а также удалением адсорбированных на поверхности ZrO_2 органических соединений, связанных с электролитом и возможными побочными продуктами реакций окисления. Регистрируемый синий сдвиг полосы свечения ФЛ может быть вызван перезарядкой центров F-типа в анионной подрешетке и распадом их агрегатов в анодированном слое ZrO_2 .

1. F. Trivinho-Strixino, F.E.G. Guimaraes, E.C. Pereira, Chem. Phys. Lett. **461**, 82 (2008).
2. A.S. Vokhmintsev, R.V. Kamalov, A.V. Kozhevina, I.A. Petrenyov, N.A. Martemyanov, I.A. Weinstein, Proc. USBEREIT 2018, 348 (2018).
3. I.A. Petrenyov, A.S. Vokhmintsev, R.V. Kamalov, I.A. Weinstein, AIP Conf. Proc. **2174**, 020242 (2019).
4. I.A. Petrenyov, R.V. Kamalov, A.S. Vokhmintsev, N.A. Martemyanov, I.A. Weinstein, J. Phys. Conf. Ser. **1124**, 022004 (2018).
5. A.V. Kozhevina, A.S. Vokhmintsev, R.V. Kamalov, N.A. Martemyanov, A.V. Chukin, I.A. Weinstein, J. Phys. Conf. Ser. **917**, 062031 (2017).

ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛ КОЛЛАГЕНА И КОЛЛАГЕНАЗЫ МЕТОДОМ ДИНАМИЧЕСКОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА ПРИ НАЛИЧИИ МОДУЛЯТОРОВ

А.В. Петрова*, И.А. Сергеева, Г.П. Петрова

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

*e-mail: av.sukneva@physics.msu.ru

Белки выполняют множество жизненно важных функций в живых организмах: служат материалом для построения клеток, тканей и органов, большинства гормонов, гемоглобина и других соединений [1]. Но кроме белков в организме присутствует множество различных ферментов, которые также необходимы для нормальной жизнедеятельности человека. Один из таких ферментов — коллагеназа [1]. Главное ее свойство — способность к биодegradации основного белка межклеточного матрикса — коллагена. Такая способность фермента позволяет довольно эффективно использовать препараты, содержащие коллагеназу, в медицине: для расщепления сгустков коллагеновых волокон в рубцах, ожоговых ранах, расплавлении струпов (затвердевшего слоя свернутой крови) и омертвевших тканях [2].

Цель данной работы заключается в исследовании взаимодействия молекул коллагена и коллагеназы с различными активаторами, ингибиторами и дубителями методом динамического рассеяния света в буферных растворах. Необходимо выявить и проанализировать характер взаимодействия в зависимости от времени. Использование солей кальция, цинка и магния в данной работе обусловлено влиянием на активность фермента коллагеназы, а ионы хрома являются дубителями молекул коллагена [3].

В результате работы методом динамического рассеяния света (ДРС) были получены pH-зависимости коэффициента трансляционной диффузии для коллагена I типа и коллагеназы в растворах, содержащих соли: CaCl_2 , ZnCl_2 , MgCl_2 , CrCl_3 , $\text{Cr}(\text{CH}_3\text{CO}_2)_3$. Полученные зависимости имеют нелинейный вид с характерным минимумом в точке pH 6.0, что соответствует изоэлектрической точке фермента pI 6.3 [3].

Также с помощью метода ДРС представлены временные зависимости изменения гидродинамического радиуса R_h в буферных растворах коллагена и коллагеназы при наличии модификаторов. Выявлено, что добавление активаторов CaCl_2 и ZnCl_2 увеличивают скорость коллагенолиза в 2 и 1.5 раза соответственно. В свою очередь добавление ингибитора MgCl_2 замедляет скорость коллагенолиза в 1.3 раза. Получено, что при добавлении CrCl_3 биодegradация коллагена замедляется в 2 раза за счет эффекта дублирования, однако, добавление активатора CaCl_2 в растворы все равно ускоряет расщепление молекул белка.

Кроме того, для более точной оценки процесса были рассчитаны константы скорости данных реакций. На основании полученных результатов, можно сделать вывод о том, что ионы хрома действительно упрочняют структуру коллагена, и скорость расщепления молекул белка снижается на 70%. Увеличить скорость реакции на 50% можно путем добавления в растворы ионов кальция. Однако, та скорость биодegradации коллагеновых волокон, которая наблюдается в чистом растворе все равно не наблюдается. Максимальная скорость расщепления молекул белка достигается путем активации коллагеназы ионами Ca^{2+} .

1. С.А. Батечко, А.М. Ледзевиров, Биологическое и функциональное значение коллагеновых аминокислот (2012).
2. R. Ritchie, W. Yang, M. Meyers, Structural Architectures with Toughening Mechanisms in Nature: A Review of the Materials Science of Type-I Collagenous Materials (2019).
3. Arjun S. Adhikari, Emerson Glassey and Alexander R. Dunn, Conformational Dynamics. Conformational dynamics accompanying the proteolytic degradation of trimeric collagen I by collagenases (2012).

МОРФОЛОГИЯ И СОСТАВ НАНОВКЛЮЧЕНИЙ В $\text{Fe}_{0.25}\text{Ni}_{0.25}\text{TiSe}_2$

М.С. Постников^{1*}, А.С. Шкварин¹, А.И. Меренцов¹, Е.И. Патраков¹, А.Н. Титов¹,
E. Betz-Guttner², L. Gregoratti³, M. Amati³, P. Zeller³

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²IOM-CNR, Laboratorio TASC, S.S. 14-km 163.5, Basovizza, Trieste, Italy

³Elettra – Sincrotrone Trieste S.C.p.A., Trieste, Italy

*e-mail: mithanya0403@gmail.com

Соединения дихалькогенидов титана TiX_2 , интеркалированные щелочными, благородными и переходными металлами, в термодинамическом смысле представляют собой твердые растворы с ограниченной областью стабильности. При выходе за пределы этой области происходит разложение с выделением интеркалированных металлов или их соединений (в зависимости от условий реакции разложения). В этом случае из-за высокой анизотропии коэффициента диффузии (отношение D_{\parallel}/D_{\perp} , где D_{\parallel} и D_{\perp} — коэффициенты диффузии вдоль и поперек слоя решетки TiX_2 , различающиеся не менее, чем в 10^5 раз) продукты распада инкапсулируются в межслоевом пространстве решетки TiX_2 . Это дает возможность получения наноразмерных композитов с привлекательными функциональными свойствами.

Целью данной работы является изучение взаимодействия $\text{Fe}_{0.25}\text{TiSe}_2$ и $\text{Ni}_{0.25}\text{TiSe}_2$ в процессе выращивания монокристаллов методом газотранспортных реакций. Поверхность кристалла изучалась методами атомно силовой микроскопии, сканирующей электронной микроскопии с использованием энергодисперсионного рентгеновского спектрометра и сканирующей фотоэлектронной микроскопии.

В ходе исследования было установлено, что на поверхности основного кристалла образуются гексагональные включения $(\text{Ni,Fe})_4\text{Se}_5$, когерентно связанные с этим кристаллом.

Однако, наряду с гексагональными включениями $(\text{Fe,Ni})_4\text{Se}_5$ наблюдаются также стержневидные образования (вискеры), лежащие на поверхности основного кристалла. Форма этих кристаллов схожа с кристаллами Ti_3Se_4 , имеющими моноклинную структуру. Если на поверхности кристаллизуются селениды никеля и железа, а соотношение титан-селен не изменяется, то должен существовать механизм, компенсирующий убыль селена за счёт образования $(\text{Fe,Ni})_4\text{Se}_5$. Таким механизмом может быть формирование кристаллов Ti_3Se_4 , поглощающих избыточный титан и поддерживающих устойчивость решётки TiSe_2 .

Образование вискерообразных включений Ti_3Se_4 , возможно в том случае, когда свободные энергии Ti_3Se_4 и $(\text{Fe,Ni})_4\text{Se}_5$ совпадают при температуре роста кристаллов.

Как показали термодинамические расчеты, это условие соблюдается при температуре 431°C , что входит в интервал температур, при котором происходит рост кристаллов $\text{Fe}_{0.25}\text{Ni}_{0.25}\text{TiSe}_2$.

Данные сканирующей фотоэлектронной микроскопии показывают, что поверхность кристалла в контрасте по никелю и селену выглядят почти одинаково, тогда как в контрасте по титану инвертировано. Это свидетельствует о формировании отдельных фрагментов NiSe на поверхности подложки матрицы.

Таким образом можно заключить, что образование кристаллов $(\text{Fe,Ni})_4\text{Se}_5$ связано с захватом селена и, следовательно, обеднением селеном исходного материала, которое обуславливает образование вискерообразных включений Ti_3Se_4 .

Работа выполнена при финансовой поддержке научного проекта РФФИ № 18-32-20141.

СПЕКТРОСКОПИЯ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ КВАНТОВОЙ ОПТИКИ
В СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХЭ.С. Сектаров^{1,2*}, К.Н. Болдырев^{1,2}¹Институт спектроскопии РАН, Троицк, Москва, Россия²Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия*e-mail: sektarov_es@mail.ru

Кристаллы квантовой оптики активно применяются в лазерной технике, спектроскопии, оптоволоконных линиях связи, фотонике и оптоинформатике, а также нашли многочисленые применения в различных отраслях промышленности. Изучение новых свойств кристаллов квантовой оптики позволяет расширить область их применения. Наиболее перспективными областями их применения являются квантовая оптическая память и квантовая сенсорика [1].

Эксперименты по измерению спектров кристаллов квантовой оптики в сильных электрических полях будут проводиться на Фурье-спектрометре Bruker IFS 125HR. Данный Фурье-спектрометр обладает всеми нужными характеристиками для проведения подобных экспериментов, такими как высокое спектральное разрешение, высокая чувствительность и фотометрическая точность, работа в широком диапазоне длин волн [3,4]. Также важной частью экспериментальной установки является гелиевый криостат замкнутого цикла, позволяющий проводить измерения в широком температурном диапазоне, в том числе при низких, «гелиевых», температурах. Это необходимо для возможности наблюдения тонких квантовых эффектов, например сверхтонкую структуру в электронных спектрах атомов.

Для проведения экспериментов в сильных электрических полях необходимо было разработать и изготовить специальную высоковакуумную ячейку со сложной системой изоляции электродов для избегания коронных разрядов в вакууме. Модели и чертежи деталей для ячейки разрабатывались в ПО Solidworks, сами детали изготавливались в мастерских Института спектроскопии РАН. Ячейка представляет собой два фторопластовых цилиндра сложной формы внутрь которых помещены два медных электрода, на которые подается напряжение вплоть до 70 кВ для создания электрического поля между ними. Расстояние между электродами варьируется от 7 до 20 мм, что позволяет получать электрические поля до 100 кВ/см. Между электродами, также в фторопластовой изоляции с маленькими отверстиями, выполняющими роль оптических окон, помещается исследуемый образец, приклеиваемый к медному пальцу криостата через прозрачный диэлектрический кристаллический материал (иттрий алюминиевый гранат — YAG), обеспечивающий сразу две функции — теплопередачу и изоляцию от медного пальца криостата.

На данный момент, выполнены все приготовления для проведения экспериментов по изучению влияния сильного электрического поля на кристаллы квантовой оптики. Ожидается увидеть эффект Штарка, вызванный электрическим полем, а также его влияние на сверхтонкую структуру кристаллов LiYF₄, легированных редкоземельными ионами.

Работа выполнена в рамках проекта Российского Научного Фонда (грант № 19-72-10132).

1. Б. Салех, М. Тейх, Оптика и фотоника. Принципы и применения. — Д.: Интеллект (2012).
2. M.N. Popova, N.I. Agladze, Molecular Physics **102(11-12)**, 1315 (2004).
3. K.N. Boldyrev, M.N. Popova, B.Z. Malkin, N.M. Abishev, Phys. Rev. B **99**, 041105R (2019).

КОНСТРУИРОВАНИЕ И АПРОБАЦИЯ МОБИЛЬНОГО ИНТЕРФЕРЕНЦИОННОГО МИКРОСКОПА

А.С. Тимохин

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
e-mail: sashatimokhin123@bk.ru

Интерферометры широко применяются в науке и промышленности для измерения малых смещений, показателя преломления, неровностей поверхности [1,2]. Кроме того, интерференционная микроскопия используется для исследования различных биологических объектов, в том числе живых клеток [4]. В большинстве интерферометров свет от одного источника разделяется на два луча, которые проходят по разным оптическим путям, а затем снова объединяются для создания интерференционной картины [3]. Полученная картина фиксируется фотодетектором (камерой). Далее ее анализируют с помощью специального программного обеспечения и получают необходимую информацию о изучаемом объекте.

Целью данной работы является создание и апробация малогабаритного интерференционного микроскопа, работающего в режиме микроизмерений. Данный гаджет представляет собой небольшое устройство, схожее по функциональности с лабораторными интерференционными микроскопами. Прибор крепится к задней части смартфона, используя его камеру в качестве фотодетектора, а от его аккумулятора получает необходимую для работы энергию. Расшифровка полученных данных также осуществляется на телефоне с помощью установленных на него программ. В отличие от своих аналогов, данный прибор является полностью автономным, так как не требует подключения к сети или компьютеру. Более того, разработанный аппарат можно адаптировать под практически любой смартфон.

Для апробации данного прибора был проведен эксперимент, в ходе которого исследовали эритроцит (красное кровяное тельце). При измерениях использовался объектив $40\times$ с апертурой 0.75. Источником излучения в аппарате служила красная лазерная указка с длиной волны $\lambda = 634$ нм и мощностью 5 мВт. Размер регистрируемого кадра составил 135×74 мкм. В ходе данного опыта была измерена площадь клетки, рассчитана ее фокальная высота, объем, а также был получен фазовый профиль клетки.

Результаты, полученные в ходе исследования, убедительно свидетельствуют о том, что сконструированный интерференционный микроскоп имеет те же функции, что и его современные аналоги.

1. В.А. Егоров, Оптические и щуповые приборы для определения шероховатости поверхностей. — М. Государственное научно-техническое издательство машиностроительной литературы (1961).
2. Е.Н. Мозес, Цеховые контрольные оптические приборы. —Л. —М. Госмашметиздат, (1933).
3. М. Франсон, Фазово-контрастный и интерференционный микроскопы. —М. Государственное издательство Физико-математической литературы, (1960).
4. А.И. Юсипович, С.М. Новиков, Т.А. Казанова, и др, Квант. электроника. **36**, 9 (2006).

ВЛИЯНИЕ ТИПА КОНТАКТОВ НА ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ УФ ДЕТЕКТОРОВ НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК ОКСИДА ГАЛЛИЯ

А.В. Цымбалов*, В.М. Калыгина

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

*e-mail: zoldmine@gmail.com

Оксид галлия является широкозонным полупроводниковым соединением, которое благодаря своим физико-химическим свойствам представляет практический интерес для создания солнечно-слепых детекторов ультрафиолетового излучения (УФД) [1,2]. В работе представлено влияние типа и вида электродов на фотоэлектрические характеристики детекторов. На рис. 1 приведены вольт-амперные характеристики УФД с межэлектродным расстоянием 250 и 5 мкм, полученные при воздействии длины волны $\lambda = 254$ нм.

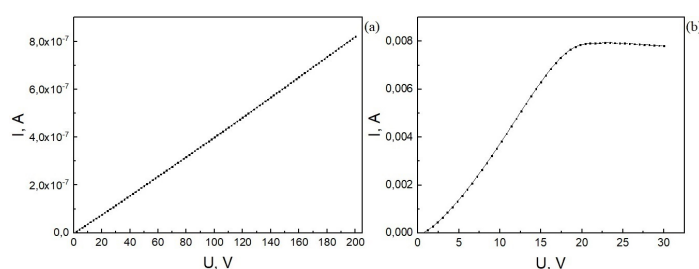


Рис. 1. Вольт-амперные характеристики детектора со сплошными параллельными электродами (а, где $d = 250$ мкм) и детектора со встречно-штыревыми электродами (b, где $d = 5$ мкм) полученные при воздействии излучением длины волны $\lambda = 254$ нм.

Было показано, что детекторы со встречно-штыревыми электродами имеют фотоэлектрические характеристики на несколько порядков лучше, чем у детекторов со сплошными параллельными контактами. В таблице 1 приведены характеристики УФД с различным расстоянием между электродами d , полученные при напряжении 10 В.

Детекторы со встречно-штыревыми контактами обладают наилучшими фотоэлектрическими характеристиками. С уменьшением межэлектродного расстояния повышается чувствительность детекторов к ультрафиолетовому излучению.

Таблица 1. Фотоэлектрические характеристики детекторов с различным межэлектродным расстоянием.

Межэлектродное расстояние d , мкм	Удельная обнаружительная способность D^* , $\text{см} \cdot \text{Гц}^{0.5} \cdot \text{Вт}^{-1}$	Токовая чувствительность R , А/Вт	Внешняя квантовая эффективность η , отн. ед.
250	$2.6 \cdot 10^{11}$	$6.8 \cdot 10^{-3}$	$66 \cdot 10^{-2}$
50	$1.1 \cdot 10^{13}$	0.4	1.9
5	$3.65 \cdot 10^{15}$	121	591

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 20-79-10043.

1. I. Cora, F. Mezzadri, F. Boschi *et al.*, CrystEngComm **19**, 1509 (2017).
2. K. Li, X. Yang, Y. Tian *et al.*, Science China Physics, Mechanics & Astronomy **63**, 117312 (2020).

АНАЛИЗ СПЕКТРОВ ДИФФУЗНОГО ОТРАЖЕНИЯ И ОСОБЕННОСТЕЙ
ТЕМПЕРАТУРНОГО ТУШЕНИЯ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В МИКРОПОРОШКЕ HfO_2 А.О. Шилов^{1*}, С.С. Савченко¹, А.С. Вохминцев¹, И.А. Вайнштейн^{1,2}¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия²Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия*e-mail: ao.shilov@urfu.ru

Представленная работа посвящена исследованию спектров диффузного отражения и фотолюминесценции (ФЛ) микрокристаллического порошка диоксида гафния (марка ГФО-1) в широком температурном диапазоне. Морфологические особенности порошка изучены с использованием сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) Carl Zeiss Sigma VP с модулем для анализа химического состава вещества методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии Oxford Instruments X-Max 80. Анализ фазового состава был проведен при помощи дифрактометра X'Pert PRO MPD PANalytical. Измерение спектров диффузного отражения при комнатной температуре было выполнено с помощью спектрофотометра SHIMADZU UV-2450 и интегрирующей сферы ISR-2200 в диапазоне 220 – 850 нм. Регистрация спектров фотолюминесценции проводилась на люминесцентном спектрометре марки LS55 PerkinElmer. Варьирование температуры образцов в диапазоне 60 – 300 К осуществлялось с использованием гелиевого криостата Janis CCS-100/204N, оснащенного контроллером LakeShore Model 335.

Согласно полученным снимкам СЭМ, исследуемый порошок HfO_2 содержит микрочастицы размером 1 – 40 мкм, каждая из которых, в свою очередь, является наноструктурированной и состоит из кристаллитов 50 – 200 нм. С использованием полученных изображений и специализированного программного обеспечения проведен количественный анализ распределения исследуемого порошка по размеру. По результатам рентгенофазовой и элементной аттестации установлено, что исследуемый порошок полностью состоит из кристаллического диоксида гафния в моноклинной фазе с почти стехиометрическим соотношением между гафнием и кислородом.

Измеренные спектры диффузного отражения проанализированы в рамках формализма Кубелки-Мунка. Показано, что в диапазоне $\lambda < 250$ нм наблюдается резкий рост оптического поглощения, который обусловлен электронно-оптическими переходами в области собственного края HfO_2 . С использованием построения Тауца получено, что в указанной спектральной области наблюдаются зависимости, характерные для не прямых и прямых разрешенных межзонных переходов. Расчетные оценки ширины запрещенной зоны 5.34 и 5.64 ± 0.05 эВ, соответственно, вполне согласуются с аналогичными величинами для структур HfO_2 , синтезированных разными методами и обладающих различной морфологией.

Установлено, что в спектрах свечения ФЛ исследуемого порошка HfO_2 при возбуждении фотонами с энергией 5.9 эВ присутствует полоса гауссовой формы с максимумом 4.07 – 4.24 эВ, который сдвигается в красную область с ростом температуры от 60 до 200 К, а интенсивность свечения при этом снижается до фоновых значений. Экспериментально наблюдаемое температурное тушение ФЛ изучено в рамках модели излучательной и безизлучательной релаксации возбуждений, с использованием соотношения Мотта получено значение 0.16 эВ для энергии активации. Природа и особенности наблюдаемого свечения обсуждаются в рамках сравнительного анализа с независимыми данными.

Работа выполнена при поддержке Программы 5-100 (постановление Правительства РФ № 211, контракт № 02.A03.21.0006) и проекта Минобрнауки FEUZ-2020-0059.

ЭЛЕКТРОННАЯ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРЫ БИ-ИНТЕРКАЛИРОВАННОГО
ДИСЕЛЕНИДА ТИТАНА $\text{Cu}_x\text{Ni}_y\text{TiSe}_2$ Е.Г. Шкварина^{1*}, А.И. Меренцов¹, М.С. Постников¹, А.С. Шкварин¹, С.В. Пряничников²,
А.Н. Титов¹¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия²Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия*e-mail: shkvarina@imp.uran.ru

Дихалькогениды титана исследуются уже много лет [1,2]. К настоящему времени принципы влияния интеркаляции на электронную структуру матрицы в целом поняты. В то же время, практически неисследованным остаётся формирование материалов, интеркалированных одновременно несколькими разными металлами. В настоящей работе мы выбрали для со-интеркаляции в TiSe_2 никель и медь, возможность со-интеркаляции этих металлов установлена в работе [3]. Выбор связан с тем, что медь может быть внедрена при комнатной температуре [4], минимально искажая решётку-хозяина и структуру подрешётки никеля, но сохраняя возможность переноса заряда.

Поликристаллическая фаза $\text{Cu}_x\text{Ni}_y\text{TiSe}_2$ была синтезирована методом последовательной интеркаляции сначала никеля, затем меди в предварительно синтезированный из элементов TiSe_2 . Интеркаляция меди выполнена при комнатной температуре методом, описанным в [4]. Удалось получить концентрационные разрезы с содержанием никеля 10 и 25 мол.%. Кристаллическая структура уточнена с использованием программы GSAS [5]. Спектральные эксперименты выполнены на линии VACN синхротрона Elettra (Trieste, Italy).

Уточнение кристаллической структуры показало, что параметры кристаллической решетки a и c слабо меняются при интеркаляции меди в Ni_xTiSe_2 . Внедрение меди приводит к переходу атомов никеля из октаэдрических позиций в тетраэдрические. Причем, в интервале составов $x = 0-0.12$ для $\text{Cu}_x\text{Ni}_{0.1}\text{TiSe}_2$ и $0-0.17$ для $\text{Cu}_x\text{Ni}_{0.25}\text{TiSe}_2$ каждый внедренный атом меди (а все они занимают октаэдрические поры) вытесняет 1 атом никеля из октаэдрических позиций в тетраэдрические. При достижении состава $\text{Cu}_{0.33}\text{Ni}_{0.25}\text{TiSe}_2$ величина заполнения тетраэдрических позиций достигает насыщения.

Анализ спектров системы $\text{Cu}_x\text{Ni}_y\text{TiSe}_2$ показал, что интеркаляция меди приводит к переносу заряда в $\text{Ti}3d$ -зону проводимости. Это приводит к повышению энергии Ферми, так, что зона $\text{Ni}3d/\text{Se}3d,4p$ оказывается под уровнем Ферми. Поскольку свободными у никеля в наблюдаемом состоянии Ni^{2+} остаются только $3d_{xz}$ и $3d_{yz}$ -орбитали, направленные на атомы селена, то заполнение $\text{Ni}3d$ -оболочки приводит к усилению взаимодействия никеля с селеном. Вероятно, именно это и вызывает переход атомов никеля из октаэдрических позиций, где основную роль играла химическая связь за счёт гибридизации $\text{Ti}3d/\text{Ni}3d$ -оболочек, в тетраэдрические, где никель окружён только атомами халькогена.

Работа выполнена при финансовой поддержке научного проекта РФФИ № 18-32-20141.

1. J.A. Wilson, A.D. Yoffe, Adv. Phys. **18**,193 (1969).
2. C. Lian *et al.*, Nat. Commun. **11**, 43 (2020).
3. A.A. Titov *et al.*, Phys. Solid State **59**, 145 (2017).
4. E.G. Shkvarina *et al.*, J. Chem. Phys. **147**, 044712 (2017).
5. A.C. Larson, R.B. Von Dreele GSAS: generalized structure analysis system, Doc. LAUR. 86 - 748 (1994).

ЭЛЕКТРОННАЯ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА Cr_xZrTe_2

А.С. Шкварин*, А.А. Титов, М.С. Постников, Е.Г. Шкварина, А.И. Меренцов, П.А. Агзамова,
А.Н. Титов

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: shkvarin@imp.uran.ru

Исследование электронной структуры систем Cr_xTiCh_2 , $Ch = \text{Se}, \text{Te}$ [1] обнаружило два важных факта: 1) состояния хрома расположены непосредственно на уровне Ферми или вблизи него; и 2) они спиново поляризованы с величиной расщепления спиновых подзон ~ 1 эВ. Такого рода материалы могут представлять большой интерес в качестве материалов спинтроники. Однако, дело осложняется тем обстоятельством, что в TiSe_2 и TiTe_2 щель между $\text{Ti } 3d$ -образной зоной проводимости и Se или Te p -образной валентной зоной отсутствует. Это приводит к тому, что спиново поляризованные состояния Cr залегают на фоне спиново неполяризованных состояний Ti и халькогена. В TiS_2 щель имеется, однако, этот материал, известный своей нестехиометрией, всегда загрязнён избытком титана, обеспечивающего значительную концентрацию избыточных электронов [2]. Этого нет в дихалькогенидах циркония — ZrSe_2 и ZrTe_2 , показывающих наличие щели (для $\text{ZrSe}_2 \sim 1$ эВ [3], для ZrTe_2 псевдощель [4]) на уровне Ферми. Интеркаляция хрома в такие решётки может обеспечить полную спиновую поляризацию состояний на уровне Ферми при условии попадания $\text{Cr } 3d$ -состояний непосредственно на уровень Ферми. Настоящая работа посвящена синтезу интеркалатной системы Cr_xZrTe_2 и исследованию её кристаллической и электронной структуры с целью определения положения состояний хрома относительно уровня Ферми.

Впервые выполнен синтез и комплексное изучение электронной и кристаллической структуры. Структуру и фазовый состав образцов исследовали при комнатной температуре с использованием рентгеновской порошковой дифракции на дифрактометре Shimadzu XRD 7000 Maxima ЦКП Урал-М. Спектральные исследования образца $\text{Cr}_{0.25}\text{ZrTe}_2$ выполнены при комнатной температуре на линии VACH синхротрона Elettra (Trieste, Italy).

Исследование структурных данных показало, что подрешётка интеркаланта балансирует между заполнением окта- и тетра-позиций. Расчет плотности состояний, находящийся в хорошем согласии с экспериментально полученными спектральными данными, показал, что состояния хрома спин поляризованы, однако на уровне Ферми эти состояния гибридованы с состояниями циркония и теллура.

Работа выполнена при финансовой поддержке научного проекта РФФИ № 20-03-00275.

1. A.N. Titov *et al.*, Phys. Rev. B. **63**, 035106 (2001).
2. J.A. Wilson, A.D. Yoffe, Adv. Phys. **18**, 193 (1969).
3. M. Moustafa *et al.*, Phys. Rev. B. **80**, 035206 (2009).
4. D.N. Bhavsar, A.R. Jani, J. Optoelectron. Adv. Mater. **16**, 215 (2014).

ВЛИЯНИЕ САМОИНТЕРКАЛАЦИИ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ TiSe_2

А.С. Шкварин*, А.И. Меренцов, А.Н. Титов

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: shkvarin@imp.uran.ru

Дихалькогениды переходных металлов IV группы с общей формулой TX_2 , $T = \text{Ti, Zr, Hf}$; $X = \text{S, Se, Te}$ [1] и их интеркалатные производные [2] привлекают внимание долгое время. Причиной тому широкие возможности модифицировать материал, вводя атомы щелочных, благородных, переходных и редкоземельных металлов в межслоевое пространство решётки TX_2 . В то же время, давление пара халькогена над поверхностью TX_2 при температуре синтеза может достигать нескольких атмосфер, см., например [3]. Испарение халькогена означает самоинтеркаляцию основным металлом T . Этому явлению стараются избежать при синтезе, поскольку содержание избыточного металла T плохо поддаётся контролю. Однако избежать этого не удаётся. Поэтому изучение влияния на электронную структуру присутствия самоинтеркалированного металла критически важно. Данные относительно влияния самоинтеркаляции на электронную структуру TX_2 скудны. Они, в основном, основаны на анализе физических свойств при самоинтеркаляции [4], либо структурных изменений и переходов [5]. Следует отметить, что во всех этих работах уровень самоинтеркаляции составлял самое большее несколько мольных процентов.

В настоящей работе мы выполнили исследование влияния самоинтеркалированного титана на электронную структуру TiSe_2 с использованием фотоэлектронной спектроскопии XPS, резонансной фотоэлектронной спектроскопии (ResPES) и первопринципных расчетов плотности состояний. Кристаллы TiSe_2 с избытком титана изготовлены путём отжига в вакуумированной ампуле в условиях температурного градиента с тем, чтобы испарённый селен конденсировался на холодном конце ампулы. Предварительно состав полученных кристаллов определяли взвешиванием кристаллов до и после отжига и взвешиванием конденсированного халькогена. Он оказался Ti_xTiSe_2 с $x = 1 \pm 0.5$. Из-за малой массы кристаллов такой метод приводит к большой ошибке определения состава. Поэтому состав образца определен непосредственно из интенсивности спектров основных линий и составляет примерно $\text{TiSe}_{1.2 \pm 0.06}$, что соответствует $\text{Ti}_{0.66}\text{TiSe}_2$. Спектральные эксперименты были выполнены на линии Material Science синхротрона ELETTRA.

Интеркаляция титаном в электронной конфигурации d^0 не может приводить к упорядочению иначе чем через взаимодействие с решёткой. Химическая связь самоинтеркалированного титана возможна лишь с атомами титана, ближайшими вдоль оси c . Поскольку решётка TiSe_2 образована за счёт химической связи Ti и Se, то следует ожидать участия состояний Se в химической связи межслоевого Ti с решёткой-хозяином. Основные состояния Se остаются без изменений, дополнительные же состояния возникают из-за появления атомов Se с повышенной координацией атомами Ti. Присутствие межслоевого титана приводит к формированию зоны состояний, сформированной гибридизацией $\text{Ti}3d_{zz}$ состояний титана на решётки-хозяина и межслоевого титана. Перенос заряда в зону проводимости при этом не наблюдается.

Работа выполнена при финансовой поддержке научного проекта РФФИ № 18-32-20141.

1. A.H. Thompson, Phys. Rev. Lett. **35**, 1786 (1975).
2. M.S. Whittingham, Prog. Solid State Chem. **12**, 41 (1978).
3. M. Inoue, J. Phys. Chem. Solids. **57**, 1109 (1996).
4. H. Moutaabbid, Inorg. Chem. **55**, 6481 (2016).
5. Q. Ji, Nano Lett. **17**, 4908 (2017).

ТЕОРИЯ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКОГО ОТКЛИКА ОБЕЗДВИЖЕННЫХ
ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ДИПОЛЬНЫХ ЧАСТИЦ В ПЕРЕМЕННО
ЛИНЕЙНО-ПОЛЯРИЗОВАННОМ ПОЛЕ

А.В. Амбаров*, Е.А. Елфимова, В.С. Зверев

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: alexander.ambarov@urfu.ru

Внедрение большого количества магнитных наночастиц в жидкую или полимерную матрицу позволяет управлять свойствами композитного материала с помощью внешнего магнитного поля. Такие материалы, так называемые магнитные мягкие вещества, включают феррожидкости, магнитные эластомеры, феррогели и различные биосовместимые магнитные наполнители. Эти сложные системы вызывают значительный интерес у исследователей, медиков и инженеров, поскольку они активно используются в прогрессивных высоких промышленных и биомедицинских технологиях.

В работе численно исследуется динамический отклик ансамбля взаимодействующих феррочастиц, находящихся в линейно поляризованном переменном магнитном поле. Предполагается, что релаксация магнитных моментов феррочастиц происходит по неелевскому механизму, оси легкого намагничивания всех частиц сонаправлены и параллельны переменному магнитному полю.

Вращательное движение магнитного момента случайной феррочастицы определяется из решения уравнения Фоккера-Планка, в которое вводится дополнительное слагаемое, позволяющее учесть межчастичные диполь-дипольные взаимодействия на уровне модифицированной теории среднего поля первого порядка [1]. Полученные решения для плотности вероятности ориентации магнитного момента случайной частицы используются для определения динамической восприимчивости. Численное решение уравнения Фоккера-Планка основано на безусловно устойчивой схеме для задач конвекции-диффузии.

Численно исследованы намагниченность, восприимчивость и время релаксации. Показано, что увеличение амплитуды переменного поля существенно ускоряет релаксационные процессы в рассматриваемой системе, а увеличение магнитной анизотропии частицы и межчастичных диполь-дипольных взаимодействий замедляет их. Численные результаты сравниваются с аналитическими решениями [2], надежными в слабом переменном поле, и получается превосходное согласие.

Полученные результаты представляют собой существенную информацию при проектировании и синтезе новых функциональных материалов.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ № 20-32-90209.

1. A.O. Ivanov, V.S. Zverev, S.S. Kantorovich, *Soft Matter* **12**, 3507 (2016).
2. A.V. Ambarov, V.S. Zverev, E.A. Elfimova, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **497**, 166010 (2020).

ПОТЕНЦИАЛЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ОСНОВЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В РАСПЛАВАХ TiZrHfNb и TiZrHfSc

И.А. Балякин^{1,2*}, Р.Е. Рыльцев^{1,2}, С.А. Упоров^{1,2}, А.А. Ремпель^{1,2}

¹Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: i.a.balyakin@gmail.com

Молекулярное моделирование многокомпонентных систем сопряжено с рядом трудностей. Так, например, использование метода классической молекулярной динамики (МД) подразумевает предварительный выбор ряда параметров взаимодействия, и для многокомпонентных систем такой выбор может оказаться сложной задачей. Использование же *ab initio* МД для таких систем ограничено в связи с низкой производительностью метода, поскольку для многокомпонентных систем, необходимый объем статистики существенно больше, чем для простых или бинарных соединений. Компромиссом может являться использование потенциалов взаимодействия на основе нейронных сетей. Такие потенциалы, ввиду сложной функциональной формы, теоретически способны описать любую непрерывную функцию многих переменных (в частности, поверхность потенциальной энергии материала как функцию координат всех атомов) [1]. Основная идея состоит в тренировке искусственных нейронных сетей (ИНС), представляющих собой локальные атомные вклады в энергию системы, по *ab initio* данным. При этом *ab initio* данных может оказаться и недостаточно для построения интересующих функций (например, радиальной функции распределения), но достаточно для тренировки потенциала. В данной работе были рассмотрены расплавы TiZrHfNb и TiZrHfSc. Для расплавов данных систем были проведены *ab initio* МД расчеты, на основе которых, методами машинного обучения были получены ИНС-потенциалы в рамках подхода DeePMD [2]. Полученные потенциалы хорошо воспроизводят структуру и динамику данных систем. В качестве примера на рисунке 1а приведена радиальная функция распределения Ti-Ti в системе TiZrHfNb, полученная как методом *ab initio* МД, так и методом DeePMD. А на рисунке 1б показаны среднеквадратические смещения для различных типов атомов в системе TiZrHfNb, видно, что DeePMD подход позволил существенно расширить временные масштабы моделирования.

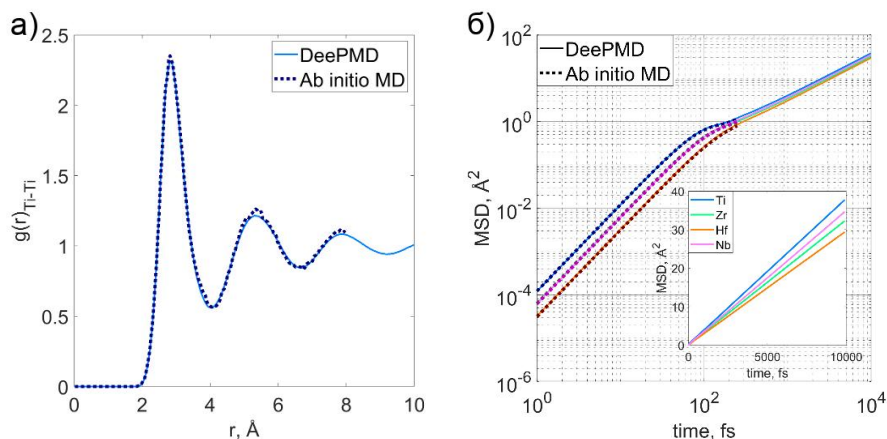


Рис. 1. Сравнение *ab initio* МД и DeePMD результатов. а) — радиальная функция распределения Ti-Ti; б) — среднеквадратические смещения различных типов атомов.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (РНФ — 19-73-20053).

1. G.V. Cybenko, Mathematics of Control Signals and Systems **2**, 4 (1989).
2. H. Wang et al., Computer Physics Communications **228** (2018).

УЧЕТ ЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ ПРИ РАСЧЕТЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ, МАГНИТНЫХ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТРОЙНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ $RCuGe$ Л.Н. Граматеева^{1*}, А.В. Лукоянов^{1,2}, Ю.В. Князев¹, Ю.И. Кузьмин¹, С. Гупта^{3,4}, К.Т. Суреш⁴¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия²Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия³Факультет электроники и техники, Университет Киото, Киото, Япония⁴Физический факультет, Индийский технологический институт Бомбей, Мумбай, Индия*e-mail: gramateeva@imp.uran.ru

В последнее время широко изучаются тройные интерметаллические соединения RTX , где R — редкоземельные, T и X — d - и p -элементы, соответственно [1,2]. В различных соединениях этого семейства был обнаружен ряд магнитных и электрических свойств, полезных для фундаментальных исследований и практического применения, в том числе магнитокалорический эффект и магнитосопротивление [3], переход от антиферромагнитного к ферромагнитному порядку [4], богатая фазовая диаграмма с магнитными переходами [5]. Целью работы является комплексное изучение электронных, магнитных и оптических свойств тройных интерметаллидов $RCuGe$, а также рассмотрение эффектов сильных электронных корреляций.

Соединения $RCuGe$ ($R = Tb, Dy, Ho, Er$) кристаллизуются в гексагональную структуру типа $LiGaGe$ с пространственной группой симметрии $P6_3mc(\#186)$ [6]. При выполнении расчетов предполагалось антиферромагнитное упорядочение магнитных моментов ионов R в элементарной ячейке.

Были проведены теоретические расчеты электронной структуры тройных интерметаллидов $RCuGe$, где $R = Tb, Dy, Ho, Er$. Теоретические расчеты электронной структуры с использованием приближения локальной спиновой плотности с учетом электронно-электронных корреляций в $4f$ -оболочке ионов Tb, Dy, Ho, Er проводились методом DFT+U. Получены спектральные и электронные характеристики. Теоретические электронные плотности состояний были взяты для интерпретации экспериментальных энергетических зависимостей экспериментальной оптической проводимости в межзонной области поглощения света. Из зонных расчетов было показано, что $4f$ -оболочка редкоземельных ионов вносит основной вклад в электронную структуру, магнитные и оптические свойства интерметаллидов $RCuGe$. Основные различия в электронной плотности состояний соединений $RCuGe$ обусловлены $4f$ -состояниями редкоземельных ионов в низкоэнергетической заполненной зоне, а также пустыми состояниями выше энергии Ферми. Полученные результаты опубликованы в статье [1].

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 18-72-10098.

1. A.V. Lukoyanov, L.N. Gramateeva, Y.V. Knyazev, Y. I. Kuz'min, S. Gupta, K. G. Suresh, *Materials* **13**, 3536 (2020).
2. S. Gupta, K.G. Suresh, *J. Alloys Compd.* **618**, 562 (2015).
3. H. Zhang, Y. Li, E. Liu, Y. Ke, J. Jin, Y. Long, B. Shen, *Sci. Rep.* **5**, 11929 (2015).
4. F. Guillou, A.K. Pathak, T.A. Hackett, D. Paudyal, Y. Mudryk, V.K. Pecharsky, *J. Phys. Condens. Matter.* **29**, 485802 (2017).
5. A. Gil, *Phase Trans.* **91**, 140 (2018).
6. A. Iandelli, *J. Alloys Compd.* **198**, 141 (1993).

ПЕРВОПРИНЦИПНАЯ МОДЕЛЬ ДВУХСЛОЙНОГО ГРАФЕНА: ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ

М.В. Каплун*, В.П. Бескачко, Е.В. Аникина

Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия

*e-mail: kaplun.mariya@mail.ru

Двухслойный графен (bilayer graphene — BLG) может существовать в нескольких геометрических конфигурациях: AA-, AB-конфигурации (рис. 1а,б), tBLG-конфигурация, получаемая поворотом одного из слоев на малый угол (рис. 1с) [1], а также «промежуточная» между AA и AB структурами [2].

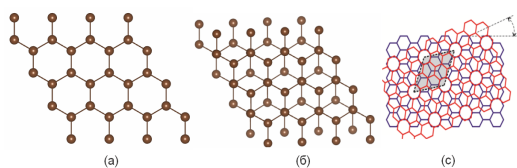


Рис. 1. Двухслойный графен: (а) AA-структура; (б) AB-структура; (с) tBLG.

Подобные структуры могут найти применение в наноэлектронике и оптоэлектронике благодаря высокой электропроводности и теплопроводности, малому коэффициенту поглощения и т.д.

Для исследования электронных свойств AA-структуры BLG использовались два программных пакета: SIESTA для предварительной оптимизации геометрии системы и VASP для проверки результатов в SIESTA. Для SIESTA характерна быстрота расчетов,

базисный набор реализован в качестве псевдоатомных орбиталей, VASP же имеет более качественные псевдопотенциалы и базис плоских волн.

Исследования проводились для свободной системы (без фиксации слоев) и с фиксацией слоев по трем возможным направлениям. В расчетах использовались приближения локальной электронной плотности (LDA) и обобщенных градиентов (GGA) для обменно-корреляционного функционала, т.к. они позволяют оценить эффекты дисперсионных взаимодействий, играющих заметную роль в связывании слоев графена сверху и снизу, соответственно [3].

Энергии связи (E_{bind}) рассчитывались по формуле: $E_{\text{bind}} = E_1 - 2E_2$, где E_1 и E_2 — полные энергии системы (два слоя) и изолированного слоя, соответственно. При вычислениях в пакете SIESTA также учитывались поправки Бойса-Бернарди к ошибке суперпозиции базисного набора. Полученные результаты для структур без фиксации представлены в таблице 1.

Таблица 1. Расчетные значения энергии и смещений без фиксации системы

Пакет	Приближение	GGA			LDA		
		Сдвиг слоя	$\Delta z=3.73$	$\Delta x=1.24$	$\Delta y=0.71$	$\Delta z=3.44$	$\Delta x=1.22$
SIESTA	Энергия связи, мэВ	57	65	60	-613	-859	-901
	Расстояние между слоями, Å	3.73	3.53	3.50	3,44	3,25	3.23
VASP	Энергия связи, мэВ	-36	-41	-42	-478	-734	-783
	Расстояние между слоями, Å	4.50	4.39	4.38	3.60	3.36	3.32

Таким образом, было обнаружено, что без фиксации слоев структура приходит в устойчивую AB-структуру; оценки E_{bind} в приближении LDA, полученные с помощью двух пакетов (VASP и SIESTA), согласуются между собой и близки к экспериментальным значениям (AA-структура — 3.55 Å и AB-структура — 3.35 Å) [2]. Оценки GGA в ряде случаев предсказали отталкивание слоев в SIESTA и большое значение межслойного расстояния в VASP, что говорит о целесообразности выбора приближения LDA для описания исследуемой структуры.

1. A.V. Rozhkov *et al.*, Phys. Rep. **648**, 1 (2016).
2. J.-K. Lee *et al.*, J. Chem. Phys. **129**, 234709 (2008).
3. J. Klimes, A. Michaelides, J. Chem. Phys. **137**, 120901 (2012).

ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ ПОЛУЖЕСТКИХ БОЗОНОВ: РОЛЬ ЛОКАЛЬНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ

В.В. Конев*, Ю.Д. Панов

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: vitaliy.konev@urfu.ru

В последнее время много внимания уделяется различным вариантам модели Бозе-Хаббарда, например, модели «жестких» (hard-core) или «полужестких» (semi-hard-core) бозонов [1]. В данной работе рассматривается система заряженных бозонов с возможным заполнением на узле $n = 0, 1, 2$, или, на псевдоспиновом языке, система с псевдоспином $S = 1$ ($n = \langle S_z \rangle + 1$) [2].

В зависимости от соотношения между параметрами гамильтониана и величины среднего заполнения, состояние системы соответствует: неупорядоченной (NO) фазе, фазе зарядового упорядочения (charge ordering, CO) – аналогу антиферромагнитного упорядочения $\langle S_z \rangle$, сверхпроводящей (superfluid, SF) фазе с отличным от нуля параметром порядка $\langle S_{\pm}^2 \rangle$. Также может реализоваться (supersolid, SS) фаза – на одном узле параметры порядка CO и SF фаз отличны от нуля, либо фазовое расслоение (phase separation, PS) – неоднородная смесь CO и SF фаз.

Известно, что для «жестких» бозонов ($\Delta \rightarrow -\infty$) на двумерной решетке границы PS и SS фаз совпадают, но глобальным минимумом является PS фаза [1]. Нами получена фазовая диаграмма для модели «полужестких» бозонов. При $\Delta=0.4$ наблюдаются существенные изменения (см. рис. 1): SS фаза занимает меньшую область, чем PS. Важно отметить, что фазовое расслоение соответствует глобальному минимуму свободной энергии, а SS фаза – метастабильному состоянию.

Работа была выполнена при поддержке госзадания FEUZ-2020-0054.

1. K. J. Kapcia, S. Robaszkiewicz, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **461**, 487 (2016).
2. A. S. Moskvina, *Physical Review B* **84**, 075116 (2011)

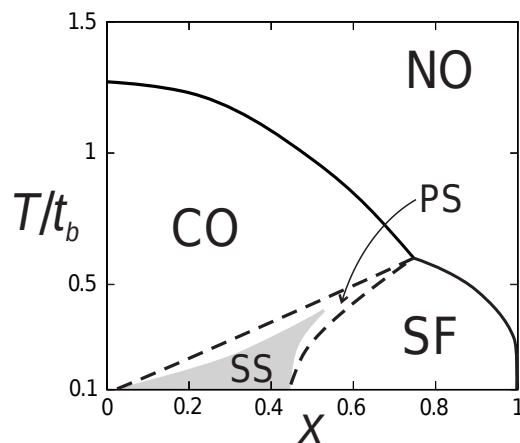


Рис. 1. Фазовая диаграмма в переменных x - T , где $x=n-1$ — отклонение от половинного заполнения при $\Delta/t_b=0.4$, $V/t_b=0.75$, полученная в методе среднего поля. Черной сплошной линией обозначены границы CO-NO и SF-NO фаз. Пунктирной линией определена граница PS фазы. Серым цветом показана область существования метастабильной SS фазы.

КРИТЕРИЙ ИОФФЕ-РЕГЕЛЯ И БОЗОННЫЙ ПИК В АМОРФНЫХ ТЕЛАХ С ТОЧКИ ЗРЕНИЯ ТЕОРИИ СЛУЧАЙНЫХ МАТРИЦ

Д.А. Коных*, Я.М. Бельтюков

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

*e-mail: conyuh.dmitrij@yandex.ru

В аморфных диэлектриках наблюдается ряд универсальных свойств, принципиально отличающихся от свойств аналогичных кристаллов. Это диффузия колебаний выше порога Иоффе-Регеля, но ниже порога локализации [1]. Колебания в этой области спектра определяют теплопроводность аморфных диэлектриков при температуре от 20 до 1000 К, однако природа таких возбуждений до настоящего времени невыяснена. Практически во всех стеклах наблюдается бозонный пик, характеризующий избыточную над дебаевской плотность колебательных состояний [2]. Во многих работах отмечается связь бозонного пика и кроссовера Иоффе-Регеля, однако полноценная теория этих феноменов отсутствует.

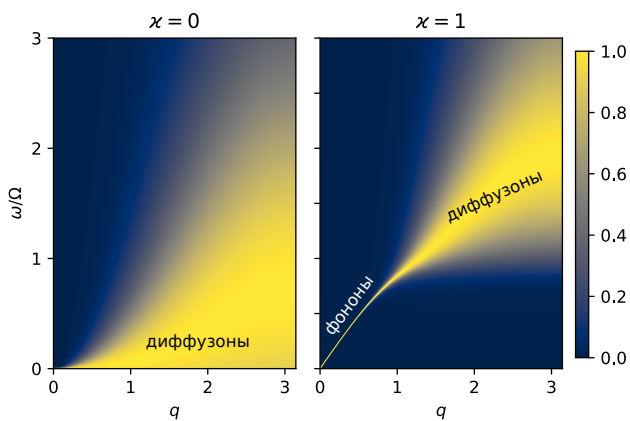


Рис. 1. Колебательные моды неупорядоченного тела в обратном пространстве. Цветом показан нормированный фурье-образ собственных мод.

ские выражения для плотности колебательных состояний и динамического структурного фактора. Анализ этих выражений показывает, что существуют две принципиально разные области колебаний, разделенные между собой некоторой частотой кроссовера. Мы показали, что эта частота играет роль частоты кроссовера Иоффе-Регеля между низкочастотными слабозатухающими фононами и диффузионными колебаниями на более высоких частотах с затуханием $\Gamma \propto q^2$. При этом в приведенной плотности колебательных состояний вблизи перехода Иоффе-Регеля возникает бозонный пик, частота которого универсальным образом коррелирует с частотой кроссовера Иоффе-Регеля и с модулем Юнга аморфной среды.

Авторы благодарят Совет по грантам Президента Российской Федерации за финансовую поддержку (грант № МК-3052.2019.2).

1. P. B. Allen, J. L. Feldman, Phys. Rev. B **48**, 12581 (1993).
2. V.L. Gurevich, D.A. Parshin, H.R. Schober, Phys. Rev. B, **67**, 094203-1 (2003).
3. Y.M. Beltukov, V.I. Kozub, D.A. Parshin, Phys. Rev. B, **87**, 134203-1 (2013).
4. Z. Burda, A. Görlich, A. Jarosz, J. Jurkiewicz, Phys. A **343**, 295 (2004).

В рамках подхода теории случайных матриц мы демонстрируем, что только два наиболее важных симметричных свойства механической системы — устойчивость вблизи положения равновесия и инвариантность потенциальной энергии относительно сдвига системы, воспроизводят основные универсальные колебательные свойства аморфных тел ниже порога локализации. При этом динамическая матрица \hat{M} , описывающая колебания системы, представляется в виде коррелированного ансамбля Вишарта случайных матриц $\hat{M} = \hat{A}\hat{A}^T$ [3].

Учитывая наиболее важные корреляции между матричными элементами динамической матрицы M_{ij} [4], мы нашли аналитические

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЛНОВОЙ КАПИЛЛЯРНОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ В АНИЗОТРОПНОЙ ГЕОМЕТРИИ

Е.А. Кочурин

Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: kochurin@iep.uran.ru

Настоящая работа посвящена численному исследованию волновой капиллярной турбулентности поверхности жидкости, развивающейся в анизотропной плоско-симметричной геометрии. Классическим результатом в исследовании изотропной капиллярной турбулентности является спектр Захарова-Филоненко [1], описывающий переход энергии в малые масштабы (прямой энергетический каскад). Ключевую роль в формировании прямого каскада энергии играют так называемые волновые резонансы (когда энергия и импульс взаимодействующих волн сохраняются). В изотропной капиллярной турбулентности доминируют трех-волновые резонансы. В анизотропной плоско-симметричной геометрии происходит вырождение трех-волновых взаимодействий, как следствие, доминирующую роль могут играть резонансы более высокого порядка, например, четвертого.

В настоящей работе на основе анализа размерностей [2] аналитически получены оценки для спектров капиллярной турбулентности поверхности жидкости в плоской геометрии. Спектры получены для прямого энергетического каскада в предположении о резонансных трех- и четырех-волновых взаимодействиях. Для того чтобы продемонстрировать возможность развития капиллярной турбулентности в одномерной геометрии, в работе проведено прямое численное моделирование эволюции поверхности жидкости на основе кубически нелинейной модели. Результаты моделирования показывают, что рассчитанный спектр турбулентности лучше описывается спектром, полученным для четырех-волновой системы. Проведенный корреляционный анализ также подтверждает тот факт, что доминирующим процессом в исследуемой задаче являются четырех-волновые резонансные взаимодействия.

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 19-71-00003.

1. V.E. Zakharov, N.N. Filonenko, J. Appl. Mech. Tech. Phys. **4**, 506, (1967).
2. C. Connaughton, S. Nazarenko, and A.C. Newell. Physica D **184**, 86 (2003).

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАМЕСТИТЕЛЬНОЙ АДсорбЦИИ ПЛЕНКИ ЖЕЛЕЗА
НА ПОВЕРХНОСТИ СЕРЕБРА

М.В. Мамонова*, А.С. Макаричева

Омский государственный университет имени Ф. М. Достоевского, Омск, Россия.

*e-mail: mamonovamv@omsu.ru

Данная работа посвящена расчету энергетических и магнитных характеристик при заместительной адсорбции монослойной ферромагнитной плёнки железа на поверхности серебра. Заместительная адсорбция характеризуется тем, что адсорбированные атомы металла могут выталкивать приповерхностные атомы субстрата в пленку и занимать их место. В первом приповерхностном слое подложки и в пленке образуется смесь атомов субстрата и адсорбата, которая по своим свойствам напоминает бинарный раствор двух металлов. При этом смешивании наблюдается изменение магнитных и энергетических характеристик. Исследования проводились с применением двух подходов: вариационного метода [1] функционала спиновой плотности с учётом температурных эффектов и неоднородного распределения намагниченности и первопринципного, реализованного с помощью программного комплекса VASP [2]. Проводились расчеты полной и межфазной энергии, магнитного момента и энергии адсорбции системы Fe/Ag в зависимости от ориентации грани подложки, параметра покрытия Θ и доли адатомов в пленке p .

Первопринципные расчеты для ориентации грани (100) показали, что наибольший магнитный момент атома железа $\mu = 3.045\mu_B$, наблюдается при параметре покрытия $p = 1$ (непрерывная пленка), но при этом энергия адсорбции положительна $E_{ads} = 0.34$ эВ, что демонстрирует невозможность образования непрерывной пленки. Для более энергетически выгодной системы $E_{ads} = -2.04$ эВ при $p = 0$ (структуры типа «сэндвич») магнитный момент $\mu = 2.932\mu_B$. Результаты расчетов для различных вариантов положения замещающих атомов, для доли адатомов $p = 0.25$ и $p = 0.75$ показали, что смена позиций в ячейке замещающих атомов не влияет на энергетические и магнитные характеристики. Для $p = 0.5$ есть два случая замещения: послойное и в шахматном порядке. Послойное расположение оказалось энергетически более выгодно, но с меньшей намагниченностью.

Таким образом в работе выявлено сильное влияние перемешивания и энергетическая выгодность образования структуры типа «сэндвич». При $T = 0$ и параметре покрытия $\Theta = 1$ на Ag непрерывная пленка Fe образовываться не будет. Выводы, полученные в первопринципных расчетах, подтверждаются вариационным методом и экспериментальными исследованиями [3].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ. Для проведения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН», Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН, Суперкомпьютерного центра МГУ им. М.В. Ломоносова.

1. В.В.Прудников, В.В.Прудников, М.В.Мамонова, Теоретические методы расчета структурных, энергетических и магнитных характеристик систем с межфазным взаимодействием, — Омск:изд-во ОмГУ (2017).
2. P.G. Kresse and J. Furthmuller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
3. A. Nahlin, C. Andersson, J. Hunter Dunn, B. Sanyal, O. Karis and D. Arvanitis, Phys. Rev. B **73**, 134423 (2006).

МАГНИТНЫЙ ПЕРЕХОД В $3d$ -ПОДРЕШЕТКЕ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ $GdMn_{1-x}Ti_xSi$
ДЛЯ $x = 0 - 1$ Р.Д. Мухачев^{1,2*}, А.В. Лукоянов^{1,2}¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия²Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*e-mail: r.d.mukhachev@outlook.com

В работе исследованы особенности электронной структуры и магнитных свойств тройных интерметаллидов на основе гадолиния $GdMn_{1-x}Ti_xSi$ в рамках метода $DFT+U$. Соединение $GdMnSi$ является ферромагнетиком с температурой Кюри $T_C = 314$ К, кристаллизуется в тетрагональной структуре $P4/nmm$ $CeFeSi$ типа (пространственная группа 129) с 2 формульными единицами в элементарной ячейке [1]. Ионы гадолиния занимают позиции 2c (0.25, 0.25, Z_{Gd}), ионы марганца и титана — позиции 2a (0.75, 0.25, 0), ионы кремния — позиции 2c (0.25, 0.25, Z_{Si}) [2]. Электронная структура и магнитные свойства интерметаллидов рассчитывались в рамках метода $DFT+U$ ($GGA+U$) [3] в пакете программ Quantum ESPRESSO [4] с использованием обменно-корреляционного функционала в приближении обобщенной градиентной поправки (GGA) версии PBE. Волновые функции раскладывались по плоским волнам, взаимодействия между ионами и валентными электронами учитывались в рамках метода присоединенных плоских волн. Для учета сильных электронных корреляций $4f$ -электронов Gd была включена U поправка для параметров прямого кулоновского $U = 6.7$ эВ и обменного (хундовского) $J = 0.7$ эВ взаимодействий. Данные значения являются общепризнанными для ионов Gd.

Проведенный анализ плотностей электронных состояний и магнитных моментов ионов в $GdMnSi$, легированном Ti показал существенное изменение магнитных свойств в зависимости от содержания Mn и Ti. Вместе с магнитным моментом, практически во всех составах $GdMn_{1-x}Ti_xSi$ обнаружено увеличение величины плотности электронных состояний на уровне Ферми, при увеличении содержания Ti, что может свидетельствовать о существенном изменении транспортных свойств интерметаллидов. Выявленные ожидаемые температуры Кюри порядка 300 К, а также изменения магнитных характеристик и электронной структуры делают систему интерметаллидов $GdMn_{1-x}Ti_xSi$ перспективной для использования в приложениях микроэлектроники.

1. С.А. Никитин, Физика твердого тела **44**, 297 (2002).
2. M. Napoletano, F. Canepa, P. Manfrinetti, F. Merlo, J. Mater. Chem. **10**, 1663 (2000).
3. V.I. Anisimov, F. Aryasetiawan, A.I. Lichtenstein, J. Phys.: Condens. Matter **9**, 767 (1997).
4. P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 395502 (2009).

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА АНАЛОГА ЖЕЛЕЗНОГО СВЕРХПРОВОДНИКА BaCo_2P_2 Н.С. Павлов^{1*}, И.А. Некрасов¹, Д.В. Евтушинский²¹Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия²Institute of Physics, Ecole Polytechnique Federale Lausanne, Lausanne, Switzerland*e-mail: pavlovns@gmail.com

Исследование явления сверхпроводимости остаётся одной из актуальной задач. На сегодняшний день синтезировано достаточно много разных классов сверхпроводящих систем. Одним из них является класс сверхпроводящих соединений, содержащих FeAs [1] или FeSe [2]. В данной работе исследована электронная структура аналога железного сверхпроводника BaCo_2P_2 . Настоящая работа является частью работы по рассмотрению ряда аналогов железных сверхпроводников в структуре 122 (BaCo_2P_2 , BaMn_2As_2 , BaMn_2P_2 , BaCr_2As_2). Общая цель работы — поиск закономерности электронной структуры в одном ряду, и понимание, чем они отличаются от систем на основе железа.

Теоретическое моделирование электронной структуры BaCo_2P_2 производилось в рамках теории функционала электронной плотности (LDA). Для учёта корреляционных эффектов на Co-3d состояниях дополнительно к LDA использовался метод решения модели Хаббарда в рамках теории динамического среднего поля (DMFT) [3]. Такой подход называется LDA+DMFT [4]. Экспериментально данное соединение исследовано с помощью фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) [5] в широком диапазоне энергий связи.

Результаты расчётов приведены на рис. 1. Параметры взаимодействия модели Хаббарда составляли $U=4.0$ эВ, $J=0.85$ эВ. На уровне Ферми есть небольшое смещение LDA+DMFT квазичастичных зон за счёт электронных корреляций. Эффективная масса Co-3d состояний на уровне Ферми составила ($m^*/m \sim 1.2 - 1.4$). Заметное влияние электронных корреляций — смещение основного пика в плотности Co-3d состояний с 1 до 1.7 эВ. Это отличает BaCo_2P_2 от сверхпроводников на основе FeAs, где за счёт корреляций происходит общее сжатие зонной структуры Fe-3d состояний ($m^*/m \sim 3$) и приближение основных пиков ближе к уровню Ферми.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ № 20-02-00011. Работа Н.С.П. частично поддержана грантом Президента РФ МК-1683.2019.2.

1. М.В. Садовский, УФН **178**, 1243 (2008).
2. М.В. Садовский, УФН **186**, 1035 (2016).
3. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M.J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
4. G. Kotliar *et al.*, Rev. Mod. Phys. **78**, 865 (2006).
5. R. Comin, A. Damascelli, arXiv:1303.1438.

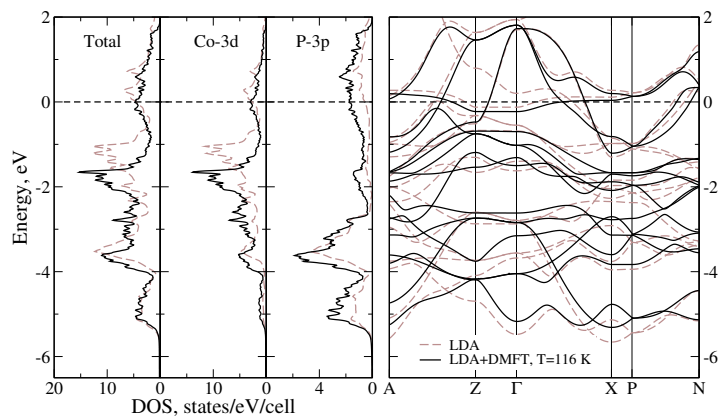


Рис. 1. Плотность состояний (слева) полная и частичная для Co-3d и P-3p состояний. Зонная структура (справа). LDA (серый пунктир) и LDA+DMFT (черные сплошные линии). Ноль соответствует уровню Ферми.

ОРБИТАЛЬНАЯ МАГНИТНАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ ДВУМЕРНОЙ СУРЬМЫ В СЛАБЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ В РАМКАХ ПРИБЛИЖЕНИЯ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

Г.В. Пушкарев^{1*}, И.А. Яковлев¹, Д.А. Прищенко¹, В.Г. Мазуренко¹, А.Н. Руденко^{2,1}¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия²Университет Уханя, Ухань, Китай*e-mail: puskarev.g.v@gmail.com

Монослойная сурьма является уникальным материалом из класса двумерных, поскольку обладает следующими свойствами: стабильностью по отношению к внешней среде и сильным спин-орбитальным взаимодействием, что позволяет предположить возможное необычное поведение в магнитных полях. В связи с этим мы проделали численное моделирование магнитного отклика данного материала в слабых полях

в приближении сильной связи с использованием эффектов напряжения смещения. В наших расчетах мы использовали модель, предложенную в работе [1]. Нами была получена орбитальная магнитная восприимчивость двумерной сурьмы, которая может быть разложена на 3 вклада:

$$\chi_{\text{orb}} = \chi_{\text{inter}} + \chi_{\text{intra}} + \chi_{\text{core}} \quad (1)$$

где χ_{inter} — межзонный, а χ_{intra} — внутризонный вклады от зонных электронов, а χ_{core} — вклад от электронов, находящихся на внутренних оболочках. Зонные вклады были рассчитаны используя формализм функций Грина [2], а вклад от core электронов был описан с помощью теории диамагнетизма Ланжевена [3].

Рис. 1. Межзонный (χ_{inter}), внутризонный (χ_{intra}) и core (χ_{core}) вклады в орбитальную восприимчивость (χ_{orb}) двумерной сурьмы как функции химического потенциала μ для различных значений напряжения смещения V_{bias} в единицах $\chi_0 = \mu_0 e^2 \hbar^{-2}$, где μ_0 — магнитная постоянная, а \hbar — постоянная Дирака и e — заряд электрона.

Из полученных зависимостей видно, что для большей части значений химического потенциала межзонный вклад парамагнитный ($\chi > 0$), а внутризонный вклад диамагнитный ($\chi < 0$). В случае допирования ($\mu \neq 0$), межзонный вклад оказывается больше по модулю. При приложении напряжения смещения V_{bias} происходит уменьшение как межзонного, так и внутризонного вкладов. Несмотря на это, орбитальная восприимчивость недопированной двумерной сурьмы практически полностью контролируется вкладом core электронов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 21-12-00338.

1. A. N. Rudenko, M. I. Katsnelson, and R. Roldán. Phys. Rev. B **95**, 8 (2017).

2. A. Raoux *et al.* Phys. Rev. B **91**, 8 (2015).

3. С.В. Вонсовский Магнетизм. — М.: Наука, гл. ред. физ. -матем. лит. (1971).

ДИСПЕРСИЯ ФОНОНОВ В НЕЦЕНТРОСИММЕТРИЧНОМ МИКРОПОЛЯРНОМ КРИСТАЛЛЕ

J. Kishine^{1,2}, А.С. Овчинников^{3,4}, А.А. Терещенко^{3*}¹The Open University of Japan, Chiba, Japan²Institute for Molecular Science, Okazaki, Japan³Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия⁴Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*e-mail: tenxor@mail.ru

Из степеней свободы твердого тела, электрических, магнитных и механических, именно последние наиболее чувствительны к особенностям структуры, и широко используются в новой отрасли электроники, получившей название стрейнтроники [1]. Связь структурной киральности со статическими и динамическими свойствами дает ключ к пониманию функциональных свойств киральных систем [2]. Ярким примером явлений, контролируемых киральностью, является оптическая активность [3], где распространение циркулярно-поляризованного света через киральный материал зависит от его спиральности. Однако тонкие эффекты киральности выходят за рамки традиционной теории упругости, которая рассматривает только локальное перемещение точек и силу на единицу площади, но полностью игнорирует локальное вращение этих точек и сопутствующий крутящий момент на единицу площади.

Эти недостающие эффекты, которые можно рассматривать как частное проявление нелокальности, рассматриваются в микрополярной теории упругости [4]. Данный формализм учитывает не только поступательные микродвижения среды, но и вращательные. В данной работе в рамках микрополярной теории упругости рассмотрены особенности фононного спектра кирального кристалла CrNb_3S_6 . Обнаружено, что возникает расщепление фононных зон в зависимости от левой или правой круговой поляризации в чисто фононной системе без привлечения какой-либо внешней подсистемы. В фононном спектре наблюдается нарушение четности при сохранении симметрии относительно обращения времени, то есть он обладает истинной киральностью. Обнаружено, что гибридизация вращательной и поступательной мод приводит к возникновению акустической фононной ветви с «ротонным» минимумом, напоминающим элементарные возбуждения в сверхтекучем ^4He . Кроме того, мы обсуждаем акустическую активность, возникающую из-за невязимности фононного спектра.

Ожидается, что предсказываемая поляризационно-зависимая дисперсия фононов может привести к связи между решеточными, электронными и магнитными степенями свободы, индуцированной киральностью.

Работа выполнена при финансовой поддержке ППК 3.1.1.1.г-20.

1. A.A. Bukharaev, A.K. Zvezdin, A.P. Pyatakov, and Y.K. Fetisov, *Phys.-Usp.* **61**, 1175 (2018).
2. L.D. Barron, *Chirality* **24**, 879 (2012).
3. L.D. Barron, *Molecular Light Scattering and Optical Activity*, 2nd ed., (Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 2004).
4. A.C. Eringen, *Microcontinuum Field Theories: I. Foundations and Solids* (Springer-Verlag, New York, 1999).

ЧЕТЫРЁХНОЖНАЯ СПИНОВАЯ ТРУБКА С ФРУСТРИРУЮЩИМ ОБМЕННЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ: СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

А.С. Тимофеева*, И.Г. Бострем, А.С. Овчинников

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: anna_timofeeva@bk.ru

В данной работе мы ограничились изучением магнитоупорядоченного (несинглетного) состояния спиновой трубки (р. ис. 1), которая служит упрощенной моделью квазидвумерного органического ферромагнетика VIPNNBNO [1].

Мы рассчитываем свободную энергию системы и минимизируем ее относительно угла, параметризующего классическую спиновую конфигурацию на кольце (угол α).

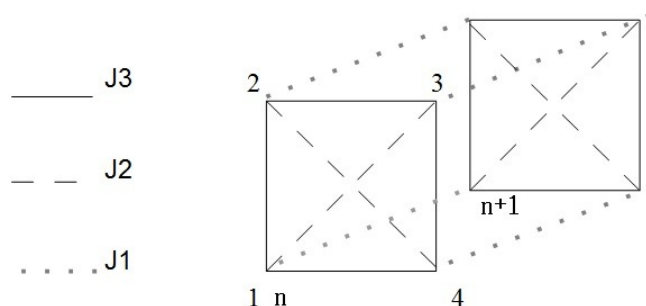


Рис. 1. Пространственная конфигурация спиновых взаимодействий трубки (внутрицепочечный обменный интеграл J_3 (АФ), межцепочечный обменный интеграл J_1 (АФ), фрустрирующий антиферромагнитный обмен с интегралом J_2).

Это дает информацию об упорядочении классических спинов с учетом квантовых и тепловых флуктуаций. Нами был использован формализм континуального интегрирования для спиновых систем, предложенный в работе [2].

Полученные профили свободной энергии имеют форму двойных ям, что делает возможным эффекты квантового туннелирования между эквивалентными классическими конфигурациями в такой системе.

В переходе к квантовому пределу возникают дополнительные минимумы. Если в классическом случае минимуму соответствуют углы $\alpha = 0, \pi$, то при понижении температуры картинка изменяется.

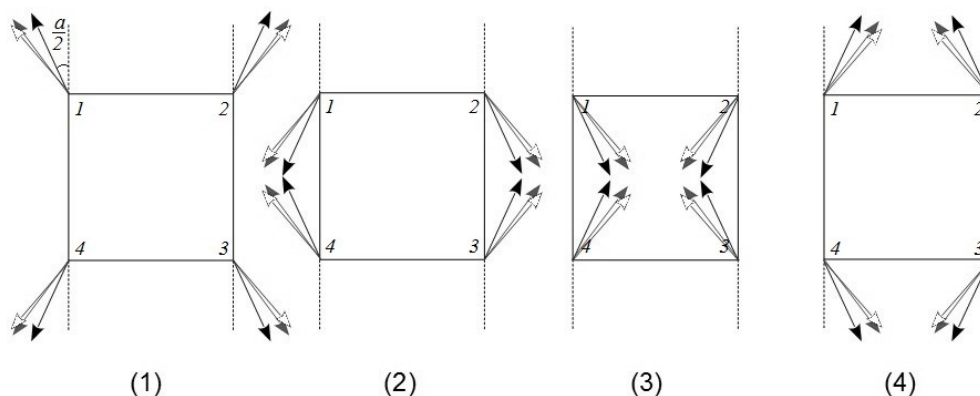


Рис. 2. Положения спинов, соответствующие минимумам свободной энергии в квантовом пределе при $J_2 = 1$ (черный для $J_1 = -2$, серый — $J_1 = -0.5$, белый — $J_1 = -0.1$).

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-02-00213.

1. A.S. Ovchinnikov, V.E. Sinitsyn, I.G. Bostrem, *Phys.: Condensed Matter* **24**, 306003, (2012).
2. X. Plati, Y. Fuji, S. Capponi, *Phys. Rev. B* **91**, 064411, (2015).

Jmulti – ПРОГРАММА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ РЕННИНГЕРОВСКИХ ОТРАЖЕНИЙ

А.М. Устюгов*, К.А. Козловская

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

*e-mail: alex.ustu.msk@gmail.com

При исследовании кристаллов используются рентгенодифракционные методы, основанные на брэгговской дифракции. Для точных измерений с помощью таких методов необходимо свести к минимуму «паразитные» вклады от многоволновых отражений. Мы разработали программу Jmulti[1] для подбора условий, при которых трехволновой [2] вклад в брэгговские отражения минимален или отсутствует.

Интенсивность трёхволновых отражений определяется структурной амплитудой, которую можно получить из уравнений динамической дифракции [3]:

$$F_H(\mathbf{e}'^* \cdot \mathbf{e}) = r_e^2 \frac{4\pi}{k^2 V} \sum_n F(\mathbf{Q} - \mathbf{Q}_m) F(\mathbf{Q}_m) \frac{\mathbf{k}_m^2 (\mathbf{e}'^* \cdot \mathbf{e}) - (\mathbf{k}_m \cdot \mathbf{e}'^*)(\mathbf{k}_m \cdot \mathbf{e})}{Q_m^2 + 2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{Q}_m) - \mathbf{k}_m^2 \chi_0}, \quad (1)$$

где n — число возможных «окольных» отражений, r_e — радиус электрона, V — объём элементарной ячейки, \mathbf{e} и \mathbf{e}' — вектора поляризации падающей и отраженной волн, χ_0 — рентгеновская восприимчивость, $F(\mathbf{Q})$ — структурная амплитуда, \mathbf{k} — волновой вектор падающей волны, \mathbf{k}_m — волновой вектор рассеянной волны, \mathbf{Q} — плоскость, соответствующая брэгговскому отражению, \mathbf{Q}_m и $(\mathbf{Q} - \mathbf{Q}_m)$ — плоскости, соответствующие трёхволновому отражению.

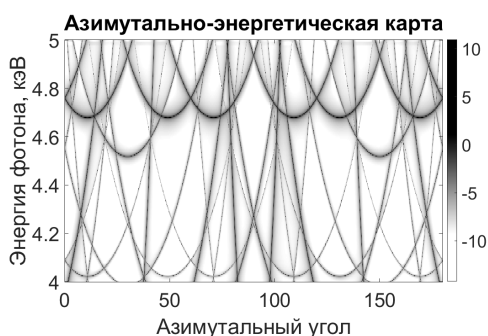


Рис. 1. Азимутально-энергетическая карта реннигеровских отражений в кварце, запрещенный рефлекс (001).

На основании формулы (1) была написана программа Jmulti (Java multiwave), рассчитывающая интенсивность трехволновых отражений. Программа использует в качестве входных файлов международный стандарт Crystallography Information File. Исходя из положений атомов, индексов брегговского рефлекса и энергии падающего излучения, программа перебирает возможные «окольные» отражения, и вычисляет их интенсивность. На выходе можно получить азимутальную или энергетическую зависимости интенсивности реннигеровских отражений, или азимутально-энергетическую карту реннигеровских отражений. Такая карта чрезвычайно полезна для экспериментов с двухволновой дифракцией, поскольку позволяет выбрать величину энергии и азимутального угла, для которых «реннигеровский» вклад минимален (на рис. 1) это светлые области).

Преимуществами программы Jmulti являются: модельно независимые расчеты; учет реннигеровского вклада не только непосредственно в пиках трехволновых отражений, но и в промежутках между ними; удобная пользовательская оболочка. Простота управления открывает возможности для её широкого использования.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ №19-02-00483.

1. К.А. Козловская, Ученые Записки Физического Факультета Московского Университета **6**, 2060501 (2020).
2. M. Renninger, Magazine for physics **106**, 141 (1937).
3. A. Authier, International Tables for Crystallography **B 534** (2006).

УГЛОВЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В ДВУМЕРНОМ ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ИЗОЛЯТОРЕ
С КИРАЛЬНОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬЮ НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

А.Д. Федосеев, М.С. Шустин*

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия

*e-mail: mshustin@yandex.ru

Исследования топологически нетривиальных систем получили новое направление развития после предложения концепции топологических изоляторов высокого порядка [1]. В то время, как предложено множество моделей топологических изоляторов и сверхпроводников с квадратной кристаллической решеткой, возможность реализации угловых состояний на треугольной решетке изучена крайне ограничено [2], а исследования угловых возбуждений в сверхпроводящей фазе и вовсе отсутствуют. При этом сама возможность реализации в C_3 -симметричных системах топологически защищенных угловых состояний вызывает споры [3]. Однако, как было показано ранее, в топологически тривиальной фазе возможно возникновение краевых возбуждений, в том числе майорановских [4]. Изучение возможности реализации угловых возбуждений нетопологического характера в C_3 -симметричной сверхпроводящей системе являлось целью проведенного исследования.

Нами был исследован двумерный топологический изолятор в форме треугольника с треугольной кристаллической решеткой при учете спин-орбитального взаимодействия и кирального сверхпроводящего параметра порядка. Продемонстрировано, что хотя подобная C_3 -симметричная система не является топологическим сверхпроводником высокого порядка, в ней могут возникать хорошо локализованные угловые возбуждения с энергией внутри щели спектра краевых возбуждений первого порядка. Построена диаграмма параметров реализации угловых возбуждений в рассматриваемой системе. Показано, что такие возбуждения возникают в области параметров, при которых в системе в отсутствие спин-орбитального взаимодействия реализуется топологическая сверхпроводимость с числом Черна разного знака для разных подзон изолятора. Рассчитана зависимость параметра IPR (inverse participation ratio), характеризующего степень локализации возбуждения, для угловых возбуждений от величины химпотенциала в системе. Несмотря на то, что выявленные угловые возбуждения не являются топологически защищенными, они продемонстрировали устойчивость как по отношению к дефектам в системе, так и к наличию в ней беспорядка. Кроме того обнаружено, что при определенных значениях параметров, в системе возникают бесщелевые угловые возбуждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 19-02-00348, 19-42-240011, гранта Президента РФ МК-1641.2020.2.

1. W.A. Benalcazar, B.A. Bernevig, T.L. Hughes, *Science* **357**, 61 (2017).
2. M. Ezawa, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 026801 (2018).
3. G. van Miert, C. Ortix, *npj Quantum Mater.* **5**, 63 (2020).
4. V.V.Val'kov, A.O. Zlotnikov, M.S. Shustin, *J. Magn. Magn. Mater.* **459**, 112 (2018).

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЙ FeAlO_3 и FeSiO_3 Е.Д. Чернов^{1*}, А.В. Лукоянов^{2,1}¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия²Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*e-mail: mr.cherjon@yandex.ru

Работа посвящена изучению электронной структуры соединений FeAlO_3 и FeSiO_3 , которые встречаются в нижней мантии Земли [1]. Соединение FeAlO_3 кристаллизуется в орторомбической структуре $\text{Pna}21$, соединение FeSiO_3 — в орторомбической структуре Pbca . Для исследования электронной структуры были проведены расчеты в пакете программ Quantum ESPRESSO [2] с использованием обменно-корреляционного потенциала в приближении обобщенной градиентной поправки (GGA) версии PBE [3] и метода $\text{DFT}+U$ [4]. Для учета сильных электронных корреляций в 3d оболочке Fe были использованы величины параметра прямого кулоновского взаимодействия U в промежутке от 1 до 4 эВ и параметра обменного (хундовского) взаимодействия $J_H = 0.9$ эВ.

В результате первопринципных расчетов в приближении GGA были получены следующие значения магнитных моментов ионов Fe в соединениях FeAlO_3 и FeSiO_3 : $3.70 \mu_B$, $3.47 \mu_B$ — в случае ферромагнитного упорядочения ионов Fe, $3.49 \mu_B$, $3.42 \mu_B$ — в случае антиферромагнитного упорядочения ионов Fe. Следующие величины были получены для соединений FeXO_3 ($X = \text{Al}, \text{Si}$) в результате численного моделирования в опубликованных работах: $3.69 \mu_B$ [5], $3.8 \pm 0.1 \mu_B$ [6], для FeAlO_3 — близко к экспериментальной величине $3.4 \pm 0.2 \mu_B$ [7] с учетом погрешности измерения. Для FeSiO_3 величина магнитного момента $4.0 \pm 0.1 \mu_B$, определенная из экспериментальных данных [8], оказалась больше рассчитанной.

При учете электронных корреляций в рамках метода $\text{DFT}+U$ рассмотрено формирование ферро- и антиферромагнитного упорядочения магнитных моментов ионов железа в FeAlO_3 и FeSiO_3 . Обнаружено, что в FeAlO_3 и FeSiO_3 при увеличении параметра U открывается энергетическая щель. В отличие от FeAlO_3 , где энергетическая щель присутствует уже в расчетах GGA для антиферромагнитного упорядочения магнитных моментов ионов Fe, в соединении FeSiO_3 энергетическая щель открывается при достаточно больших значениях параметра U . При увеличении параметра кулоновского взаимодействия U для FeAlO_3 как в случае ФМ, так и АФМ упорядочения, энергетическая щель увеличивается пропорционально параметру U . В результате первопринципных расчетов были получены значения магнитных моментов Fe для соединений FeAlO_3 и FeSiO_3 . Для расчетов с учетом электронных корреляций наблюдается тенденция увеличения магнитного момента Fe при увеличении параметра U . Сравнение полных энергий для каждого из соединений показало, что самым энергетически выгодным состоянием для FeAlO_3 является АФМ упорядочение магнитных моментов Fe, а для FeSiO_3 — ФМ упорядочение магнитных моментов Fe в соответствии с экспериментальными данными.

1. J.-F. Lin, A. Wheat, *Hyperfine Interact.* **207**, 81 (2011).
2. P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini *et al.*, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 395502 (2009).
3. J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
4. V.I. Anisimov, F. Aryasetiawan, A.I. Lichtenstein. *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 767 (1997).
5. R. Caracas, *Phys. Earth Planet. Inter.* **1**, 182 (2010).
6. A.A. Dyachenko, A.O. Shorikov, A.V. Lukoyanov, V.I. Anisimov, *Phys. Rev. B* **93**, 245121 (2016).
7. F. Bouree, J. L. Baudour, E. Elbadraoui *et al.*, *Acta Crystall.* **2**, 52 (1996).
8. S. G. Eeckhout, E. de Grave, A. Lougear *et al.*, *Am. Miner.* **9**, 86 (2001).

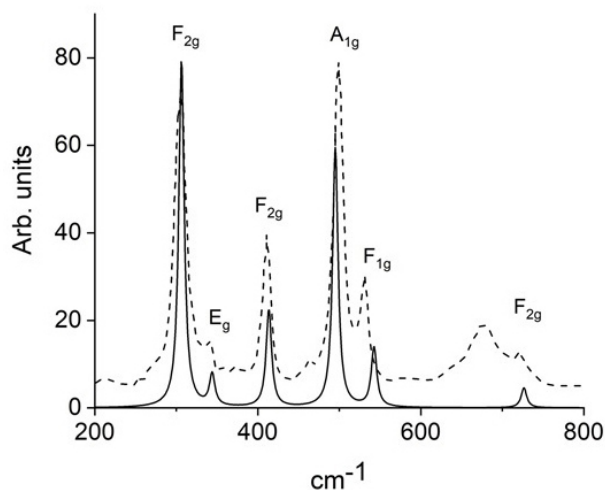
СТРУКТУРА И ДИНАМИКА РЕШЕТКИ $\text{Nd}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$: *ab initio* РАСЧЕТВ.А. Чернышев^{1*}, К.И. Глухов¹, П.А. Агзамова^{1,2}¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия²Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*e-mail: vchern@inbox.ru

Рис. 1. КР спектр $\text{Nd}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$. Расчет — сплошная линия, пунктир — эксперимент [4].

и фононного спектра станната неодима, а также исследовано влияние гидростатического сжатия на его кристаллическую структуру.

Расчеты были проведены в программе CRYSTAL17 [5], предназначенной для моделирования периодических структур в рамках МО ЛКАО подхода. Для описания внутренних оболочек редкоземельного иона Nd был использован псевдопотенциал, для описания внешних оболочек, $5s^25p^6$, участвующих в образовании химической связи — валентный базисный набор TZVP типа. В результате расчета были получены частоты фундаментальных колебаний, интенсивности ИК и КР мод. Из анализа векторов смещений, полученных в результате *ab initio* расчета, определена степень участия ионов в каждой моде. Результаты расчета хорошо согласуются с экспериментом (рис. 1).

Полученные результаты могут быть использованы для интерпретации ИК и КР спектров изоструктурного ряда — редкоземельных станнатов со структурой пирохлора.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № FEUZ-2020-0054).

1. M.C. Hatnean *et al.*, Crystals **6**, 79 (2016).
2. R. Cao *et al.*, J. of Phys. and Chem. of Solids **118**, 109 (2018).
3. A.M. Srivastava, Optical Materials **31**, 881 (2009).
4. L.T. Denisova *et al.*, Physics of the Solid State **58**, 1300 (2016).
5. R. Dovesi *et al.*, Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science **8**, e1360 (2018).

СПИН-ЗАРЯДОВЫЕ ФЛУКТУАЦИИ В ПРОБЛЕМЕ РЕАЛИЗАЦИИ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ФАЗ В СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СИСТЕМАХ

М.С. Шустин*, А.О. Злотников

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия

*e-mail: mshustin@yandex.ru

Полупроводниковые нанопроволоки с сильным спин-орбитальным взаимодействием и наведенной сверхпроводимостью являются перспективными объектами для реализации майорановских мод (ММ) [1]. К настоящему времени имеются экспериментальные результаты, свидетельствующие о существовании в нанопроволоках как устойчивого квантованного пика дифференциальной проводимости (важного индикатора ММ), так и режима сильных электронных корреляций [2].

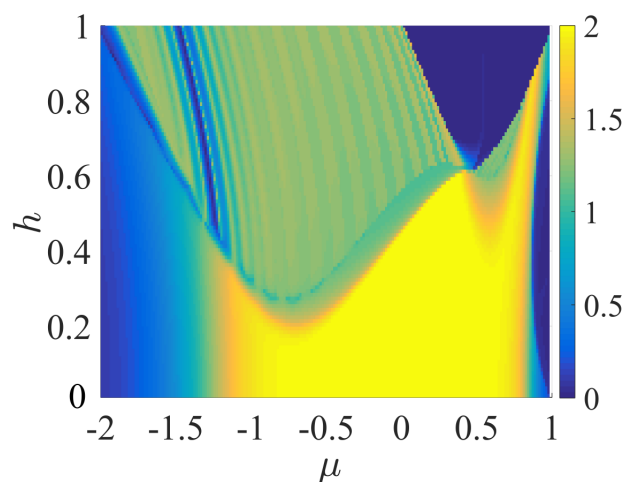


Рис. 1. Карта майорановской поляризации (МП) [5] сильно коррелированной сверхпроводящей нанопроволоки, полученной в приближении Хаббард-I в переменных химпотенциал (μ) – внешнее магнитное поле (h). Параметрическим областям с МП > 1 отвечают условия реализации топологически нетривиальных фаз.

При теоретическом рассмотрении модели сверхпроводящей нанопроволоки было показано, что топологические фазы с майорановскими модами реализуются при учете электрон-электронных взаимодействий, в том числе сильных [3]. Основные вычисления проводились с использованием метода ренормализационной группы для матрицы плотности (DMRG): численного подхода, хорошо апробированного для исследования одномерных квантовых систем с локальными взаимодействиями [4]. При этом были обнаружены принципиальные расхождения топологических фазовых диаграмм, полученных для системы в рамках подхода DMRG и аналитического описания в приближении Хаббард I (рис. 1), учитывающего кинематическое взаимодействие сильно коррелированных фермионов, но пренебрегающего рассеянием хаббардовских квазичастиц. Отсюда делается вывод о важности учета спин-зарядовых флуктуаций и рассеяния квазичастиц при построении фазовых диаграмм систем с электронными взаимодействиями. Этот вопрос подробно обсуждается в настоящей работе.

Этот вопрос подробно обсуждается в настоящей работе.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда «Базис», РФФИ в рамках проектов 19-02-00348, 19-42-240011, 20-42-243001.

1. R. M. Lutchyn *et al.*, *Nat. Rev. Mat.* **3**, 52 (2018).
2. Y. Sato *et al.*, *Phys. Rev. B.* **99**, 155304 (2019).
3. S.V. Aksenov, A.O. Zlotnikov, M.S. Shustin, *Phys. Rev. B.* **101**, 125431 (2020).
4. U. Schollwöck, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 259 (2005).
5. N. Sedlmayr and C. Bena, *Phys. Rev. B* **92**, 115115 (2015).

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СВОЙСТВ ГАЗОВЫХ ГИДРАТОВ

М.Б. Юнусов^{1*}, Р.М. Хуснутдинов^{1,2}, А.В. Мокшин^{1,2}

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

²Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия

*e-mail: mukhammadbek@mail.ru

Клатратные гидраты — это нестехиометрические кристаллические соединения, которые состоят из каркаса, образованного молекулами воды, и полостей, в которые включены молекулы-гости. Природные газогидраты рассматриваются как источник углеводородного топлива. По оценкам специалистов, запасы газа в них составляют около $2 \cdot 10^{16}$ м³, а основным компонентом газа является метан.

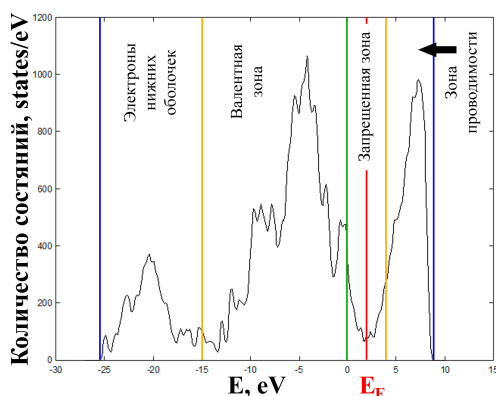


Рис. 1. Плотность электронных состояний и энергетические зоны для гидрата метана с кубической структурой КС-I при $T = 200$ К.

В настоящей работе представлены результаты первопринципного молекулярно-динамического исследования электронных и теплофизических свойств гидрата метана с кубической структурой КС-I. На основе результатов рентгеноструктурного анализа была сгенерирована кристаллическая структура КС-I с включением 8 молекул CH_4 в свободные полости. Система имела размер $12 \times 12 \times 12$ Å, состояла из 178 атомов. Моделирование выполнялось в NVT -ансамбле для температурной области $T \in [200, 300]$ К. Для достижения термодинамического равновесия был применен термостат Нозе-Гувера. На ячейку были наложены периодические граничные условия. Базисный набор состоял из плоских волн; электрон-ионное взаимодействие осуществлялось с помощью ультрамягких сглаженных псевдопотенциалов; обменно-корреляционная энергия была

рассчитана в рамках обобщенно-градиентного приближения.

Для диапазона $T \in [200, 300]$ К получена температурная зависимость полной энергии системы и рассчитана средняя теплоемкость при постоянном объеме. Полученное значение теплоемкости составило $C_v = 2362.5$ Дж/(кг·К), что хорошо согласуется с экспериментальными данными $C_v = 2160 \pm 100$ Дж/(кг·К) [1] и 2306 Дж/(кг·К) [2].

Также для системы КС-I была рассчитана плотность электронных состояний $N(E)$, которая представлена на рис. 1, и энергетическая зонная структура $E(\mathbf{k})$. Рассчитанные зависимости $N(E)$ находятся в хорошем качественном согласии с результатами квантово-механических расчетов для различных газовых гидратов (CO_2 , CO , CH_4 и H_2) [3]. При исследовании электронных состояний было обнаружено, что при повышении температуры нижняя граница зоны проводимости поднимается со средней скоростью $dE/dT = 0.0053$ эВ/К. Верхняя граница валентной зоны поднимается со средней скоростью $dE/dT = 0.0035$ эВ/К. При этом энергия Ферми повышается со скоростью $dE_F/dT = 0.0044$ эВ/К. Разница в скорости роста границ запрещенной зоны приводит к изменению ее ширины со скоростью $dE/dT = 0.0018$ эВ/К.

1. W.F. Waite, L.A. Stern, S.H. Kirby, W.J. Winters, *Geophys. J. Int.* **169**, 767 (2007).

2. В.И. Истомин, В.С. Якушев, Газовые гидраты в природных условиях. — М.: «Недра» (1992).

3. P. Guo, Y.-L. Qiu, L.-L. Li, Q. Luo, J.-F. Zhao, Y.-K. Pan, *Chin. Phys. B* **27**, 043103 (2018).

Биофизика

ВОЗРАСТНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ СОСТАВА И СТРУКТУРЫ КОСТЕЙ КРЫС

С.В. Григорьева^{1*}, В.А. Усачёв^{1,2}, С.Л. Хацко¹, Н.А. Кулеш¹, М.А. Сёмкин^{1,3}¹Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия²Институт иммунологии и физиологии УрО РАН, Екатеринбург, Россия³Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*e-mail: cool.sima-grigorjeva@yandex.ru

Кальций – жизненно необходимый для человека и животных химический элемент, который участвует в функционировании нервной системы, регуляции свёртываемости крови, сокращении мышц, сердечной деятельности и в других биологических процессах, происходящих в организме. Но, пожалуй, самым важным является то, что кальций — это основной компонент костной ткани, которая формируется и обновляется в течение всей жизни особи. Как избыток, так и недостаток кальция приводят к нарушениям в работе организма и различным заболеваниям. Например, заболевание остеопорозом, в результате которого плотность костей уменьшается, и они становятся очень хрупкими [1]. Принято считать, что одной из основных причин этой болезни является уменьшение содержания кальция в костях. Поэтому так важно изучать изменения, происходящие в кости с возрастом.

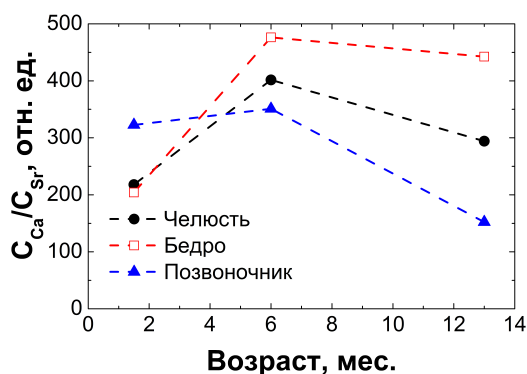


Рис. 1. Зависимость соотношения содержания Са относительно Sr в костях челюсти, бедра и позвоночника от возраста крысы.

можно определить только соотношение атомных долей содержания кальция относительно стронция. На рис. 1 приведена возрастная зависимость этого соотношения в костях крыс. Видно, что наибольшее значения для этого соотношения наблюдается у костей половозрелых животных, а минимальные — для молодых, формирующихся особей. Общее поведение содержания Са относительно Sr для набора из трёх видов костей схоже между собой. В процессе естественного старения крыс проявляется обратная тенденция к уменьшению содержания Са в костях, при допущении, что содержание Sr не зависит от возраста. Наибольший разброс этой величины достигается для особи в возрасте 13 мес. Показано, что в зависимости от вида исследуемой кости, соотношение для позвоночника в 2.5 раза меньше, чем для бедренной кости и в 1.5 раза — для челюсти.

По предварительным рентгеноструктурным данным можно предположить, что кристаллическая структура костей крыс формируется в структуру, подобную структуре костей человека, и хорошо описывается гексагональной пространственной группой $P63/m$ [2,3].

В нашей работе исследуются возрастные изменения состава и структуры костей (челюсть, позвоночник и бедро) женских особей крыс 1.5, 6 и 13 мес., соответствующие молодому, половозрелому и старому потомству.

Для оценки содержания кальция в костях применяли рентгеновский флуоресцентный спектрометр на полном внешнем отражении Nanohunter. Из-за особенностей наблюдаемого спектра энергий воз-

1. M.J. Olszta *et al.*, *Mat. Sci. Eng.* **58**, 77 (2007).2. В.А. Усачёв *и др.*, Школа ФКС–2020, 159 (2020).3. Y. Choi *et al.*, *Phys. B: Cond. Mat.* **551**, 218 (2018).

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ НА ФОРМИРОВАНИЕ ОСТЕОЗАМЕЩАЮЩЕЙ
ТКАНИМ.В. Коробенков^{1*}, Т.А. Киселева²¹Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, Калининград, Россия²Томский государственный университет, Томск, Россия

*e-mail: mkorobekov@kantiana.ru

Современные подходы лечения переломов, основанные на принципах персонализированной медицины, в большинстве случаев учитывают не все особенности структуры поверхности импланта и его влияния на скорость остеоинтеграции с костью, ограничиваясь статистическими подходами характеристики исходной поверхности. Однако актуальные экспериментальные методики определения структурных факторов поверхности импланта на биологический отклик кости зачастую носят рутинный характер. Поэтому наиболее удобной альтернативой является математический аппарат и методы компьютерного моделирования. В данной работе была разработана методика моделирования поверхности импланта на скорость остеоинтеграции с биологической костью. Для разработки методики моделирования были исследованы образцы биологической кости, на основе исследований разработаны топографические модельные структуры и методы решения задачи биологического роста клеток.

Для определения структурных характеристик биологической кости и оценки структурных параметров поверхности был использован метод атомно силовой микроскопии в полуконтактной моде. На имеющихся образцах парнокопытного животного были проведены исследования подготовленной поверхности среза. Обработка карт сканирования и визуализация проводилась в специализированном программном комплексе Gwyddion. Для построения топографических модельных структур, используя предположение, что все биологические объекты подчиняются фрактальным законам самоподобия [1], полученные изображения были исследованы с точки зрения фрактальной геометрии. Для определения фрактальных характеристик размерности поверхности был использован метод триангуляции [2]. Результаты измерений фрактальных размерностей показали небольшой разброс значений во всем исследованном диапазоне. Для продольного сечения образца $D_f = 2.43 - 2.55$; для поперечного сечения образца $D_f = 2.23 - 2.28$.

Вычисленные характеристики поверхности были использованы для построения геометрических моделей интерфейсов со структурой, соответствующих границе раздела имплант-кость. Разработка математической модели роста биологических клеток была основана на законе Мальтуса и дополнена дифференциальными уравнениями второго порядка, учитывающими влияние сложных взаимодополняющих факторов роста и гибели клеток.

Результаты проведенных расчетов показали, что характер распространения роста клеток носит симметричный характер. Увеличение структурных единиц, составляющих фрактальные поверхности одной мощности, вносят существенный вклад в площади распространения фронта роста клеток и обусловлены влиянием топографии поверхности.

Исследование было поддержано из средств субсидии, выделенной на реализацию Программы повышения конкурентоспособности БФУ им И. Канта.

1. В.Е.Панин, В.П. Сергеев, А.В. Панин, Наноструктурирование поверхностных слоев конструкционных материалов и нанесение наноструктурных покрытий. — Томск: Изд-во Том. Политех. ун-та (2008).
2. Е. Федер, Фракталы. — М.: Мир (1999).

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БАРООБРАБОТКИ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ВСХОЖЕСТИ СЕМЯН СОЛОДКИ УРАЛЬСКОЙ

Н.А. Кругликов^{1*}, А.Г. Быструшкин², А.Ю. Беляев³¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия²Ботанический сад УрО РАН, Екатеринбург, Россия³Институт экологии растений и животных УрО РАН, Екатеринбург, Россия*e-mail: nick@imp.uran.ru

Солодка уральская (*Glycyrrhiza uralensis*) известна в России, Казахстане, Китае и других странах Азии как особо ценное лекарственно-техническое и пищевое растение. Заготавливаемым сырьем являются корни и корневища солодки — так называемый «солодковый корень». Мировые потребности в этом сырье составляют десятки тысяч тонн. Вследствие ненормированных заготовок запасы солодкового корня в природных растительных сообществах неуклонно уменьшаются, а в некоторых районах добычи близки к истощению. Таким образом, задача промышленного производства этого вида актуальна. Основной проблемой препятствующей решению данной задачи является твердосемянность этого вида, которую можно преодолеть при помощи интенсивных физико-химических воздействий.

Образец семян солодки уральской, использованный в данном исследовании, собран в одной ценопопуляции в Карагандинской области Казахстана. Очистку этих семян от плодовых оболочек проводили ручным способом без применения каких-либо терочных приспособлений, чтобы сохранить покровы семян (семенную кожуру) в естественном состоянии. Исследование проводилось с двумя группами (категориями) этого образца семян, различающимися по окраске поверхности семенной кожуры.

Семена подвергали барообработке. Всего в данном опыте задействованы три экспериментальных и один контрольный вариант, каждый в трёхкратной повторности. Первый — однократная обработка семян давлением 10 МПа. Второй — трёхкратная обработка семян давлением 10 МПа. Третий — однократная обработка семян давлением 40 МПа. Объём выборки в каждом экспериментальном варианте составил 50 семян в каждой из трёх повторностей. Контрольный вариант — 100 семян без барообработки, в повторностях 33, 33 и 34 семени. Семена визуально разделили на две фракции по окраске поверхности: оливковые и светло-коричневые. Семена обеих фракций подвергали воздействию высоких гидростатических давлений (по вариантам опыта) и проводили их последующее проращивание при совместном размещении в повторностях.

Проращивание семян проводили на фильтровальной бумаге в чашках Петри в климатической камере Binder при постоянной температуре 30°C в темноте. Долю набухших и проросших семян учитывали на 10 сутки. Отличие между экспериментальными и контрольными вариантами исследовали с применением дисперсионного анализа. Уровень значимости статистических критериев общепринятый для биологических объектов ($p = 0.05$). Различия в окраске поверхности семени маркируют различную способность семян к набуханию, светло-коричневые семена набухают в 5-10 раз чаще, чем семена, имеющие оливковую окраску поверхности. Явление твердосемянности по-разному проявляется в зависимости от окраски поверхности семени, у оливковых семян твердосемянность более выражена, чем у светло-коричневых. Барообработка семян гидростатическим давлением в диапазоне 10-40 МПа не приводит к существенному повышению проницаемости покровов семени для воды и не приводит к массовому преодолению эффекта твердосемянности. Тем не менее, прорастание оливковых семян наблюдается только после барообработки.

Работа выполнена при частичной поддержке проекта РФФИ: проект № 18-016-00082, а также при частичной поддержке государственного задания Ботанического сада УрО РАН.

Авторский указатель

- Ślawska-Waniewska A., 52
Abdolhosseini I.S., 111
Amati M., 295, 302
Belo J.H., 91
Betz-Guttner E., 302
Bondino E., 203, 296
Dobrowolski W., 52
Dwi Nanto S., 58
Franco V., 67
Gebara P., 47, 48
Ghotbi A., 111
Gregoratti L., 295, 302
Huang J.C.A., 168
Kameli P., 75, 111
Khaliq A., 52
Kilanski L., 52
Kishine J., 324
Kowalski B.J., 52
Kurniawan B., 58
Lewicka S., 52
Мамедов Н.Т., 51, 165
Minikaev R., 52
Moras P., 295
Pis I., 203, 296
Reszka A., 52
Sarsari I., 75
Semisalova A.S., 251
Strusch T., 251
Тсугаока Т., 56
Varzaneh A.G., 75
Yu S.C., 58
Zeller P., 295, 302
Абалмасов В.А., 279
Абасзаде Р.Г., 241
Абдулвахидов К.Г., 246
Абдулкадирова Н.З., 47, 48
Абдуллаев Н.А., 51, 165
Абдуразаков Р.Р., 74
Агзамова П.А., 308, 329
Аданакова О.А., 96, 100
Акашев А.А., 221
Акрамов Д.Ф., 49
Алехина Ю.А., 50
Алигулиева Х.В., 51, 165
Алиев А.М., 13, 47, 48, 58, 59, 67, 75, 91, 111, 112, 119
Алиев Г.М., 74
Алиев З.С., 51, 165
Алиев О.А., 241
Алимов О.К., 285
Алисултанов З.З., 14
Аличкин Е.А., 237
Алмаев А.В., 253, 265
Алтынбаев Е.В., 97
Алябьева Л.Н., 278, 279
Амарантов С.В., 242
Амбаров А.В., 313
Амирасланов И.Р., 51, 165
Амиров А.А., 15, 91, 119
Андбаева В.Н., 222
Андреев А.В., 33
Андреев С.В., 53, 83, 98
Анзин В., 278
Анзин В.Б., 279
Аникеева В.Е., 17, 275
Аникин М.С., 95, 98
Аникина Е.В., 316
Анисимов И.А., 244
Анкудинов В.Е., 123
Антипин К.С., 61
Антонова О.В., 205
Арапов Ю.Г., 172
Аргунова Т.С., 184
Арсланов Т.Р., 52
Архипов А.В., 53
Асач А.В., 257
Асланов С.В., 276, 277
Атаева Г.Я., 124
Афанасьев С.В., 218
Ахмед А.Г., 278, 279
Ашуров Г.Г., 74
Бабаев А.Б., 124
Багазеев А.А., 243
Баграмов Р.Х., 211
Бадиев М.К., 125, 143
Баер М., 113
Бажукова И.Н., 258
Байгутлин Д.Р., 126, 144

- Байдаков В.Г., 149
Бакшеев Г.Г., 128
Бакшеев Е.О., 258
Балацкий Д.В., 169
Балымов К.Г., 110
Балякин И.А., 36, 314
Баранников А., 216, 298
Баранников А.А., 187, 215, 281
Баранов Д.К., 243
Баранов Е.А., 195, 196
Баранов Н.В., 49, 56, 90, 156, 269
Барташевич А.М., 33
Барташевич М.И., 33
Баталов С.В., 178
Батдалов А.Б., 111
Батраев И.С., 193
Баюков О.А., 169
Безбородова П.А., 181
Безматерных Л.Н., 127
Бекетов И.В., 243
Беккер Т.Б., 16
Белоненко А.М., 280
Белоненко М.Б., 280
Белотелов В.И., 113
Бельская Н.А., 127, 169
Бельтюков Я.М., 318
Беляев А.Ю., 337
Березутский А.Л., 244
Бержанский В.Н., 113
Бескачко В.П., 316
Бессонов В.Д., 178
Блюгель Ш., 117
Богатищева Н.С., 223
Боголюбский А.С., 166, 167, 174
Богуш М.Ю., 107
Боймурадова Ш.К., 54
Болдырев К.Н., 17, 275, 289, 297, 303
Болдырева М.М., 55
Болтачев Г.Ш., 238
Болячкин А.С., 20, 33, 66, 81
Борзилов В.О., 128, 130
Борик М.А., 192
Бострем И.Г., 157, 325
Бражкин В.В., 31
Бродова И.Г., 190
Буддашев И.В., 182
Бусов К.А., 224
Бухвалов Д.В., 255
Бучельников В.Д., 38, 68, 71, 79, 86, 102, 126, 144
Буш А.А., 279
Быков В.А., 108
Быструшкин А.Г., 337
Бычков И.В., 30, 140
Вагапов А.Ш., 177
Вайнштейн И.А., 260, 300, 306
Валеева А.А., 264
Васильев А.Д., 127
Васин М.Г., 18, 225
Васьковский В.О., 54, 96, 100, 110
Ваулин А.А., 56, 57
Велигжанин А.А., 19
Винник Д., 278
Витченко М.А., 246
Власов В.В., 30
Воеводина М., 298
Воеводина М.А., 281
Волегов А.С., 20, 66, 83, 90, 109, 116
Волков А.Ю., 190, 254
Волкова Е.А., 289
Волосников Д.В., 225, 231
Волчков С.О., 78
Воронин В.В., 299
Воронцова Е.С., 245
Вохминцев А.С., 260, 300, 306
Вьюхин В.В., 151
Гавико В.С., 94
Гаврилкин С.Ю., 127
Гаврилова М.А., 107
Гаджиев А.Б., 58, 59
Гаджимурадов Р.Р., 74
Галимзянов Б.Н., 200
Галкин Д.А., 226
Гамзатов А.Г., 47, 48, 58–60, 74, 75, 111, 112
Гареев Т.Т., 61, 62
Гареева З.В., 62
Гашков М.А., 235
Гермов А.Ю., 63
Гибизова В.В., 282
Гимаев Р.Р., 57
Глезер А.М., 204
Глухов К.И., 329
Говор Г.А., 59
Голобородский Б.Ю., 63
Горбачев И.И., 137

- Горбунов Д.И., 33
 Горшунов Б.П., 278, 279
 Гохфельд Н.В., 183
 Граматеева Л.Н., 315
 Гревцева И.Г., 277, 283, 284
 Грешнякова С.В., 152
 Григорьев П.Д., 21, 171
 Григорьев С.В., 22, 23, 97, 299
 Григорьева С.В., 335
 Громилов С.А., 169
 Губкин А.Ф., 56, 57
 Гудин С.А., 64
 Гудина С.В., 166, 167, 172, 174
 Гудкина Ж.В., 184
 Гундеров Д.В., 107
 Гупта С., 315
 Гурашкин А.Л., 221
 Гуткин М.Ю., 184
 Давыдов Д.И., 185
 Данилов Д.В., 139
 Дворецкая Е.В., 65, 263
 Двужилов И.С., 280
 Двужилова Ю.В., 280
 Демченко П., 257
 Денисов Н.Д., 92
 Деньгина Е.Ю., 66
 Дерепко В.Н., 283, 284
 Дериков Я.И., 242
 Джабраилов Ш.З., 67
 Джафарова В.Н., 186
 Дибиргаджиев Д.Ш., 191
 Дмитренко И.П., 246
 Добрецова Е.А., 285, 286
 Доможирова А.Н., 168
 Дорогов М.В., 247, 249
 Дорошева И.Б., 264
 Дроворуб Е.В., 129
 Дубровинская Н.А., 215
 Дубровинский Л.С., 215
 Дутов В.А., 248
 Дыбов В.А., 244
 Дьячкова Т.В., 248
 Дёмин А.М., 24
 Евсин Д.В., 128, 130
 Евстафьева Ю.К., 131
 Евтушинский Д.В., 322
 Егорина А.С., 132
 Елфимова Е.А., 80, 101, 104, 313
 Еникеев Э.И., 284
 Ерагер К.Р., 68
 Еремин Е.В., 127
 Ершов П.А., 215
 Ефанов О.М., 288
 Жеребцов И.С., 187
 Жидков И.С., 255, 256
 Жмыхов В.Ю., 286
 Жучков В.И., 25
 Заворницын Р.С., 69, 70
 Загребин М.А., 71, 79, 86, 126, 144
 Зайнулин Ю.Г., 248
 Зайцев А.Д., 257
 Зайцев Е.Ю., 40
 Зайчикова С.Н., 133
 Залетова И.А., 152
 Замчий А.О., 195, 196
 Зацепин А.Ф., 177, 248
 Заякин О.В., 25
 Заяц С.В., 40, 236
 Звездин А.К., 62, 113
 Зверев В.И., 57
 Зверев В.Н., 51, 165
 Зверев В.С., 81, 101, 313
 Зверев Д., 216, 298
 Зверев Д.А., 287
 Зенова А.А., 84
 Зибров И.П., 211
 Зинин А.В., 95, 98
 Злотников А.О., 330
 Зубарев Н.М., 235
 Зубарева К.А., 290
 Зыков Д.В., 257
 Ибрагимов Д.Н., 74
 Иванов И.В., 188
 Ивлиев А.Д., 26
 Ивченко В.В., 72
 Игольников А.А., 227
 Игошев П.А., 72
 Илларионов А.Г., 135, 136
 Исаева А.И., 282
 Исаева М.М., 73
 Исмаилов А.М., 252
 Каблукова Н.С., 257
 Кадырбардеев А.Т., 74
 Казак Н.В., 127, 169

- Казанцев В.А., 156
Кайгородов А.С., 236
Калгин А.В., 189
Калмыков А.Е., 249
Калонов А.А., 190
Калыгина В.М., 305
Камалов Р.В., 260, 300
Каманцев А.П., 75
Каминский А.С., 76
Каплун М.В., 316
Каратеев И.А., 204
Кардашова Г.Д., 191
Карфидов Э.А., 250, 261
Катаев В.А., 89
Кашин В.В., 285
Кашин С.Н., 77
Кешарпу К.К., 21
Кирова Е.М., 134
Кирыков А.Н., 177, 248
Киселева Т.А., 336
Киселёв Н.С., 117
Кислов Е.В., 269
Климова Н.Б., 288
Князев Н.С., 243
Князев Ю.В., 169, 315
Коваленко Н.А., 299
Кожаев М.А., 113
Козлов К.А., 254
Козлов Н.В., 78
Козловская К.А., 326
Кокецки М., 113
Коледов В.В., 27, 139, 142
Колеух Д.С., 40
Комкова Д.А., 205
Комлев А.С., 251
Кондратенко Т.С., 277
Кондратюк Н.Д., 228
Конев А.С., 63
Конев В.В., 317
Коник П.И., 299
Конюх Д.А., 318
Конюшкин В.А., 286
Коплак О.В., 28, 65, 77, 263
Кораблёва Г.М., 192
Коренев А.А., 135, 136
Корзунова Е.И., 137
Коробейников И.В., 170
Коробенков М.В., 336
Коробов Ю.С., 183
Кочев В.Д., 21
Кочешева Н.С., 136
Кочурин Е.А., 235, 319
Кошевой П.С., 254
Кошелев А.А., 81
Кошкидько Ю.С., 29, 75
Кошкин А.Б., 79
Коэмец Е.Г., 215
Кравцов Е.А., 100
Красницкий С.А., 184
Кругликов Н.А., 337
Крутиков В.И., 40
Кудюков Е.В., 82, 100, 110
Кузнецов С.В., 286
Кузнецов Д.Д., 139
Кузнецов С.М., 287
Кузнецова А.А., 80
Кузнецова А.Ю., 138
Кузнецова Е.И., 139
Кузнецова Ю.В., 245
Кузьмин А.О., 252
Кузьмин Д.А., 30, 140
Кузьмин И.М., 198
Кузьмин Н.Н., 289
Кузьмин Ю.И., 315
Кулебякин А.В., 192
Кулеш Н.А., 54, 81, 96, 335
Курбаков А.И., 105
Курбанова Д.Р., 143
Курицына И.Е., 192
Курляндская Г.В., 53, 78, 87, 118
Курмаев Э.З., 255, 256
Кутовой С.А., 285
Кучин А.Г., 94
Кучкин В.М., 117
Кучугуров А.В., 290
Кучумова И.Д., 193, 194
Кушнарёв Б.О., 253
Кханна А., 255
Лепаловский В.Н., 87, 110
Ливинец А.А., 254
Липнягов Е.В., 229, 230
Лисенков В.В., 235
Лиштван Р.Н., 135
Ложников В.Е., 130

- Ломонова Е.Е., 192
 Лосев Т.С., 255, 256
 Лошаченко А.С., 139
 Лукоянов А.В., 33, 99, 315, 321, 328
 Лунев Н.А., 195, 196
 Лупицкая Ю.А., 181
 Ляпин С.Г., 211
 Лятун И., 216, 298
 Лятун И.И., 281, 291, 294
 Лятун С., 298
 Лятун С.С., 281, 291
 Магомедов М.А., 73, 125, 147, 148
 Мазагаева М.К., 147
 Мазуренко В.В., 120
 Мазуренко В.Г., 323
 Майков В.В., 49
 Майков Э., 282
 Макаричева А.С., 320
 Макаров Д.В., 153
 Макарова А.С., 292
 Макарова Е.С., 257
 Макарова М.В., 69, 70
 Макарович И.А., 82
 Макеев М.Ю., 84
 Максимова И.К., 69
 Малкин А.И., 243
 Мальцев В.В., 289
 Мальцева В.Е., 20, 83, 109
 Мамедова С.А., 241
 Мамонова М.В., 55, 84, 128, 130, 320
 Мардасова И.В., 246
 Маренкин С.Ф., 52
 Марухин А.О., 85
 Марченков В.В., 168, 173
 Марченкова Е.Б., 168
 Маскаева Л.Н., 256
 Маслова С.А., 258
 Матюнина М.В., 71, 79, 86, 144
 Маширов А.В., 139
 Маякова М.Н., 192
 Мегедь М.С., 293
 Медведская П., 298
 Медведская П.Н., 294
 Мельников Г.Ю., 87
 Мельчаков С.Ю., 203
 Меньшикова С.Г., 31
 Меренцов А.И., 203, 207, 295, 296, 302, 307–309
 Меренцова К.А., 88
 Меркулова И.Е., 195, 196
 Миляев М.А., 69, 70
 Мингазова Ю.Р., 197
 Мирзаев Д.А., 182
 Мирзиярова Д.А., 141
 Мирошкина О.Н., 126, 144
 Митюк В.И., 59
 Михалицына Е.А., 89
 Михалёв К.Н., 63
 Могилюк Т.И., 171
 Мозговых С.Н., 90
 Мокшин А.В., 32, 141, 200, 331
 Молчанова А.Д., 297
 Моргунов Р.Б., 28
 Мороз А.И., 232
 Морозов Е.В., 142
 Морозов С.О., 183
 Морозова Н.В., 170
 Мосина Р.М., 198
 Москалев М.Е., 96
 Москвин А.С., 270, 271
 Мостовщикова Е.В., 203
 Мошкина Е.М., 127
 Мурзинова С.А., 199, 201, 206
 Муртазаев А.К., 106, 124, 125, 143, 147, 148
 Муртазаев К.Ш., 143
 Муртазаева А.А., 124
 Мухачев Р.Д., 321
 Мухучев А.А., 91
 Мызина В.А., 192
 Мясников Н.В., 61
 Мясоедов А.В., 249
 Накладов А.Н., 286
 Нарикович А., 216, 298
 Нарикович А.С., 187
 Насырбаев А., 259
 Наумов С.В., 168
 Наумова Л.И., 69, 70
 Неверов В.Н., 166, 167, 172, 174
 Незнахин Д.С., 33, 53, 88, 95, 98, 99
 Некрасов Е.С., 92
 Некрасов И.А., 243, 322
 Никитин Д.С., 259
 Никитина Е.В., 250
 Никифоров Г.А., 200
 Николаева Е.П., 61, 76

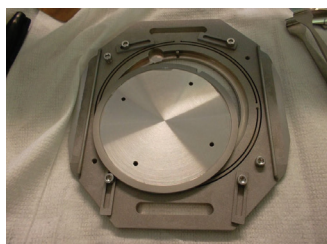
- Ничипурук А.П., 217, 218
Новотельнова А.В., 257
Норман Г.Е., 34
Носовец В.С., 93
Овсянников С.В., 170
Овчинников А.С., 157, 324, 325
Овчинников О.В., 276, 277, 283
Овчинников С.Г., 127, 169
Окулов И.В., 20
Орлов А.П., 21
Осинников Е.В., 201
Осипов В.В., 235
Павлов К.А., 299
Павлов Н.С., 322
Павлухина О.О., 144
Панов Ю.Д., 270, 271, 317
Панормов И., 216, 298
Паранин С.Н., 40, 236, 238
Паршакова М.А., 229, 230
Патраков Е.И., 302
Педос М.С., 237
Перевозчикова Ю.А., 173
Перепелица А.С., 276, 277, 283, 284
Пермяков Н.Е., 81
Перов Н.С., 50, 251
Петренёв И.А., 260, 300
Петров Д.А., 145
Петрова А.В., 301
Петрова Г.П., 301
Печина Е.А., 204
Пирогов А.Н., 103
Пирожков А.В., 202
Писарев В.В., 134, 146, 228
Платонов В.В., 235
Платонов С.П., 94
Поволоцкий И.И., 225, 231
Подгорных С.М., 168
Подлеснов Е., 247
Поздин А.В., 256
Поликарпов М.В., 294
Помякушин В.Ю., 105
Попов В.В., 137, 199, 201, 206
Попова М.Н., 17, 275, 297
Поспелов Е.А., 128
Постников М.С., 203, 207, 295, 302, 307, 308
Потапов Е.В., 95, 98
Прекул А.Ф., 56
Пресняков М.Ю., 204
Прищенко Д.А., 323
Проглядо В.В., 69, 70
Прокопьев Д.А., 63
Прохоров А.С., 278, 279
Проценко С.П., 149
Прудников В.В., 55, 129, 131, 150
Прудников П.В., 35, 55, 128–133, 150, 160, 161
Пряничников С.В., 207, 307
Пушкарев Г.В., 120, 323
Пушкарев И.А., 96
Пшеничный К.А., 97
Пятаков А.П., 61, 62, 76
Рабаданов М.Р., 252
Рагозина М.В., 95, 98
Радзивончик Д.И., 33, 99
Рамазанов Г.М., 74
Рамазанов М.К., 125, 143, 147, 148
Рассулов В.А., 289
Ремпель А.А., 264, 314
Ремпель С.В., 245
Ризаханова С.У., 191
Ризванова Т.Р., 148
Розанов Е.О., 149
Руденко А.Н., 120, 323
Руденко В.В., 169
Рукин С.Н., 237
Русалина А.С., 100
Русанов Б.А., 232, 250, 261
Русанов М.С., 101
Русанов С.Я., 285
Русских П.А., 238
Ручкин С.Е., 262
Рыбаков Ф.Н., 117
Рыбин Д.К., 194
Рыльцев Р.Е., 36, 108, 314
Рютин С.Б., 227
Савельев А.П., 172
Савин В.В., 85, 187
Савина Л.А., 85
Савочкин И.В., 113
Савченко С.С., 306
Саносян А.А., 102
Сантос А.М., 57
Сауц А.В., 247
Свалов А.В., 53, 82
Седанова Е.П., 197

- Сединин А.Д., 257
 Сектаров Э.С., 303
 Селезнева Н.В., 49, 90, 156, 269, 296
 Семенова О.И., 17, 275
 Семянникова А.А., 173
 Сергеева И.А., 301
 Сивков А.А., 259
 Сивцова Г.В., 152
 Сиделёв Д.В., 202, 262
 Сидоров В.Е., 232, 250, 261
 Сидоров В.Л., 263
 Силенкова Е.А., 260
 Симаков Н.С., 150
 Синицин А., 216, 298
 Синицин Н.И., 151
 Синченко А.А., 21
 Сирота М.А., 246
 Ситников Н.Н., 152, 204
 Скоков К.П., 33
 Скрипов П.В., 37, 225–227, 231
 Скулкина Н.А., 92
 Смирнов А.Н., 244
 Смирнов М.С., 276, 277, 283
 Снигирев А., 216, 298
 Снигирев А.А., 215, 281, 287, 288, 291, 294
 Снигирева И., 216, 298
 Снигирева И.И., 215, 281, 287, 294
 Снирирева И.И., 291
 Соколовский В.В., 38, 68, 71, 79, 86, 102, 126, 144
 Сокольский С.А., 104
 Сокольчик Д.П., 153
 Солдатов И.В., 83
 Солин Н.И., 64
 Соловьева А.Ю., 104
 Соломонов В.И., 292
 Сон Л.Д., 39
 Сорокин Л.М., 249
 Сороковилов М.Н., 85
 Спевак Е.Л., 270
 Спирин А.В., 40
 Спирина А.В., 292
 Сташков А.Н., 217, 218
 Стегайлов В.В., 41, 208
 Степанов Е.А., 120
 Степанова Е.А., 82, 100
 Стефанович С.Ю., 289
 Стогней О.В., 244
 Столбовский А.В., 199, 206
 Столбовский А.В., 201
 Стрельцов С.В., 42
 Струнина Я.Ю., 115
 Сундеев Р.В., 204
 Суреш К.Т., 315
 Суслов Е.А., 138
 Суслопарова А.Е., 105
 Сушникова А.А., 264
 Сыроватко Ю.В., 154
 Сыртанов М.С., 197, 202
 Сычев А.В., 25
 Сёмкин М.А., 103, 335
 Тааев Т.А., 106
 Табачкова Н.Ю., 192
 Таранов Д.В., 109
 Тарасов Е.Н., 95, 98
 Таскаев С.В., 44, 107
 Телегин А.В., 178
 Темнов В.В., 30
 Теплов В.С., 178
 Терещенко А.А., 324
 Терещенко О.Е., 43
 Тимофеева А.С., 325
 Тимохин А.С., 304
 Тимошенко С.П., 237
 Титов А.А., 203, 207, 308
 Титов А.Н., 138, 155, 170, 203, 207, 295, 296, 302, 307–309
 Тихонов Е.В., 235
 Токарев М.А., 205
 Толкачев В.А., 140
 Томин А.С., 224
 Топорова Н.М., 156
 Тукмакова А.С., 257
 Туруткин К.В., 174
 Тхоржевский И.Л., 257
 Тютюнник А.П., 248
 Улитко В.А., 271
 Ульянов М.Н., 107
 Упоров С.А., 108, 203, 314
 Упорова Н.С., 108
 Уржумцев А.Н., 109
 Урусова Н.В., 103
 Усачёв В.А., 335
 Усик М.О., 140
 Устинов В.В., 69, 70

- Устюгов А.М., 326
Файрушин И.И., 32
Фалахутдинов Р.М., 199, 201, 206
Федоров А.Е., 157
Федоров П.П., 286
Федорченко И.В., 52
Федосеев А.Д., 327
Федотенко Т.М., 215
Фещенко А.А., 110
Филипов М.А., 183
Филоненко В.П., 211
Флейта Д.Ю., 158
Фокин А.В., 248
Фролов А.В., 21
Хайруллина Р.Р., 159
Ханфланд М., 215
Харитонов О.Г., 140
Хацко С.Л., 335
Хизриев К.Ш., 106
Хизриев Ш.К., 111, 112
Ховайло В.В., 44
Ходзицкий М.К., 257, 293
Хосер А., 103
Хохлов В.Ю., 277
Храмова А.Е., 113
Хрустов В.Р., 40
Хуснутдинов Р.М., 159, 331
Цветков В.Б., 285, 286
Циберкин К.Б., 114, 115
Цымбалов А.В., 305
Чайка В.А., 85, 187
Чевычелова Т.А., 283, 284
Черепанова А.С., 116
Черкасова Н.Ю., 193, 194
Чернов Е.Д., 328
Черногорова О.П., 204
Чернышев В.А., 329
Чжан Т., 293
Чиков А.А., 271
Чикова О.А., 151
Чикунова Н.С., 199
Чиркунова Н.В., 247
Числов А.С., 192
Чистяков В.В., 168
Чичай К.А., 117, 298
Членова А.А., 78, 118
Чулков Е.В., 51, 165
Шавров В.Г., 30, 139, 140, 142
Шакиров Р.С., 160
Шалимова А.В., 204
Шандрюк Г.А., 139
Шапиев И.М., 252
Шапошников А.Н., 113
Шардаков Н.Т., 290
Шарин М.К., 109
Шахмин А.А., 293
Шахруханов У.М., 74
Швец ст. П., 232, 261
Швец П., 232, 250, 261
Шевырталов С., 298
Шевырталов С.Н., 294
Шелушинина Н.Г., 166, 167, 172, 174
Шеляков А.В., 152
Шерокалова Е.М., 93, 156, 296
Шикин А.М., 51, 165
Шилов А.О., 306
Ширшова П.Ю., 206
Шкварин А.С., 203, 207, 295, 296, 302, 307–309
Шкварина Е.Г., 170, 203, 207, 307, 308
Шляхтич М.А., 161
Шустин М.С., 327, 330
Шутикова М.И., 208
Щапова Е.А., 217, 218
Щелкачев Н.М., 36, 108
Эмурлаев К.И., 209, 210
Энкович П.В., 211
Эстемирова С.Х., 108
Юнкин В.А., 287, 294
Юнусов М.Б., 331
Юсупов Д.М., 119
Ядвичук А.В., 76
Яковлев Д.Р., 113
Яковлев И.А., 120, 323
Яковлев Н.Н., 265
Яковлева М.Ю., 94
Якунин М.В., 166, 167, 174
Яничкович Д., 232, 250, 261
Ярмошенко Ю.М., 203

ОБОРУДОВАНИЯ ДЛЯ ТРАВЛЕНИЯ И ОСАЖДЕНИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК PLASSYS

СЕРИЯ МР — ВЫСОКОВАКУУМНЫЕ УСТАНОВКИ НАПЫЛЕНИЯ



ОСНОВНЫЕ СВЕДЕНИЯ

- камера цилиндрической или прямоугольной формы, с фронтальным или верхним расположением дверцы;
- диаметр стандартных камер 350, 400, 450, 600 или 900 мм;
- шлюзовой загрузчик двух типов: обеспечивающий загрузку одиночных пластин или одновременно нескольких пластин (кассетного типа);
- магнетроны постоянного или высокочастотного переменного тока прямоугольной или круглой формы;
- конфигурации с верхним или нижним расположением магнетронов;
- создание кластерных систем, конфокальное расположение источников, одновременное напыление нескольких материалов;
- статическое и динамическое окисление во время осаждения, планетарное вращение, вертикальные перемещения держателя подложек;
- RF/DC смещение на подложку;
- нагрев подложки до 1000°C.

ПРИМЕНЕНИЕ

- нанесение однослойных и многослойных тонких пленок;
- магнитные пленки;
- оптические покрытия;
- совместное напыление различных материалов.

ТЕХНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

- диаметр стандартных камер: 350, 400, 450, 600 или 900 мм;
- тип напыления: реактивный/нереактивный;
- нагрев подложки: до 1000°C.

Тезисы докладов
XXI Всероссийской школы-семинара
по проблемам физики конденсированного состояния вещества
г. Екатеринбург, 18 – 25 марта 2021 г.

ISBN 978-5-6045774-1-7



9 785604 577417

УДК 538.9(043.2)
ББК 22.37я431

Материалы школы-семинара
публикуются в авторской редакции

Оформление — П.А. Игошев, Д.И. Радзивончик, С.М. Бахарев,
Н.Н. Гапонцева, З.Н. Волкова, Н.С. Павлов, А.С. Панасенко
Дизайн обложки — П.А. Агзамова
Тираж печатной версии 100 экз.

ИФМ УрО РАН
620108, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
тел. (343) 378-38-65
e-mail: spfks@imp.uran.ru